

**Rechenmethoden-  
entwicklung zur  
Sicherheitsbewertung  
schneller Systeme  
und V/HTR**

## Rechenmethoden- entwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR

Armin Seubert  
Jeremy Bousquet  
Joachim Herb  
Hristo Hristov  
Georg Lerchl  
Ihor Pasichnyk  
Daniel von der Cron

September 2016

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde mit Mitteln des BMWi unter dem Kennzeichen RS1515 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

**Deskriptoren**

ADS, code development, coupled code, fast reactor, high temperature gas cooled reactor, HTGR, safety assessment, SCWR, SFR, SMR, subcritical system, thermal hydraulics, 3D neutronics

## **Kurzfassung**

Das übergeordnete Ziel des Forschungsvorhabens RS1515 „Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR“ ist die Weiterentwicklung der Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung fortgeschrittener flüssigmetallgekühlter kritischer und unterkritischer Systeme mit externen Neutronenquellen sowie gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren (V/HTR) vom Kugelhaufen- und prismatischen bzw. Block-Typ. Dies umfasst die Weiterentwicklung sowohl der reaktorphysikalischen als auch der thermohydraulischen Rechenmethodik und deren Überprüfung bzw. Anwendung. Die Schwerpunkte der durchgeführten Arbeiten liegen in (a) der 3D-Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien und Modellierung von Spallationsquellen, (b) der Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für flüssigmetallgekühlte Systeme und (c) der Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für gasgekühlte V/HTR. Der vorliegende Bericht dokumentiert die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse.



## **Abstract**

The overall objective of the research project RS1515 “Methods development for the safety assessment of fast spectrum systems and V/HTR” is the further development of the calculation methodologies of GRS for the safety assessment of advanced liquid-metal cooled critical and subcritical systems with external neutron sources and gas-cooled high temperature reactors (V/HTR) of pebble bed and prismatic block type. This requires development efforts of both the reactor physics and thermal hydraulics calculation methods and their verification and application. The conducted work focuses on (a) 3-D neutron kinetics of source-driven subcritical systems with complex geometries and modelling of neutron spallation sources, (b) further development of reactor physics and thermal hydraulics calculation methods for liquid-metal cooled systems, and (c) further development of reactor physics and thermal hydraulics calculation methods for gas-cooled V/HTR. The present report documents the performed work and obtained results.



# Inhaltsverzeichnis

	<b>Kurzfassung.....</b>	<b>I</b>
	<b>Abstract.....</b>	<b>III</b>
<b>1</b>	<b>Zielsetzung und Aufgabestellung.....</b>	<b>1</b>
1.1	Deterministische 3D-Neutronenkinetik für unterkritische quellgetriebenen Systeme mit komplexer Geometrie und Modellierung von Spallationsquellen .....	2
1.2	Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme .....	2
1.3	Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren.....	3
1.4	Thermohydraulik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme .....	3
1.5	Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren.....	4
1.6	Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation- IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors .....	4
1.7	Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA.....	5
<b>2</b>	<b>Planung und Ablauf des Vorhabens.....</b>	<b>7</b>
2.1	Ausgangssituation und Stand von Wissenschaft und Technik bei Be- ginn des Vorhabens.....	7
2.1.1	Reaktorphysik und gekoppelte Rechenmodelle für quellgetriebene unterkritische Systeme.....	7
2.1.2	Reaktorphysik, Thermohydraulik und gekoppelte Rechenmodelle für V/HTR.....	8
2.1.3	Fluiddynamische Modellierung von Flüssigmetall-gekühlten Reaktoren mit System- und CFD-Codes .....	9
<b>3</b>	<b>AP 1: Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien.....</b>	<b>11</b>
3.1	AP 1.1: 3D-Neutronenkinetik mit vereinfachtem Transportansatz mit externen lokalisierten Quellen auf unstrukturierten Gittern.....	11
3.1.1	Weiterentwicklung von PARCS zur Simulation von Transienten mit zeitabhängigen externen Neutronenquellverteilungen .....	11
3.1.2	Berechnung der axialen Leistungsverschiebung in PARCS .....	14



3.1.3	Erweiterung von PARCS zu Prozessierung von NEMTAB- Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	15
3.2	AP 1.2: Auswertung existierender Rechenprogramme für flüssigmetallgekühlte unterkritische Systeme.....	17
3.3	AP 1.3: Auswertung von Ansätzen zur Modellierung von Spallationsquellen für deterministische Neutronenkinetikprogramme.....	18
3.3.1	Spallationsprozesse und Rechenprogramme.....	18
3.3.2	Berechnung einer Spallationsneutronen-Quellverteilung mit MCNPX.....	20
3.4	AP 1.4: Verifikation anhand von Testfällen und Benchmarks.....	22
3.4.1	OECD/NEA-Benchmark zu einem beschleunigergetriebenen Brenner für minore Aktiniden.....	22
3.4.2	Monte-Carlo-Modell und Erzeugung von Weniggruppen- Wirkungsquerschnittsdaten.....	23
3.4.3	Deterministische 3D-Kernberechnungen des stationären Zustands.....	28
3.4.4	Äquivalentes PARCS-Modell in hexagonaler Geometrie.....	30
3.4.5	Transientenrechnungen mit externer Neutronenquellverteilung.....	34
<b>4</b>	<b>AP 2: Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme.....</b>	<b>37</b>
4.1	AP 2.1: Kopplung Reaktorphysik mit Thermohydraulik.....	37
4.2	AP 2.2: Reaktorphysikalische Modellierung thermo-struktureller Rückwirkungen.....	37
4.2.1	Radiale Ausdehnung der Kerngitterplatte.....	38
4.2.2	Axiale Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr.....	48
4.2.3	Methode.....	48
4.2.4	Implementierung und Testrechnungen.....	51
4.2.5	Zusammenfassung.....	54
4.3	AP 2.3: Erstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten.....	55
4.3.1	Medium Size Oxide Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions.....	55
4.3.2	Medium Size Metallic Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions.....	59
4.3.3	Der Kern der geplanten Anlage MYRRHA.....	64

4.4	AP 2.4 und 2.5: Erstellung von Kernmodellen kritischer und unterkritischer Systeme und Berechnung ausgewählter stationärer und transienter Probleme.....	68
4.4.1	Medium Size Oxide Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions.....	68
4.4.2	Medium Size Metallic Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions.....	70
4.4.3	Stationäre 3D-Kernberechnungen zu MYRRHA .....	76
4.4.4	Gekoppelte transiente 3D-Kernberechnungen zu MYRRHA .....	83
4.4.5	Äquivalente cartesische Modellierung hexagonaler Kernanordnungen ....	84
<b>5</b>	<b>AP 3: Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren.....</b>	<b>89</b>
5.1	AP 3.1: Kopplung von TORT TD/ATTICA3D mit ATHLET zur Primärkreislaufsimulation von Kugelhaufen-V/HTR.....	89
5.2	AP 3.2: Erstellung konsistenter Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für den prismatischen V/HTR.....	93
5.2.1	Depletion Exercise des MHTGR-350MW-Benchmarks .....	93
5.2.2	DRAGON4-Modellierung .....	94
5.2.3	HELIOS-Modellierung in Verbindung mit Reactivity equivalent Physical Transform (RPT).....	96
5.3	AP 3.3: 3D-Kernberechnungen für prismatische V/HTR.....	102
5.3.1	Der MHTGR-350MW-Benchmark .....	102
5.3.2	Modell eines HTTR-Kerns.....	106
<b>6</b>	<b>AP 4: Thermohydraulik flüssigmetallgekühlter Systeme.....</b>	<b>111</b>
6.1	AP 4.1: Weitere Ertüchtigung des Codes ATHLET für die Simulation von Transienten in flüssigmetallgekühlten Reaktoren .....	111
6.1.1	Stoffwerte für flüssiges und dampfförmiges Natrium .....	112
6.1.2	Modellierung nichtkondensierender Gase.....	124
6.1.3	Wärmeübergangsmodell.....	126
6.1.4	Erste Testrechnungen .....	127
6.1.5	Zusammenfassung und weiteres Vorgehen .....	128

6.2	AP 4.2: Anwendung des CFD-Codes OpenFOAM zur Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in flüssigmetallgekühlten Anlagen.....	129
6.2.1	Ausbau der OpenFOAM-Kompetenz .....	130
6.2.2	Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in Flüssigmetall-gekühlten Anlagen mit OpenFOAM.....	143
6.3	AP 4.3: Bereitstellung einer gekoppelten Version ATHLET OpenFOAM für Sicherheitsanalysen vollständiger Reaktorsysteme .....	149
6.3.1	Architektur der Kopplung .....	150
6.3.2	Verifikation der Kopplungsimplementierung.....	164
6.3.3	Validierung der Kopplung.....	171
6.3.4	Zusammenfassung .....	183
6.4	AP 4.4: Erstellung von ATHLET-Modellen ausgewählter flüssigmetallgekühlter Systeme.....	183
6.4.1	ASTRID .....	184
6.4.2	MYRRHA.....	187
<b>7</b>	<b>AP 5: Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren ....</b>	<b>189</b>
7.1	AP 5.1: Implementierung geeigneter Modelle zur Simulation des Reaktorkerns von V/HTR Reaktoren mit dem Systemcode ATHLET .....	189
7.1.1	Modellierung der prismatischen Brennelementblöcke .....	189
7.1.2	MHTGR-350-Simulation.....	192
7.1.3	Modellierung des HTR-10 mit ATHLET.....	194
7.2	AP 5.2: Entwicklung eines ATHLET-Kreislaufmodells.....	201
<b>8</b>	<b>AP 6: Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation-IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors .....</b>	<b>205</b>
8.1	Verbesserung der Stoffwertberechnung in der Umgebung des kritischen Punktes in ATHLET .....	205
8.1.1	Pseudokritische Temperatur .....	206
8.1.2	Thermodynamische Stoffgrößen.....	209
8.1.3	Übergang zwischen unter- und überkritischem Stoffwertpaket.....	211
8.1.4	Grafische Darstellung der thermodynamischen Stoffwerte.....	211

8.1.5	Testrechnungen mit dem neuen Stoffwertpaket.....	219
8.2	Erweiterungen in ATHLET für flüssigmetallgekühlte Systeme.....	223
<b>9</b>	<b>AP 7: Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA .....</b>	<b>225</b>
9.1	Das EU-Projekt ESNII+.....	225
9.1.1	Neutronenphysikalische Modellierung des ASTRID-Kerns.....	225
9.1.2	Thermohydraulische Modellierung des Kerns und Primärsystems von ASTRID in ATHLET .....	234
9.1.3	Simulation des Unprotected Loss Of Flow (ULOF) in ASTRID mit ATHLET.....	239
9.1.4	Zeitliche Verläufe wichtiger Kenngrößen der ATHLET-Simulation der ULOF-Transiente .....	241
9.1.5	Anmerkungen zu den Besonderheiten der ATHLET-Simulation.....	243
9.2	Das EU-Projekt MAXSIMA.....	244
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>253</b>
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>259</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>269</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>283</b>



# 1 Zielsetzung und Aufgabestellung

Die Zielsetzung dieses Vorhabens ist die Weiterentwicklung der Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung fortgeschrittener flüssigmetallgekühlter kritischer und unterkritischer Systeme mit externen Neutronenquellen sowie gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren (V/HTR) vom Kugelhaufen- und prismatischen bzw. Block-Typ. Das Gesamtziel umfasst folgende Eckpunkte:

- 3D-Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien und Modellierung von Spallationsquellen,
- Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für flüssigmetallgekühlte Systeme,
- Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für gasgekühlte V/HTR.

Darüber hinaus beteiligt sich die GRS an den folgenden beiden, derzeit laufenden EU-Projekten:

- ESNII+ (European Sustainable Nuclear Industrial Initiative, "Preparing ESNII for Horizon 2020",
- MAXSIMA (Methodology, Analysis and eXperiments for the „Safety In MYRRHA“ Assessment.

Das Vorhaben orientiert sich vorwiegend an europäischen Aktivitäten zur Implementierung fortgeschrittener Reaktorkonzepte, insbesondere flüssigmetallgekühlter schneller Systeme der Generation IV. Dazu zählen auch beschleunigergetriebene unterkritische Systeme (Accelerator Driven System, ADS), die als besonders aussichtsreich zur Transmutation großer Mengen radioaktiven Abfalls hinsichtlich Menge und Toxizität gelten. Das Generation-IV-Konzept des gasgekühlten Hochtemperaturreaktors eignet sich neben effizienter Erzeugung elektrischer Energie auch als Prozesswärmequelle für energieintensive thermo-chemische (Hochtemperatur-)Prozesse. Ziel ist es, Rechenmodelle und Rechenmethodik der GRS für die Sicherheitsbewertung dieser Systeme auf ein dem LWR vergleichbares Niveau zu bringen. Dies wird durch die nachfolgend skizzierten Arbeitspakete erreicht.

## **1.1 Deterministische 3D-Neutronenkinetik für unterkritische quellgetriebenen Systeme mit komplexer Geometrie und Modellierung von Spallationsquellen**

Die Störfallanalytik quellgetriebener unterkritischer Systeme erfordert die Simulation externer zeitabhängiger lokalisierter Neutronenquellen im Neutronenkinetikcode sowie die eigentliche Modellierung der Spallationsquelle. Die Existenz externer Quellen, deren Intensitäten abrupten Variationen unterworfen sein können, kann ebenso abrupte Änderungen auf das reaktorphysikalische und thermohydraulische Verhalten unterkritischer Systeme haben. Ferner sind die Kernausslegungen flüssigmetallgekühlter Systeme durch komplexe, häufig hexagonale (Brennelement-)Geometrien gekennzeichnet. Neutronentransport- bzw. -diffusionscodes für Cartesische oder Zylindergeometrie sind für solche Designs nicht direkt einsetzbar. Stattdessen wird der an der GRS verfügbare Code PARCS eingesetzt, um die Möglichkeit der Simulation von Transienten mit externen zeitabhängigen Neutronenquellverteilungen erweitert und mit der aktuellen ATHLET-Version für die Simulation flüssigmetallgekühlter Systeme gekoppelt werden. Die Überprüfung der Erweiterung von PARCS zur Simulation externer zeitabhängiger Neutronenquellverteilungen erfolgt durch umfangreiche Vergleiche mit TORT-TD.

## **1.2 Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme**

In flüssigmetallgekühlten Systemen haben thermo-strukturelle Reaktivitäts-Rückwirkungen infolge temperaturabhängiger Ausdehnungen von Brennstoff und Kernstrukturen großen Einfluss auf Neutronenbilanz und -leckage und sind somit sicherheitsrelevant. Es werden geeignete Modelle entwickelt, die die genannten Rückwirkungsmechanismen neutronenphysikalisch räumlich aufgelöst abbilden. Das Modell zur axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr wurde in PARCS implementiert. Informationen über temperaturabhängige Strukturausdehnungen können in einfachen Modellen mittels Ausdehnungskoeffizienten berechnet werden. Das gesamte Verfahren wird durch geeignete Testrechnungen überprüft. Für 3D-Kernberechnungen wird die bei LWR übliche Rechenmethodik zur Bereitstellung konsistenter Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte auf flüssigmetallgekühlte Systeme übertragen. Als Modellsysteme werden sowohl mit Natrium als auch mit eutektischer Blei-Wismut-Legierung gekühlte Systeme (z. B. der Kern der MYRRHA-Anlage) betrachtet. Die Überprüfung geschieht mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode unter Verwendung nuklearer Punktdaten, wobei neben detaillierten Ganzkernmodellen auch verschiedene Methoden zur Weniggruppen-Wirkungsquerschnittserzeugung untersucht werden. Für gekoppelte Kern-

und Transientenberechnungen werden parametrisierte Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken generiert, die in Verbindung mit dem gekoppelten Programmsystem PARCS/ATHLET zur Transientensimulation eingesetzt werden.

### **1.3 Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren**

Für den Kugelhaufen-V/HTR wird der Simulationsumfang von TORT-TD/ATTICA3D durch Kopplung mit der aktuellen ATHLET-Version auf die Modellierung des Primärkreises erweitert. Die Erprobung von TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET erfolgt anhand des PBMR-400-Designs, für das ein vorliegendes Kernmodell in TORT-TD/ATTICA3D angepasst wird, z. B. bezüglich der Abbildung zwischen Reaktorphysik und Thermohydraulik. Dazu wird ein ATHLET-Kreislaufmodell erstellt, wobei erforderliche Anpassungen bzw. Erweiterungen am ATHLET-Modellumfang vorgenommen werden, siehe Abschnitt 1.5. Für den prismatischen V/HTR wird die Rechenmethodik zur Erzeugung konsistenter Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte betrachtet, insbesondere in Bezug auf Berücksichtigung der doppelten Heterogenität in Brennstoff und Absorberstäben sowie Superzellmodelle. Dazu werden deterministische Modelle entwickelt und mit Monte-Carlo-Modellen überprüft. Dies erfolgt u.a. im Rahmen der Teilnahme am internationalen OECD-Benchmark zum MHTGR-350MW-Kerndesign. Für 3D-Kernberechnungen ausgewählter V/HTR-Designs werden 3D-Modelle z. B. für DYN3D sowie geeignete Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken erstellt. Als Modellsysteme dienen das MHTGR-350MW-Kerndesign im gleichnamigen OECD-Benchmark als auch der HTTR.

### **1.4 Thermohydraulik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme**

Zur Simulation von Transienten in flüssigmetallgekühlten Systemen werden im Systemcode ATHLET entsprechende Modell- und Codeerweiterungen vorgenommen. Da sich die Simulation der Flüssigmetalle gegenwärtig auf einphasige flüssige Kühlmittel – abgesehen von der Modellierung von Inertgasen – beschränkt, wird in einem ersten Schritt das Verdampfen und Kondensieren der Flüssigmetalle, speziell Natrium, modelliert. Zur Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in flüssigmetallgekühlten Anlagen werden CFD-Modelle zur 3D-Simulation entwickelt und überprüft. Die bewährte bisherige Praxis, die ATHLET-Entwicklung durch externe Validierung und Mitarbeit an der Modellentwicklung zu unterstützen, wird dabei unbedingt fortgesetzt. Um ATHLET weiterhin lizenzfrei zur Verfügung stellen zu können, erfolgt



der Einsatz des ebenfalls lizenzfreien CFD-Codes OpenFOAM. OpenFOAM bietet vor allem über den direkten Zugriff auf den Quellcode gute Voraussetzungen zur effizienten Implementierung einer Schnittstelle zu ATHLET sowie mögliche Modellerweiterungen. Für ausgewählte flüssigmetallgekühlte Systeme sollen ATHLET-Modelle zur gekoppelten Simulation ausgewählter flüssigmetallgekühlter Systeme mit z. B. PARCS entwickelt werden. Insbesondere werden für ASTRID und MYRRHA ATHLET-Modelle erstellt.

### **1.5 Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren**

Zur Simulation der thermohydraulischen Vorgänge im Kern eines V/HTR mit dem Systemcode ATHLET werden geeignete Modelle entwickelt. Die prismatische Bockstruktur des Reaktorkerns stellt dabei besondere Anforderungen an die Modellentwicklung in ATHLET. Dabei wird die Idee verfolgt, äquivalente Fluidodynamik- und Wärmetransportmodelle für prismatische Graphitblocksäulen in ATHLET zu entwickeln, wobei das ursprünglich für den Kugelhaufentyp entwickelte TRISO-Wärmeleitmodell an die zylindrischen Brennstoff-Compacts angepasst wird. Die Teilnahme am OECD-Benchmark zum MHTGR-350MW-Kerndesign bietet die Gelegenheit der ATHLET-Modellentwicklung anhand einer definierten thermohydraulischen Exercise und der Überprüfung durch Vergleich mit anderen Benchmarkteilnehmern. Ferner wird in ATHLET ein Primärkreismodell für das PBMR-400-Design (Kugelhaufentyp) mit Gasturbine und Kompressor entwickelt und – soweit möglich – getestet bzw. überprüft.

### **1.6 Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation-IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors**

Das Generation-IV-Konzept des superkritischen Reaktors (HPLWR, SCWR) ist Gegenstand internationaler und europäischer Forschungsaktivitäten. Bereits im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS1191 wurde der Modellumfang von ATHLET aufgrund der besonderen Anforderungen zur sicherheitstechnischen Bewertung von Konzepten für superkritische Reaktoren erweitert. Es ist jedoch zu erwarten, dass neue Forschungsergebnisse Anpassung und Erweiterungen der Neutronenkinetik- und Thermohydraulikcodes zur Sicherheitsbewertung erforderlich machen. Dies betrifft auch kleinere modulare Reaktoren (Small Modular Reactors, SMR), die derzeit international ins Blickfeld rücken. Daher ist es notwendig, die Rechenprogramme der GRS zur Sicherheitsbewertung stets auf dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik zu halten.

## 1.7 Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA

Im Rahmen der nuklearen Kogeneration stehen Sicherheitsaspekte, insbesondere die Kopplung einer kerntechnischen Anlage mit konventionellen Anlagen, im Vordergrund. Die im Arbeitsprogramm *Euratom for Nuclear Research and Training Activities* vorgesehenen Aktivitäten hierzu sollten verfolgt und eine Beteiligung angestrebt werden. Ferner soll im Projekt MAXSIMA (Methodology, Analysis and eXperiments for the Sa-fety in MYRRHA Assessment) mitgewirkt werden. Die GRS leistet dort einen Beitrag zu Workpackage WP2 (Safety Analysis in support of MYRRHA) von MAXSIMA, speziell zu Task 2.2 „Transient analyses using system codes“ mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit den GRS-Programmsystemen SUSA/XSUSA. Darüber beteiligt sich die GRS am EU-Projekt ESNII+. Die Initiative ESNII bündelt europäische Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten (F&E) auf dem Gebiet schneller (u. a. flüssigmetallgekühlter) Generation-IV-Reaktorkonzepte mit dem Ziel der Weiterentwicklung der Technologie sowie der Identifizierung von F&E bezüglich Sicherheitsbewertung. Im Rahmen von ESNII+ werden Beiträge zu Workpackage 6 (Core Safety) geleistet, und zwar werden in Task 6.1 (Core safety calculations for the ESNII reactors) die Subtasks 6.1.2 (ASTRID core safety coefficients) und 6.1.3 (ASTRID core behaviour under design-basis accident conditions) bearbeitet.



## 2 Planung und Ablauf des Vorhabens

Aus den obigen Zielsetzungen und Aufgabenstellungen wurde die folgende grobe Projektstruktur für RS1515 mit insgesamt sieben Arbeitspaketen abgeleitet:

- **Arbeitspaket 1:** Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien
- **Arbeitspaket 2:** Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme
- **Arbeitspaket 3:** Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren
- **Arbeitspaket 4:** Thermohydraulik flüssigmetallgekühlter Systeme
- **Arbeitspaket 5:** Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren
- **Arbeitspaket 6:** Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation-IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors
- **Arbeitspaket 7:** Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA

Das Projekt war auf eine Dauer von drei Jahre ausgelegt; diese wurde in etwa eingehalten. Auch dem Projektablaufplan wurde im Wesentlichen entsprochen, es kam zu keinen nennenswerten Verzögerungen oder Änderungen des Projektinhalts bzw. der Projektziele.

Im folgenden Abschnitt wird die Ausgangssituation bei Beginn des Vorhabens RS1515 im März 2013 knapp skizziert. Die in den einzelnen Arbeitspaketen durchgeführten Arbeiten und erreichten Ziele (untergliedert in die o.g. Arbeitspunkte) werden dann in den folgenden Kapiteln dokumentiert.

### 2.1 Ausgangssituation und Stand von Wissenschaft und Technik bei Beginn des Vorhabens

#### 2.1.1 Reaktorphysik und gekoppelte Rechenmodelle für quellgetriebene unterkritische Systeme

Zur Transientenanalyse flüssigmetallgekühlter Systeme werden u. a. die Codes SASSYS-1 und SAS4A und RELAP5-3D eingesetzt. In SYSSYS-1 und SAS4A werden die Reaktordynamik vereinfacht durch Punktkinetik dargestellt und in RELAP5-3D mittels nodaler Diffusionsapproximation beschrieben. Zur Simulation quellgetriebener unterkritischer Systeme mit schnellem Spektrum werden in SAS4ADS /DAG02/ Reaktivi-

tätskoeffizienten und andere Größen der punktkinetischen Gleichungen mit dem 3D-Diffusionscode CITATION /FOW71/ berechnet und dem Code SAS4A zugeführt. Ein ähnlicher Ansatz ist durch Kopplung von DIF3D-K bzw. VARIANT-K mit SAS4A und SASSYS-1 gegeben. Bei DIF3D-K und VARIANT-K handelt es sich um nodale Diffusions- bzw. Transportcodes für hexagonale Geometrien. Ein direkter zeitabhängiger Transportansatz zur Simulation quellgetriebener unterkritischer Systeme ist mit dem an der GRS entwickelten 3D-Code TORT-TD implementiert. In Kooperation mit dem KIT wurde das unterkritische System YALINA-Thermal mit gepulster Neutronenquelle in TORT-TD modelliert.

### **2.1.2 Reaktorphysik, Thermohydraulik und gekoppelte Rechenmodelle für V/HTR**

In jüngster Zeit wurden die Simulationscodes für V/HTR durch gekoppelte 3D-Modelle auf ähnlich hochentwickelten Stand wie bei LWR gebracht. So wurde der FZJ-Code TINTE für 2D-Transientenanalysen in Zwei-Gruppen-Diffusionsnäherung und Kopplung mit einem an THERMIX angelehntes Thermohydraulikmodell durch Nachrüstung einer Mehrgruppen-Option zu MGT weiterentwickelt. Seitens der Neutronenkinetik werden zunehmend (vereinfachte) 3D-Transportmethoden eingesetzt, etwa DYN3D-HTR des HZDR, PARCS der Purdue-Universität oder DORT-TD und TORT-TD der GRS, wobei letztere direkte zeitabhängige 2D- bzw. 3D-Transportmethoden ( $S_N$ -Verfahren) implementieren. Aktuelle Entwicklungen, die über das weit verbreitete 2D-Thermohydraulikprogramm THERMIX hinausgehen, stellen 3D-Modelle der Thermohydraulik in Brennstoff und Kernbehälter zur Verfügung, etwa ATTICA3D der Universität Stuttgart für das Kugelhaufen- und Blockdesign oder DYN3D-HTR und AGREE für den Blocktyp. ATTICA3D verfügt über 3D-Modelle für Wärmeleitung, Konvektion und Strahlung, wobei der Kern als poröses Medium betrachtet wird. Das Programm ist bereits mit dem in der GRS entwickelten 3D-Neutronentransportcode TORT-TD gekoppelt /SEU12/. ATTICA3D wird im Rahmen des laufenden Vorhabens 1501382 auf unstrukturierte Gitter zur Berechnung der Vorgänge im Blocktyp- V/HTR erweitert. In DYN3D-HTR wurde insbesondere das interne Wärmeleitmodell den Anforderungen des prismatischen V/HTR angepasst, indem die 2D-Wärmeleitungsgleichungen auf der Basis eines Finite-Volumen-Ansatzes mit gleichseitigen Dreiecksprismen gelöst werden. Zu den Spektralcodes mit Option zur Behandlung doppelter Heterogenität im TRISO-Brennstoff zählen u.a. MICROX-2, DRAGON und SCALE. Der integrale Transportcode MICROX-2 löst die B1-Gleichungen in sphärischer, zylindrischer oder platten-

förmiger 1D-Geometrie. Der Open-Source-Code DRAGON erlaubt flexiblere 2D-Geometrien sowie die Anbindung verschiedener nuklearer Punktdatenbibliotheken. Die Arbeiten sollen auch in Kooperation mit der Universität Stuttgart durchgeführt werden.

### **2.1.3 Fluidynamische Modellierung von Flüssigmetall-gekühlten Reaktoren mit System- und CFD-Codes**

Zur Analyse flüssigmetallgekühlter Reaktoranlagen mit Systemcodes wurden deren Modelle für die Thermohydraulik derartiger Anlagen erweitert. Beispiele hierfür sind die weit verbreiteten Systemcodes RELAP (NRC) und CATHARE (IRSN). In der GRS wurde ATHLET zur Simulation flüssigmetallgekühlter Reaktoranlagen erweitert. Dafür wurden geeignete Stoffwertpakete implementiert, die die thermodynamischen wie auch die Transportgrößen für einphasiges flüssiges Natrium, Blei und Blei-Wismut eutektisch (LBE) berechnen. Die Flüssigmetalle können mit den in ATHLET vorhandenen Inertgasen kombiniert werden, so dass damit Ausgleichsbehälter simuliert werden können. Darüber hinaus kann auch zweiphasige Strömung (ohne gasförmiges Metall) gerechnet werden, was beispielsweise für Auftriebspumpen genutzt werden kann. Zur Berechnung des Wärmeübergangs von Strukturen an Flüssigmetall wurden geeignete Korrelationen eingebaut.

Die Modellierungstiefe einzelner Phänomene, insbesondere mehrdimensionaler Strömungen und Temperaturverteilungen, ist bei Systemcodes begrenzt. Es existieren deshalb schon Kopplungen von Systemcodes mit CFD-Codes, etwa CATHARE-TRIO, RELAP-FLUENT oder ATHLET-CFX. Die Anwendung von CFD-Codes zur Modellierung einzelner Komponenten flüssigmetallgekühlter Reaktorsysteme ist bereits sehr weit fortgeschritten. Gezielte Aktivitäten waren u.a. Gegenstand des EU-Projekts THINS. Die Ergebnisse aus diesem Projekt sollen auch für die Entwicklungsarbeiten in dem vorliegenden Projekt angewendet werden.



### 3 AP 1: Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien

#### 3.1 AP 1.1: 3D-Neutronenkinetik mit vereinfachtem Transportansatz mit externen lokalisierten Quellen auf unstrukturierten Gittern

##### 3.1.1 Weiterentwicklung von PARCS zur Simulation von Transienten mit zeitabhängigen externen Neutronenquellverteilungen

Der Einsatz beschleunigergetriebener Systeme (Accelerator Driven Systems, ADS) wird weltweit in Betracht gezogen zur Transmutation langlebiger radiotoxischer Nuklide in abgebrannten Kernbrennstoffen. Ein ADS ist ein kerntechnische Einrichtung, die unterkritisch betrieben und deren Kettenreaktion durch eine externe Spallations-Neutronenquelle aufrechterhalten wird. Die sicherheitstechnische Bewertung von ADS erfordert, insbesondere bei Transientenanalysen, den Einsatz deterministischer Transportcodes, die in der Lage sind, das Raum-Zeit-Verhalten der Neutronenquelle zu modellieren. Die Gesamteigenschaften von ADS werden dabei entscheidend vom Raum-Zeit-Verhalten der externen Neutronenquelle bestimmt. Es ist daher notwendig, sowohl Verfahren zur adäquaten Darstellung der Neutronenquelle zu entwickeln als auch zeitabhängige deterministische Transportcodes für die Behandlung externer zeitabhängiger Neutronenquellen zu ertüchtigen. Im Folgenden wird die Erweiterung von PARCS zur Berücksichtigung zeitabhängiger externer Neutronenquellverteilungen beschrieben.

Die Erweiterung von PARCS zur Simulation von Transienten mit zeitabhängigen externen Neutronenquellverteilungen beruht auf der expliziten zeitabhängigen Berücksichtigung des externen Quellterms  $q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  der zeitabhängigen Neutronentransportgleichung:

$$\left[ \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\vec{\Omega}} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \right] \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) + \chi_g (1 - \beta) \sum_{g'} \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l c_l(\vec{r}, t)$$

Darin ist  $\phi_g(\vec{r}, t)$  der skalare Neutronenfluss der Energiegruppe g, welcher aus dem Winkelfluss  $\psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  durch Integration über den gesamten Raumwinkelbereich folgt.



Im Übrigen wurde Standardnotation verwendet. Die Anwendung des voll-impliziten Zeitintegrationsverfahrens resultiert in der Gleichung

$$\begin{aligned} & [\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \sigma'_g(\bar{r})] \psi_g^{\tau+1}(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \\ & = \sum_{g'} \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \sigma_{gg'}(\bar{r}, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \psi_{g'}^{\tau+1}(\bar{r}, \bar{\Omega}') + \chi'_g \sum_{g'} \nu \sigma_{fg'}(\bar{r}) \Phi_{g'}^{\tau+1}(\bar{r}) + q'_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) \end{aligned}$$

die in jedem Zeitschritt einem Fixed-Source-Problem entspricht mit folgendem zeitabhängigen Quellterm:

$$q'_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) := q_g^{\tau+1}(\bar{r}, \bar{\Omega}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \psi_g^{\tau}(\bar{r}, \bar{\Omega}) + \frac{1}{\Delta t} \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l c_l^{\tau}(\bar{r})$$

Der erste Term stellt den hier interessierenden zeitabhängigen externen Quellterm dar; die übrigen Terme resultieren aus der Zeitdiskretisierung und der Dynamik der verzögerten Neutronen. Dabei wurden die Abkürzungen  $\sigma'_g(\bar{r}) := \sigma_g^{\text{tot}}(\bar{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t}$  für den modifizierten totalen Wirkungsquerschnitt und  $\chi'_g := \chi_g(1 - \beta) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l \beta_l$  für das modifizierte Spaltspektrum verwendet.

Die Implementierung in PARCS orientiert sich an den Erfahrungen mit den entsprechenden Programmerweiterungen von TORT-TD. Im Gegensatz zu TORT-TD löst PARCS jedoch die Diffusionsgleichung, so dass die Winkelabhängigkeit des Neutronenflusses entfällt. Dies bedeutet auch, dass die externe Neutronenquelle isotrop und nicht (wie in TORT-TD) als Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen gegeben ist. Da Systeme mit schnellem Neutronenspektrum meist Brennelemente mit hexagonalem Querschnitt aufweisen, wurden die PARCS-Programmerweiterungen für den TPEN-Solver (Triangle-based Polynomial Expansion Nodal /CHO01/) vorgenommen.

Die Zeitabhängigkeit der Quelle wird durch ihre Werte zu frei wählbaren Zeitpunkten vorgegeben. Dazu wurde ein neuer PARCS-Eingabeblock `SOURCE` eingeführt, in dem über die neu definierten Schlüsselwörter `source_id`, `sec` und `values` die Zeit- und Energieabhängigkeit der Neutronenquelle spezifiziert wird. Das folgende Beispiel definiert eine anfänglich ausgeschaltete Neutronenquelle in 8 Energiegruppen, die zum Zeitpunkt 202,2 s innerhalb von 0,2 s ansteigt, für 7,6 s konstant bleibt, und danach innerhalb von 0,001 s wieder verschwindet:

```

SOURCE
source_id 1 6
sec 0.0
values 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
sec 202.2
values 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
sec 202.4
values 1.46305E-03 8.66505E-07 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
sec 210.0
values 1.46305E-03 8.66505E-07 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
sec 210.001
values 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0
sec 9999.0
values 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0

```

source\_id 1 6 bedeutet, dass die nachfolgende Quelldefinition in src\_assign unter dem Index 1 angesprochen werden kann und aus Daten für 6 verschiedene Zeitpunkten besteht. Quelltermwerte für dazwischenliegende Zeitpunkte berechnet PARCS hieraus mittels linearer Interpolation. In PARCS lassen sich mehrere verschiedene Neutronenquellen, die sich u.a. in ihrem Zeitverhalten unterscheiden können, beliebigen Raumbereichen innerhalb der Problemgeometrie zuordnen. Dazu wurde das Schlüsselwort src\_assign definiert:

```

grid_z      5*9.0    2*10.0    6*10.0    2*10.0    5*9.0
assy_type   1  5*1  2*2  6*4  2*2  5*1 fuel
assy_type   2  5*1  2*3  6*5  2*3  5*1 fuel
assy_type   3  5*1  2*1  6*12 2*12 5*12 fuel
assy_type   4  5*1  2*3  6*6  2*3  5*1 fuel
assy_type   5  5*7  2*7  6*7  2*7  5*7 fuel
assy_type   6  5*8  2*8  6*8  2*8  5*8 fuel
assy_type   7  5*9  2*9  6*9  2*9  5*9 fuel
assy_type   8  5*10 2*10 6*10 2*10 5*10 refl
src_assign  2  5*0  2*0  6*1  2*0  5*0

```

Dieses Beispiel gehört zu einer Kernkonfiguration aus 7 Brennelement- und einem Reflektorelementtyp. Die letzte Zeile veranlasst PARCS, dem Elementtyp 2 die Neutronenquelle mit Index 1 den mittleren 6 axialen Maschen zuzuordnen.

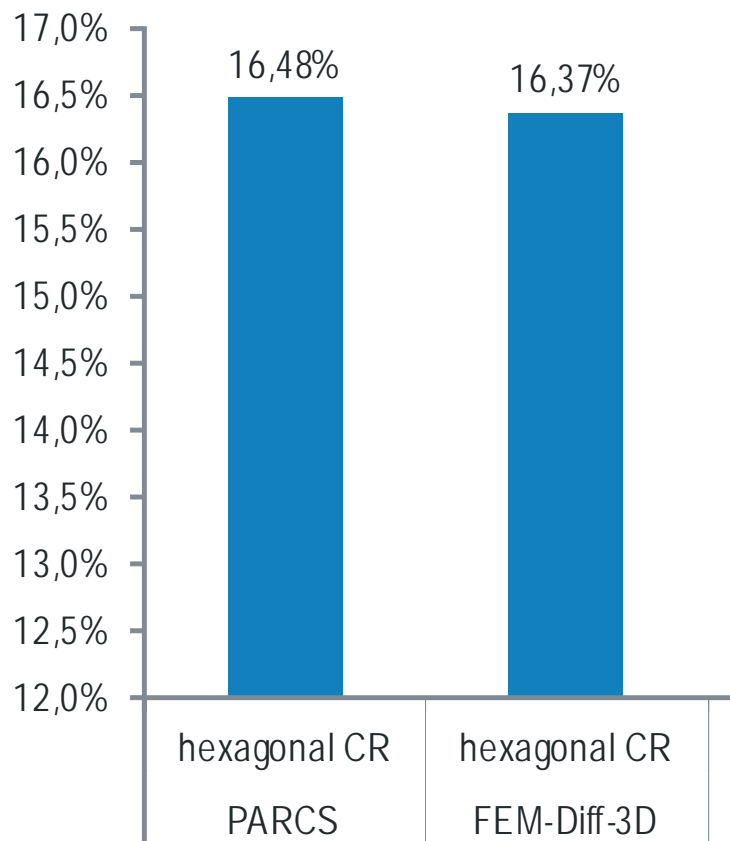
Die Programmerweiterungen von PARCS wurden im Detail anhand von Vergleichsrechnungen mit TORT-TD verifiziert, siehe Kapitel 3.4.

### 3.1.2 Berechnung der axialen Leistungsverschiebung in PARCS

Im Rahmen von Kernberechnungen und Benchmarks wird häufig die Berechnung des axialen Leistungsversatzes (axial power offset, AO) im Reaktorkern gefordert. Dabei handelt es sich um die Differenz der Leistungsfreisetzung in oberer und unterer Kernhälfte, bezogen auf die Gesamtleistung. Asymmetrien in der axialen Leistungsverteilung lassen sich hierdurch aus einer einzelnen Zahl und deren Abweichung von Null (axiale Symmetrie) ablesen. Der axiale Leistungsversatz errechnet sich aus

$$AO = \frac{FP_{top} - FP_{bottom}}{FP_{top} + FP_{bottom}}$$

Darin ist  $FP_{top}$  bzw.  $FP_{bottom}$  die Spaltleistung in oberer bzw. unterer axialer Kernhälfte. Durch eine Weiterentwicklung von PARCS wurde die Berechnung dieser Größe ermöglicht. Das Verfahren wurde generisch implementiert. Dadurch können axiale Leistungsverschiebungen, sondern auch axiale Verschiebungen thermohydraulischer Verteilungen (z. B. Temperaturen, Kühlmitteldichten etc.) berechnet werden. Die Verifizierung erfolgte durch Vergleiche mit dem Finite-Elemente-Diffusionsprogramm (FEM-Diff-3D) sowie anhand der Ergebnisse der anderen Teilnehmer des MHTGR-350-Benchmarks /ORJ13/. Abb. 3.1 zeigt die Berechnung des axialen Leistungsversatzes mit PARCS im Vergleich zu FEM-Diff-3D am Beispiel des MHTGR-350-MW-Benchmarks. Die kleine Abweichung liegt u.a. in der unterschiedlichen axialen Nodalisierung begründet.



**Abb. 3.1** Berechnung des axialen Leistungsversatzes mit PARCS im Vergleich zu FEM-Diff-3D am Beispiel des MHTGR-350-MW-Benchmarks.

### 3.1.3 Erweiterung von PARCS zu Prozessierung von NEMTAB-Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Um Abhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte von geometrischen Parametern zusätzlich zu den existierenden Parametern (z. B. Materialdichte und -temperatur) erfassen zu können, ist eine größere Anzahl von Rückwirkungsparametern in parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Verbindung mit mehreren Energiegruppen erforderlich. Da in PARCS derartige Eigenschaften fehlen bzw. auf bestimmte Benchmarks mit zwei Energiegruppen spezialisiert sind, wurde PARCS so erweitert, dass parametrisierte Mehrgruppen-Wirkungsquerschnitte im NEMTAB-Format verarbeitet werden können. Dazu wurde ein Fortran-90-Modul entwickelt, welches Abhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte von bis zu 6 verschiedenen Parametern berücksichtigen kann. Die Interpolation zwischen benachbarten Stützstellen erfolgt linear. Bei der Implementierung wurde auf Module zurückgegriffen, die bereits in TORT-TD erfolgreich implementiert und getestet wurden.

Der folgende Ausschnitt aus einem Eingabedatensatz zeigt ein Beispiel für die Verwendung von NEMTAB-Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit 8 Energiegruppen in PARCS. Das Einlesen im NEMTAB-Format wird durch `ioptxsf = 200` eingeschaltet. Der Parameter `isct` (hier 0 für isotrope Streuung) dient der künftigen Nutzung anisotroper Streuquerschnitte in PARCS.

```
XSEC
group_spec      8
!             ioptxsf  nlib  isct  nburnup   initial val.for 6 TH parameters
func_type      200    17    0     1       475.0  0.0  0.0  0.0  0.0  0.0
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-GAS.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-IZ-LB.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-IZ-UF-LF.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-IZ-IB.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-SPL.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-ASHLD.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-OZ.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-DSD-FLW.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-DSD.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-CSD-FLW.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-CSD-Lower.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-CSD-Upper.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-SDLT.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-SDLT.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-RSHLD.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-GAS-up.NEMTAB
efil_xs_ur    ../../../../HELIOS/Clad-Exp/nemtab/WQ-8g-GAS-lo.NEMTAB
```

Das NEMTAB-Format folgt der Definition in `/KOZ06/`, wie der folgende Ausschnitt einer 8-Gruppen-Bibliothek zeigt:

```
*      Mod Dens      Boron ppm      Fuel Temp      Mod Temp      Xe Conc      Param6
          3            1            1            0            0            0
      475.00          675.00          875.00
          0.00
          0.00
*
* -----
* BURNUP  0.00  GWd/t
* -----
*
* tr
*
* GROUP      1
* 1.167275E-01  1.161759E-01  1.157477E-01
* GROUP      2
* 1.649829E-01  1.642473E-01  1.636439E-01
* .....
* GROUP      8
* 4.704184E-01  4.687803E-01  4.675728E-01
*
* ab
*
* GROUP      1
* 8.876319E-03  8.841581E-03  8.810241E-03
* GROUP      2
* 5.981584E-03  5.961116E-03  5.941264E-03
* .....
* GROUP      8
* 4.149615E-02  4.138935E-02  4.128163E-02
```

### 3.2 AP 1.2: Auswertung existierender Rechenprogramme für flüssigmetallgekühlte unterkritische Systeme

Die Dynamik quellgetriebener unterkritischer Systeme unterscheidet sich von kritischen Leistungsreaktoren. Im Unterschied zu schnellen kritischen Reaktoren bestimmt die Leistung des Beschleunigers, der eine externe Neutronenquelle treibt, in Verbindung mit dem Multiplikationsfaktor des Kerns die Leistung eines ADS<sup>1</sup> /SIK01/ und hat auch wesentlichen Einfluss auf die Leistungsdichteverteilung. Unterbrechungen des Beschleunigers (Beam-Trips) bewirken abrupte Leistungsdichteänderungen im Kern und führen zu thermischen Belastungen in Brennstoff- und Strukturmaterialien. Mehrfache Abschaltvorgänge /MER09/ können in thermischen Ermüdungserscheinungen und somit vorzeitigen Ausfällen damit verbundener sicherheitsrelevanter Funktionen resultieren. Der Zustand der Unterkritikalität bedingt verändertes neutronenkinetisches Verhalten /RIN06/ und leistet einen Beitrag zur inhärenten Sicherheit des Systems, solange positive Reaktivitätseinträge unterhalb des Abstands zur Kritikalität bleiben. Das Systemverhalten wird zusätzlich durch die Kerneigenschaften, insbesondere den hohen Anteil von Minoren Actiniden im Transmutationsbrennstoff bei üblicherweise fehlendem Uranoxid (inertem Brennstoff), das schnelle Neutronenspektrum sowie das Kühlmittel bestimmt.

Die genannten Eigenschaften quellgetriebener unterkritischer Systeme erfordern den Einsatz spezifischer gekoppelter 3D-Neutronenkinetik-Thermohydraulik-Codes zur Sicherheitsbewertung von ADS. Zwar existieren für die Simulation der Thermofluiddynamik qualifizierte Rechenprogramme (z. B. SAS4A/SASSYS-1 /CAH94/, SAS-SFR /PFR08/), diese berücksichtigen die Neutronenkinetik jedoch nur mittels Punktkinetik und Reaktivitätskoeffizienten. Fortschrittlichere Ansätze benutzen eine Kopplung eines 3D-Kernberechnungsprogramms mit einem Thermohydraulikcode, um zu jedem Zeitpunkt die dem thermofluiddynamischen Zustand entsprechende 3D-Neutronenfluss- und Leistungsdichteverteilung zu berechnen, um hieraus Reaktivitätsrückwirkungskoeffizienten für die punktkinetischen Gleichungen abzuleiten.

Als Beispiele für die Entwicklungen in den vergangenen Jahren seien hier SAS4ADS /DAG02/ und DIF3D-K/VARIANT-K/SAS4A/SASSYS-1 /CAH00/ genannt. SAS4ADS basiert auf den drei validierten Codes SAS4A, CITATION /FOW71/ und KAPROS

---

<sup>1</sup> Dies bedeutet, dass bei aktivem Protonenbeschleuniger der Multiplikationsfaktor durch Kontrolle des Beschleunigerstrahlstroms überwacht werden kann.

/BRO92/. Anstelle von Rückwirkungstabellen berechnet SAS4ADS die punktkinetischen Parameter wie Reaktivität, mittlere Neutronengenerationszeit und Daten verzögerter Neutronen anhand des 3D-Diffusionscodes CITATION, welcher zudem SAS4A mit der momentan vorherrschenden Leistungsdichteverteilung im Kern versorgt.

Einen ähnlichen Ansatz verfolgt das gekoppelte Codesystem DIF3D-K/VARIANT-K/SAS4A/SASSYS-1. Die 3D-Neutronendynamik wird hierbei wahlweise durch den Diffusionscode DIF3D-K /TAI91/ oder das Diffusions-/Transportprogramm VARIANT-K /PAL95/ beschrieben. Letzteres bietet zusätzlich die Möglichkeit der Lösung der nodalen Neutronentransportgleichung nach dem Variationsprinzip unter anisotroper Streuung bis P5-Ordnung.

### **3.3 AP 1.3: Auswertung von Ansätzen zur Modellierung von Spallationsquellen für deterministische Neutronenkinetikprogramme**

#### **3.3.1 Spallationsprozesse und Rechenprogramme**

Eine Spallationsreaktion ist ein Prozess, bei dem ein leichtes Projektil (Proton, Neutron oder leichte Atomkerne) mit einer kinetischen Energie von einigen hundert MeV bis einigen GeV mit einem schweren Atomkern (z. B. Blei, Wismuth) mit einem sog. Target in Wechselwirkung tritt und dabei die Emission einer großen Anzahl von Hadronen (meist Neutronen, aber auch Protonen,  $\alpha$ -Teilchen und Pionen) auslöst, deren Energien bis zur Energie des Projektils reichen können. Der Spallationsprozess vollzieht sich in zwei Stufen, der intranuklearen Kaskade (Intra-Nuclear Cascade, INC) und der Verdampfung (Evaporation, Deexcitation). In der *intranuklearen Kaskade* findet eine Wechselwirkung des Projektils mit den Targetkernen statt (für 1 GeV beträgt die de-Broglie-Wellenlänge ca. 0,1 fm), wobei die kinetische Energie des Projektils über elastische Stöße (Stoßkaskade) an die Targetnukleonen überträgt. Ab einer gewissen Projektilenergie wird die Schwellenergie für die Teilchenproduktion in intranuklearen Stoßereignissen überschritten, so dass zunächst Pionen (einige hundert MeV) und ab ca. 2...10 GeV schwerere Hadronen entstehen. Teilchen, deren Energie ausreicht, um en Kernverband zu verlassen, werden dann vorzugsweise in Richtung des Projektils emittiert. Die restliche Energie verteilt sich annähernd gleichmäßig auf die Nukleonen. Auf die intranukleare Kaskade folgt der *Verdampfungsprozess*, bei dem der Kern durch Verdampfung von Neutronen oder leichten geladenen Teilchen (z. B. d, t,  $\alpha$ ) Energie abgibt, wobei die Energie der freigesetzten Teilchen bis zu 40 MeV beträgt. Im Gegen-

satz zur intranuklearen Kaskade ist die Winkelverteilung dieser Teilchen annähernd isotrop. Ein konkurrierender Prozess zur Verdampfung ist die *Spaltung*, wobei die Spaltprodukte ebenfalls Verdampfungsprozesse durchlaufen können.

Zur Simulation des Spallationsreaktionen existieren eine Reihe von Rechenprogrammen, die die einzelnen Phänomene vom Spallationsprozess über die Wechselwirkungen von Sekundärteilchen bis zum anschließenden Neutronentransport durch das Targetmaterial modellmäßig erfassen. Dazu zählen u.a.:

- LAHET (Los Alamos High Energy Transport code /PRA89/): Modellierung der Spallation und des Transports von Nukleonen, Pionen, Myonen und Antiteilchen mit Energien  $\geq 20$  MeV. LAHET erzeugt Wirkungsquerschnitte für die verschiedenen Prozesse.
- MCNP (Monte Carlo N-Particle transport code /PEL13/): Modellierung des Neutronen-, Elektronen- und Photonentransports im Energiebereich von  $10^{-11}$  MeV bis 20 MeV. MCNP benutzt evaluierte nukleare Punktdaten als Grundlage für Wirkungsquerschnitte.
- MCNPX (MCNP eXtended /PEL05/): Verbindung von MCNP und LAHET. MCNPX simuliert 34 Teilchentypen und ermöglicht die Berechnung von Teilchenwechselwirkungswahrscheinlichkeiten direkt mittels physikalischer Modelle für Energien, bei denen keine anderweitigen Daten verfügbar sind.
- GEANT4 (GEometry ANd Tracking /AGO03/). Plattform für die Simulation der Penetration von Partikeln durch Materie unter Benutzung von Monte-Carlo-Methoden, entwickelt am CERN.
- FLUKA (FLUktuierende KAskade /FER05/).
- HETC (High Energy Transport Code /RIC77/).
- NMTC (Nucleon Meson Transport Code /COL70/).

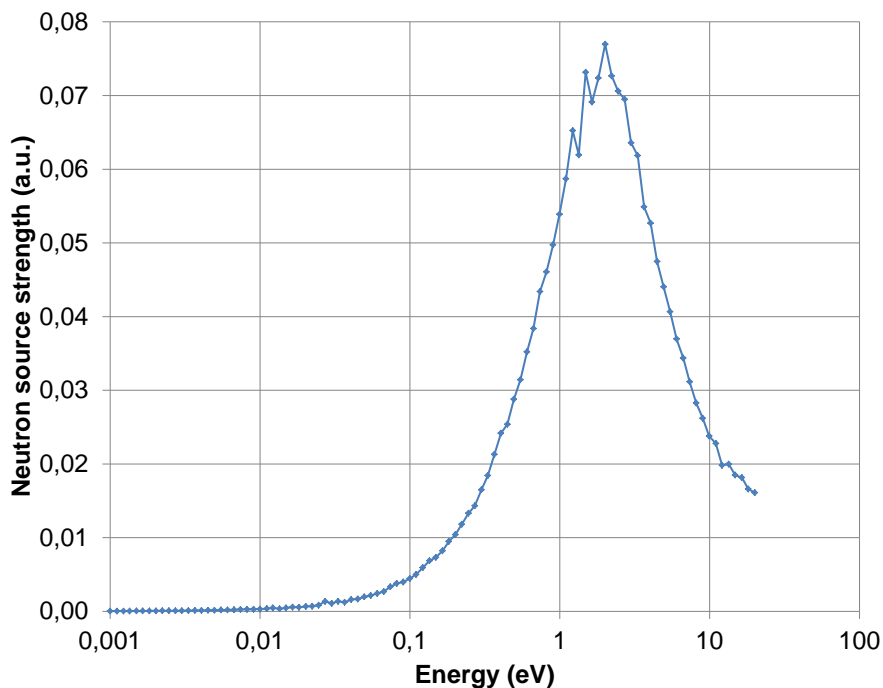
Aufgrund der Tatsache, dass MCNPX den Spallations- und Transportcode LAHET mit dem Neutronentransportcode MCNP verbindet, wurde MCNPX für die Durchführungen von Testrechnungen zur Simulation der räumlichen und energetischen Spallationsneutronenverteilung für ein LBE-Target durchgeführt. Diese Arbeiten sind im Folgenden beschrieben.



### 3.3.2 Berechnung einer Spallationsneutronen-Quellverteilung mit MCNPX

Basierend auf dem Deliverable D2.1 (Possible working range of the MYRRHA core and basic neutronic parameters for safety analyses) des EU-Projekts MAXSIMA /SAR14/ wurde in MCNPX ein Modell des Elements mit dem Spallationstarget nach dem gegenwärtigen MYRRHA-Design erstellt. Es wurde ein Protonenstrahl mit der Energie 600 MeV und einem parabolischen radialen Strahlprofil mit 3,5 cm Radius angenommen. Das MCNPX-Modell simuliert Neutronen, Protonen, Photonen und geladene Teilchen.

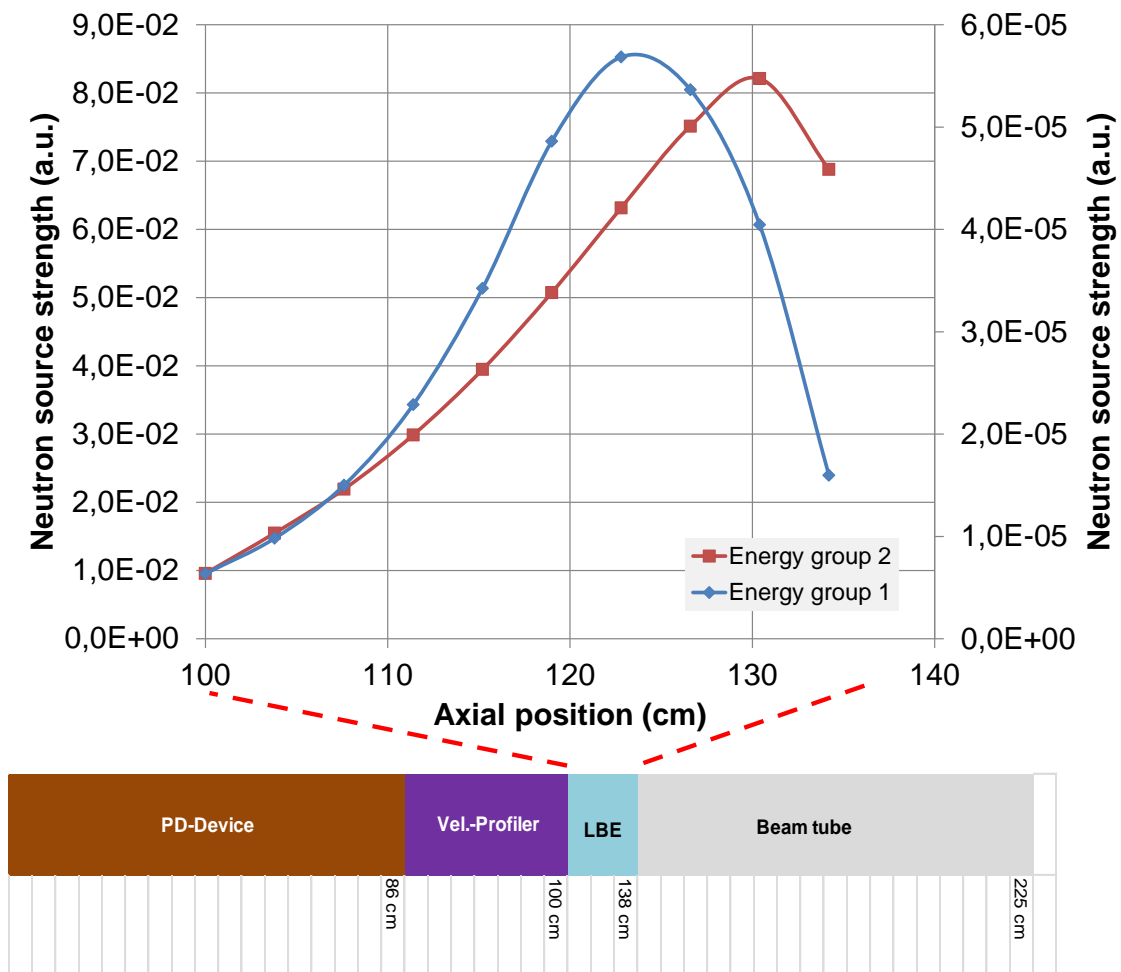
Abb. 3.2 zeigt das mit MCNPX berechnete Spallationsspektrum. Die hier verwendeten 122 Energiepunkte sind für deterministische 3D-Neutronenkinetikcodes (wie z. B. PARCS) in der Regel jedoch zu groß. Daher wurde das MCNPX-Modell so gestaltet, dass (Wenig-)Gruppenstruktur (F1-Tally) vorgegeben werden kann, in der die Spallationsneutronenverteilung abgebildet wird. Die Quellverteilung kann dann z. B. im für die Simulation externer zeitabhängiger Neutronenquellverteilungen erweiterten Code PARCS verwendet werden.



**Abb. 3.2** Mit MCNPX berechnetes Spallationsspektrum für das LBE-Target.

In das MCNPX-Modell wurde ferner ein Maschen-Tally (TMESH) eingefügt, mit dem sich Spallationsquellverteilungen auch räumlich aufgelöst berechnen und auf diese Weise der axialen Diskretisierung (z. B. in PARCS) zuführen lassen. Um zeitaufwendi-

ge MCNPX-Neuberechnungen bei Änderungen der axialen Diskretisierung im 3D-Neutronenkinetikcode zu umgehen, wurde ein außerdem Transformationstool entwickelt, welches das axiale Spallationsquellenprofil in eine andere axiale Diskretisierung umrechnen kann. Abb. 3.3 zeigt das mit MCNPX in einer in 8-Energiegruppen-Struktur berechnete axiale Quellstärkeprofil der Spallationsquelle für das LBE-Target. Zwei der acht Energiegruppen weisen signifikante Quellstärken auf. Das Maximum der Quellstärke liegt deutlich erkennbar im Inneren des Targets, einige Zentimeter von der Targetoberfläche entfernt.

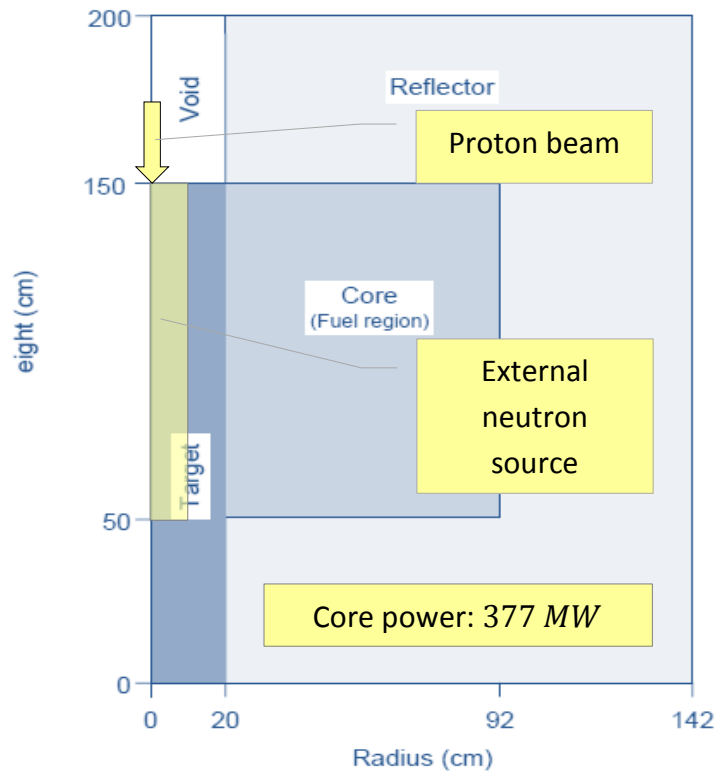


**Abb. 3.3** Axiales Quellstärkeprofil der Spallationsquelle in einer 8-Energiegruppen-Struktur für das MYRRHA-Target. Unten: axiale Zonen des Targetelements.

### **3.4 AP 1.4: Verifikation anhand von Testfällen und Benchmarks**

#### **3.4.1 OECD/NEA-Benchmark zu einem beschleunigergetriebenen Brenner für minore Aktiniden**

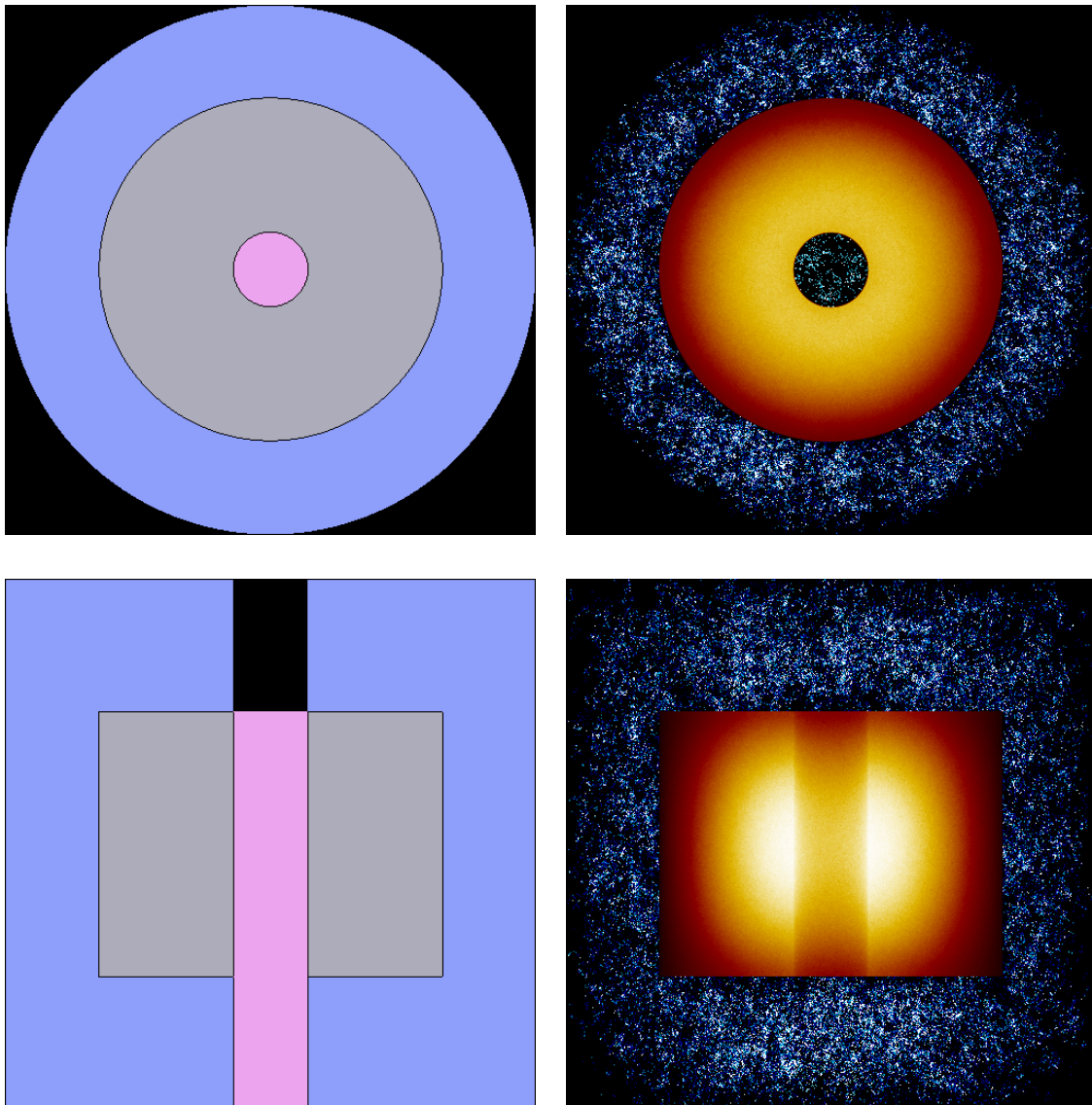
Zur Verifikation der in PARCS implementierten Erweiterungen zur Simulation schneller Systeme mit externen zeitabhängigen Neutronenquellverteilungen wurde der in /COM01/ dokumentierte OECD/NEA-Benchmark herangezogen. Das darin beschriebene System ist ein zylindrisiertes Modell eines Advanced Liquid Metal Reactor (ALMR) mit einer thermischen Leistung von 377 MW und in Abb. 3.4 wiedergegeben. Es enthält eine zentrale Pb-Bi-Targetzone, eine Voidzone im Bereich des Strahlrohrs, eine Spaltzone, die aus einer homogenisierten Brennstoff- und LBE-Kühlmittel-Materialkomposition besteht, sowie einer äußeren Stahl-Reflektor-Zone. Die Kernabmessungen entsprechen jenen des ALMR-Konzepts. Reflektor und radiale Schild-Materialien bestehen aus einer gemittelten homogenen Mischung aus HT-9-Stahl (70 Vol-%) und Kühlmittel (Rest). Als Brennstoff dient MOX mit zugemischtem Am- und Cm-Nukliden, dessen Nuklidzusammensetzung ebenso gegeben ist wie die von Target und Reflektor. Ferner wird ein Spallationsneutronen-Energiespektrum bereitgestellt, welches für einen Protonenstrahl der Energie 1 GeV und einem Strahlradius von 10 cm errechnet wurde. Dieses Spektrum ist in 122 Energiegruppen gegeben und kann mit einem bereitgestellten Kondensationsprogramm auf beliebige kleinere Gruppenzahlen kondensiert werden.



**Abb. 3.4** Seitenansicht des ADS-Kerns mit minoren Actiniden im Brennstoff.

### 3.4.2 Monte-Carlo-Modell und Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten

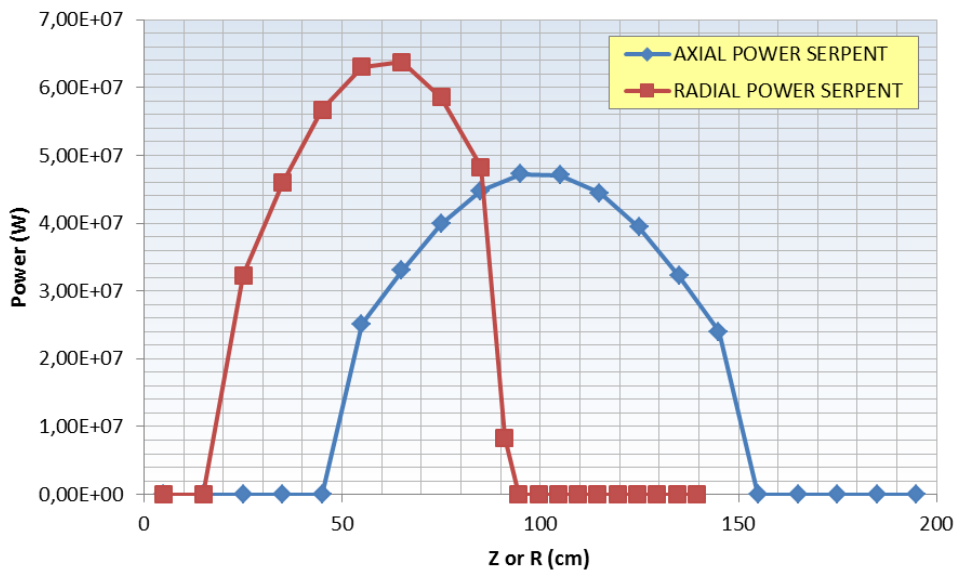
Auf Basis dieser Spezifikationen wurde mit dem Monte-Carlo-Code SERPENT ein Ganzkernmodell unter Verwendung nuklearer ENDF/B-VII-Punktdateien entwickelt. Dieses Modell dient einerseits der Verifikation der deterministischen 3D-Modelle dieses Benchmarks und andererseits der Erzeugung von makroskopischen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitts-Bibliotheken einschließlich Daten verzögerter Neutronen für PARCS und TORT-TD. Für die Monte-Carlo-Simulation werden 1050 Zyklen mit je 10000 Neutronen simuliert, wobei die ersten 50 Zyklen verworfen werden. Geometrie- und Materialverteilung sowie Reaktionsratenplots des SERPENT-Modells sind in Abb. 3-5 dargestellt.



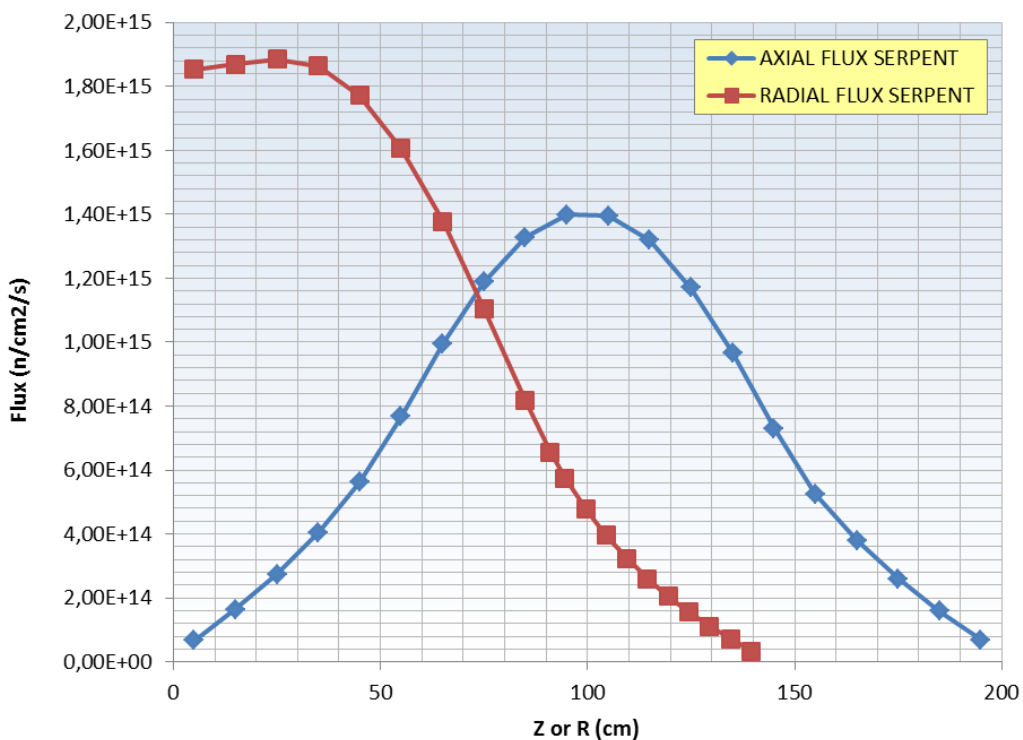
**Abb. 3.5** Geometrie- und Materialverteilung (linke Spalte) und Reaktionsratenplots (rechte Spalte) des SERPENT-Modells in radialem (oben) und axialem Schnitt (unten).

Die SERPENT-Rechnung liefert einen Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 0,95998 \pm 0,00022$ , welcher mit den in /COM01/ dokumentierten Ergebnissen der Benchmarkteilnehmer konsistent ist. Die zugehörigen (axial integrierten) radialen und (radial integrierten) axialen Leistungs- und Neutronenflussprofile sind in Abb. 3.6 und Abb. 3.7 gezeigt. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden für Produktionsrechnungen in 8 Energiegruppen berechnet. Die für die Transientenberechnungen erforderlichen Daten verzögerter Neutronen und die gruppenweisen Neutronengeschwindigkeiten wurde ebenfalls mit SERPENT berechnet und sind in Tab. 3.1 und Tab. 3.2 angegeben. Für

zusätzliche Untersuchungen wurden auch Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte in 23 Energiegruppen (Energiegrenzen siehe Tab. 3.3) generiert.



**Abb. 3.6** Mit SERPENT berechnete radiale (rot) und axiale (blau) Leistungsprofile des ADS-Kerns im Zustand BOL.



**Abb. 3.7** Mit SERPENT berechnete energieintegrierte radiale (rot) und axiale (blau) Neutronenflussprofile des ADS-Kerns im Zustand BOL.

**Tab. 3.1** Mit SERPENT berechnete Daten der verzögerten Neutronen.

<b>Zeitgruppe <math>i</math></b>	<b>Anteil verzögerter Neutronen (<math>\beta_i</math>)</b>	<b>Zerfallskonstanten der Mutterkerne (<math>\lambda_i</math>) in <math>s^{-1}</math></b>
1	1,75475E-03	4,52336E-01
2	3,91702E-05	1,06074E-02
3	4,80569E-04	2,83253E-02
4	2,67224E-04	1,01579E-01
5	6,90120E-04	2,97207E-01
6	1,85044E-04	9,71009E-01
7	9,26187E-05	3,40136E+00

**Tab. 3.2** Mit SERPENT berechnete Neutronengeschwindigkeiten in 8 Energiegruppen.

Energiegruppe	Neutronengeschwindigkeit (cm/s)
1	2,49296E+09
2	1,53190E+09
3	9,52181E+08
4	5,89654E+08
5	3,60202E+08
6	2,16628E+08
7	1,03564E+08
8	3,18034E+07

**Tab. 3.3** Energiegrenzen der 23-Gruppen-Struktur

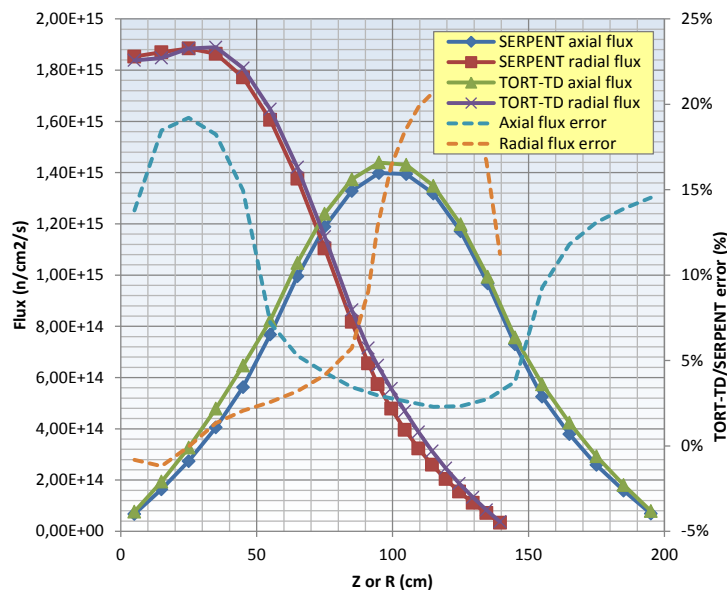
Group index	Lower limit (eV)	Group index	Lower limit (eV)
1	1.0000E+7	13	2.4788E+4
2	6.0653E+6	14	1.5034E+4
3	3.6788E+6	15	9.1188E+3
4	2.2313E+6	16	5.5308E+3
5	1.3534E+6	17	3.3546E+3
6	8.2085E+5	18	2.0347E+3
7	4.9787E+5	19	1.2341E+3
8	3.0197E+5	20	7.4852E+2
9	1.8316E+5	21	4.5400E+2
10	1.1109E+5	22	1.4872E+2
11	6.7379E+4	23	7.5501E+1
12	4.0868E+4		



### 3.4.3 Deterministische 3D-Kernberechnungen des stationären Zustands

Der stationäre Zustand des ADS-Kerns wurde zunächst mit TORT-TD unter Verwendung der mit SERPENT generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten berechnet. Die Rechnungen wurden sowohl mit der  $S_N$ -Transportmethode als auch mit der Diffusionsnäherung durchgeführt, wobei die Zahl der Energiegruppen als auch die Quadraturordnung (bei der  $S_N$ -Methode) variiert wurden. Es wurden niveausymmetrische Quadraturen verwendet.

Abb. 3.8 zeigt die axialen und radialen Neutronenflussprofile der TORT-TD-Rechnung in Diffusionsnäherung und 8 Energiegruppen. Die weitgehende Symmetrie des ADS-Kerns sowohl radial als auch axial spiegelt sich auch in den Flussprofilen wider. Wie der Vergleich mit der SERPENT-Lösung erkennen lässt, liefert offensichtlich bereits die Diffusionsnäherung brauchbare Ergebnisse. Die relativen Abweichungen sind jedoch besonders im Bereich des Reflektors und der Voidzone groß, in der aktiven Zone dagegen deutlich niedriger.

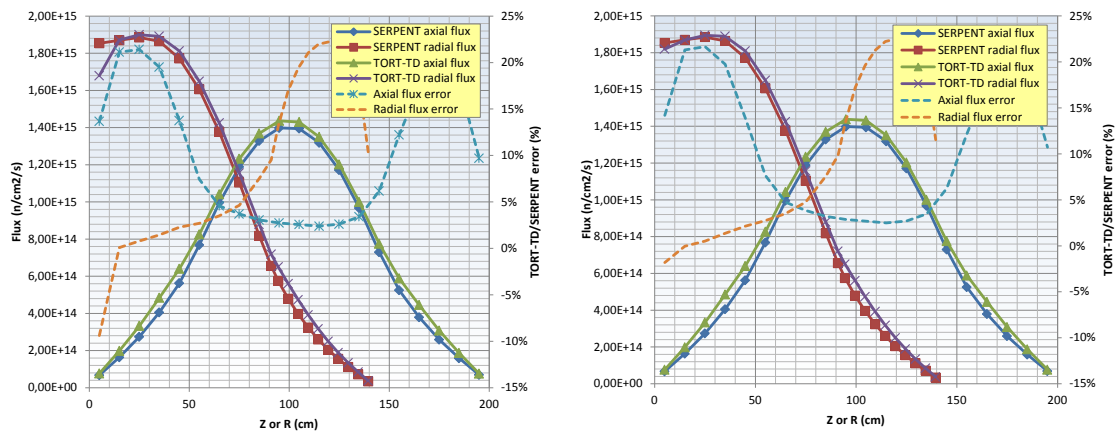


**Abb. 3.8** Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-Rechnung in Diffusionsnäherung und 8 Energiegruppen im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.

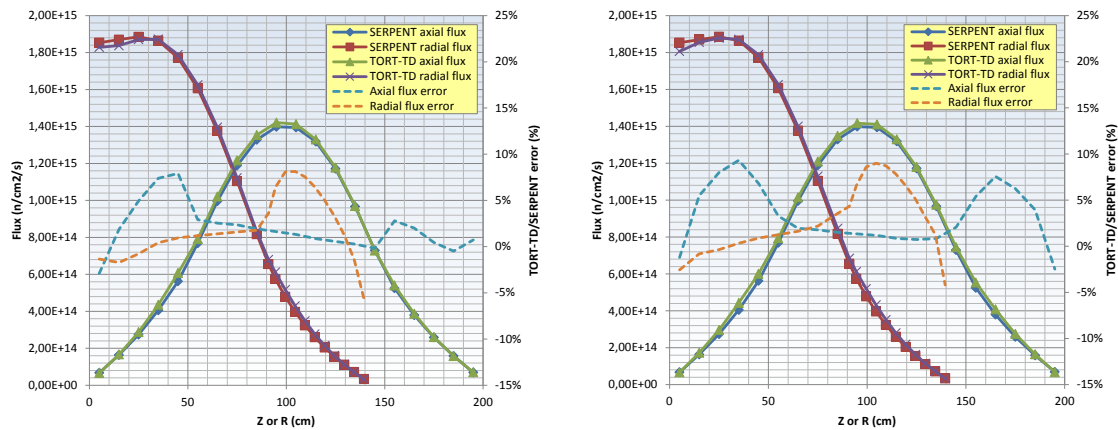
Die  $S_N$ -Transportrechnung mit 8 Energiegruppen ergibt für die radiale Flussverteilung in der Kernmittelachse zu niedrige Werte, sofern die (groben)  $S_4$ -Quadratur verwendet wird (siehe Abb. 3.9 links). Dieser Effekt verschwindet bei höheren Quadraturordnungen.

gen, wie der in Abb. 3.9 rechts dargestellte Vergleich verdeutlicht, der mit  $S_{12}$ -Quadratur berechnet wurde.

Dennoch bleiben die bereits bei der Diffusionsnäherung auftretenden Differenzen zur SERPENT-Referenzlösung nahezu unverändert. Diese werden mit einer größeren Energiegruppenzahl signifikant verringert, wie die in Abb. 3.10 gezeigten Ergebnisse von TORT-TD-Rechnungen mit 23 Energiegruppen zeigen. Das Diagramm links zeigt die Diffusionsnäherung und das rechte Diagramm die Transportrechnung mit  $S_{12}$ -Quadratur. Die verbesserte Übereinstimmung der axialen und radialen Flussprofile mit der SERPENT-Lösung deutlich erkennbar. Die prozentualen Abweichungen liegen auch im Reflektor- und Void-Bereich unter 10 %.



**Abb. 3.9** Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-SN-Rechnung in 8 Energiegruppen mit  $S_4$ - (links) und  $S_{12}$ -Quadraturordnung (rechts) und im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.



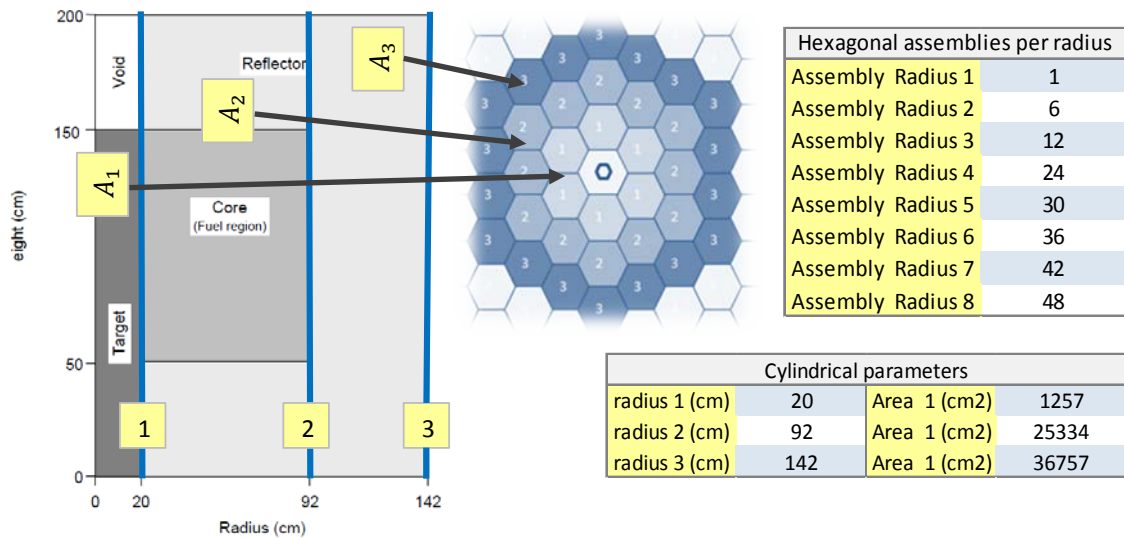
**Abb. 3.10** Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-Rechnung in 23 Energiegruppen mit Diffusionsnäherung (links) und  $S_{12}$ -Quadraturordnung (rechts) und im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.

### 3.4.4 Äquivalentes PARCS-Modell in hexagonaler Geometrie

#### 3.4.4.1 Verfahren

Die in Kapitel 3.1 beschriebene Erweiterung in PARCS zur Simulation von Transienten mit zeitabhängigen externen Neutronenquellverteilungen wurde für den (hexagonalen) TPEN-Solver implementiert, da Systeme mit schnellen Neutronenspektren i.d.R. hexagonale Brennelementanordnungen aufweisen. Die adäquate Beschreibung des zylindrischen ADS-Kerns in PARCS erfordert daher eine Transformation der Zylindergeometrie in eine äquivalente hexagonale Darstellung. Die Transformation sowie die Verifikation werden im Folgenden beschrieben.

Die Transformation betrifft nur die radialen Koordinaten, die axiale Koordinate entspricht der des Zylindermodells. Wie Abb. 3.11 zeigt, kann der ADS-Kern in drei Ringzonen (für Target, Brennstoff und Reflektor) unterteilt werden, die durch jeweils einen Brennelementtyp (Hexagon) beschrieben werden können.



**Abb. 3.11** Schema der Transformation vom zylindrischen zum hexagonalen Modell.

Die Außenradien der drei Ringzonen errechnen sich aus der Forderung nach Flächen-  
gleichheit dieser Zonen im hexagonalen- und Zylindermodell:

$$A_{1-HEX} = A_{1-RZ}$$

$$A_{2-HEX} = A_{2-RZ}$$

$$A_{3-HEX} = A_{3-RZ}$$

bzw.

$$2 \cdot \sqrt{3} \cdot \left(\frac{e}{2}\right)^2 \cdot N_1 = \pi \cdot R_1^2$$

$$2 \cdot \sqrt{3} \cdot \left(\frac{e}{2}\right)^2 \cdot N_2 = \pi \cdot (R_2^2 - R_1^2)$$

$$2 \cdot \sqrt{3} \cdot \left(\frac{e}{2}\right)^2 \cdot N_3 = \pi \cdot (R_3^2 - R_2^2)$$

Dabei sind  $N_1$ ,  $N_2$  und  $N_3$  die Anzahl der Hexagons in den einzelnen Ringzonen mit den Außenradien  $R_1$ ,  $R_2$  und  $R_3$ , und  $e$  die Breite eines Hexagons (Breite zwischen zwei gegenüberliegenden Seiten = doppelter Inkreisradius = Gitterweite).

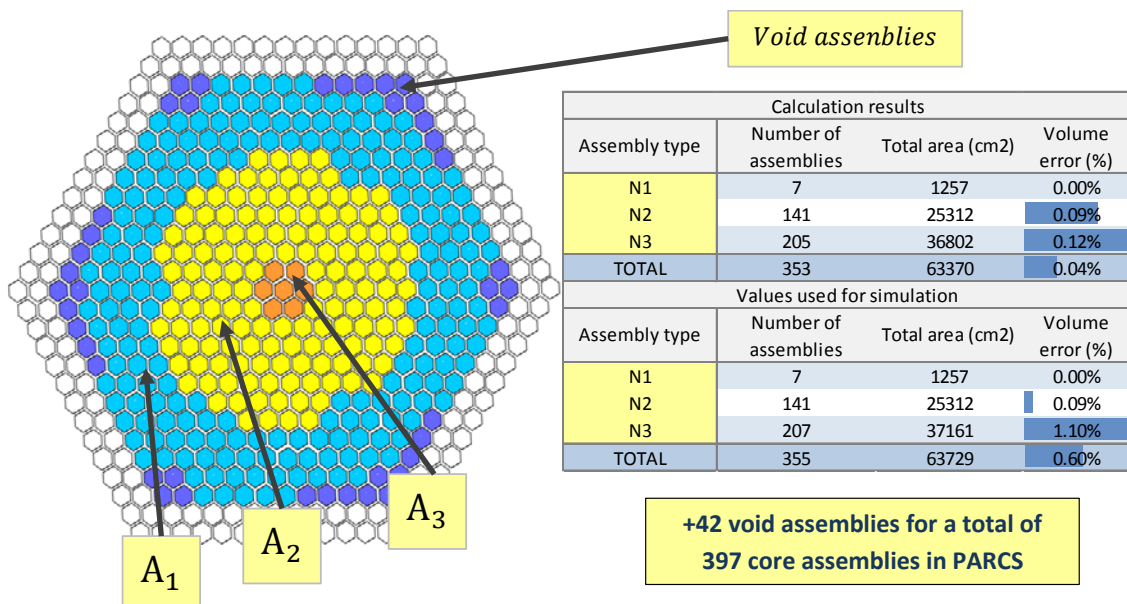
Die Gitterweite  $e$  wird aus der ersten Gleichung unter der Annahme, dass die Target-region durch  $N_1 = 7$  Hexagons (eines im Zentrum, umgeben von 6 weiteren) beschrieben werden soll, berechnet:

$$e = 2 \cdot \sqrt{\frac{A_1}{N_1 \cdot 2 \cdot \sqrt{3}}} = 14.3976 \text{ cm}$$

Damit kann aus den übrigen Gleichungen die Anzahl der Hexagons in den anderen beiden Ringzonen berechnet werden:

$$N_i = \frac{A_i - \sum_{k=1}^{i-1} A_k}{2 \cdot \sqrt{3}} \cdot \left(\frac{e}{2}\right)^2$$

Das Ergebnis dieser Rechnung ist in der Tabelle von Abb. 3.12 zu sehen, wobei die  $N_i$  auf ganzzahlige Werte gerundet wurden. Die Flächenabweichung zum Zylindermodell bleibt für den ganzen Kern bei 0,6 % mit einem Maximum von 1,1 %. Um eine für PARCS vollständige radiale Kernanordnung zu erhalten, wurden leere (Dummy-) Hexagons an den in Abb. 3.12 lila markierten Positionen hinzugefügt. Das PARCS-Modell umfasst somit insgesamt 397 Elemente.



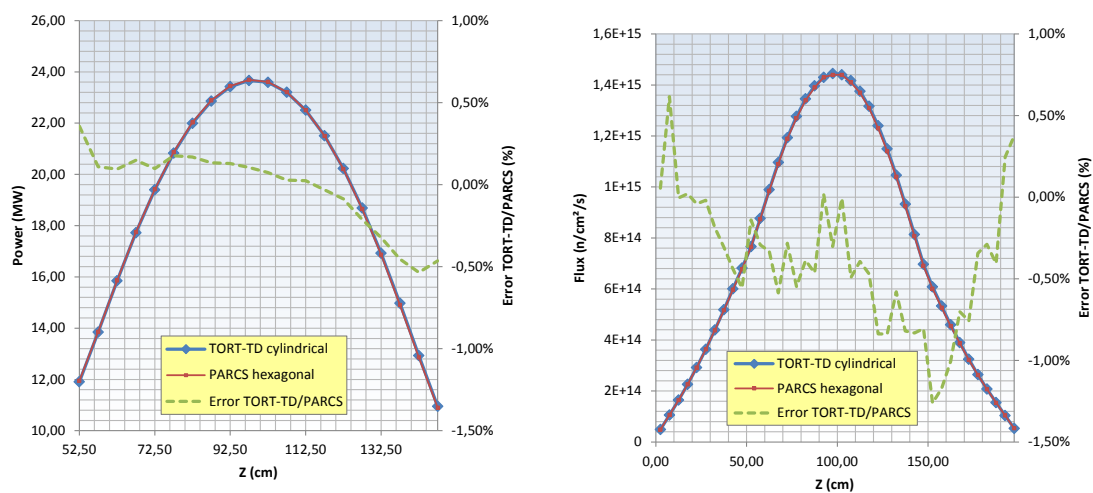
**Abb. 3.12** Zum zylindrischen Modell äquivalentes hexagonales Modell

### 3.4.4.2 Verifikation

Zur Verifikation wurde der ADS-Kern in PARCS in hexagonaler Geometrie modelliert und mit dem zylindrischen TORT-TD-Modell anhand von Multiplikationsfaktor sowie

axialen Fluss- und Leistungsprofilen verglichen. Die Rechnungen basieren auf der 8-Energiegruppen-Struktur in Diffusionsnäherung, da PARCS für TPEN keine Transportmethode bietet.

Mit PARCS wird für das äquivalente hexagonale Modell ein Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 0,95580$  erhalten und unterscheidet sich damit vom ursprünglichen Zylindermodell ( $k_{eff} = 0,96123$ ) um  $-543$  pcm. Die axialen Profile von Neutronenfluss und Leistung sind in Abb. 3.13 vergleichend gegenübergestellt. Das hexagonale Modell weicht bezüglich der Leistung um maximal 0,5 % vom Zylindermodell ab. Die Abweichung des Neutronenflusses liegt innerhalb der aktiven Zone bei weniger als 0,85 % und erreicht an der Grenze zum Reflektor maximal 1,2 %.

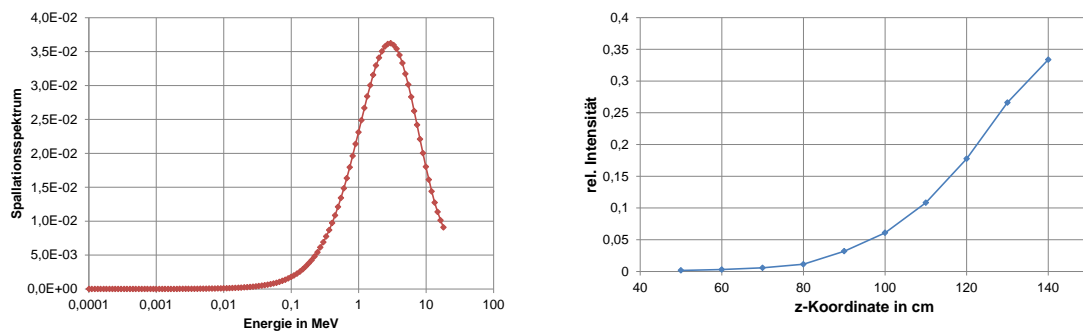


**Abb. 3.13** Vergleich der axialen Profile von Neutronenfluss (links) und Leistung (rechts) zwischen hexagonalem PARCS-Modell (rot) und ursprünglichem Zylindermodell in TORT-TD (blau).

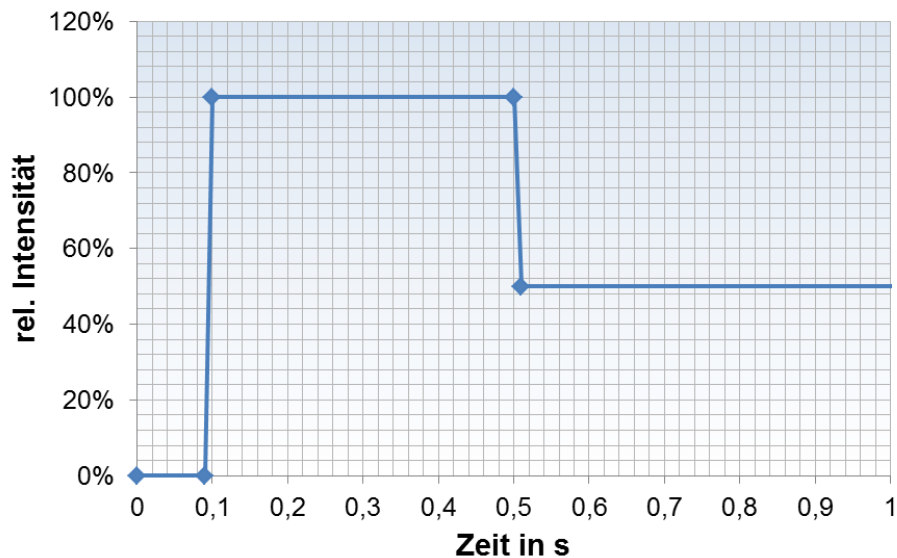
Die Vergleiche zeigen die grundsätzliche Validität der Transformation von Zylinder- auf hexagonale Geometrie. Das beschriebene Verfahren ermöglicht somit den Einsatz von Rechencodes auf geometrische Systeme, für deren Simulation sie ursprünglich nicht ausgelegt sind. Durch Modifizierung des Verfahrens können beispielsweise hexagonale Kernanordnungen mit Codes in cartesischer Geometrie beschrieben werden. Dies beschränkt sich nicht nur auf schnelle Systeme, sondern gilt auch für leichtwassermoderierte Reaktoren, etwa VVER.

### 3.4.5 Transientenrechnungen mit externer Neutronenquellverteilung

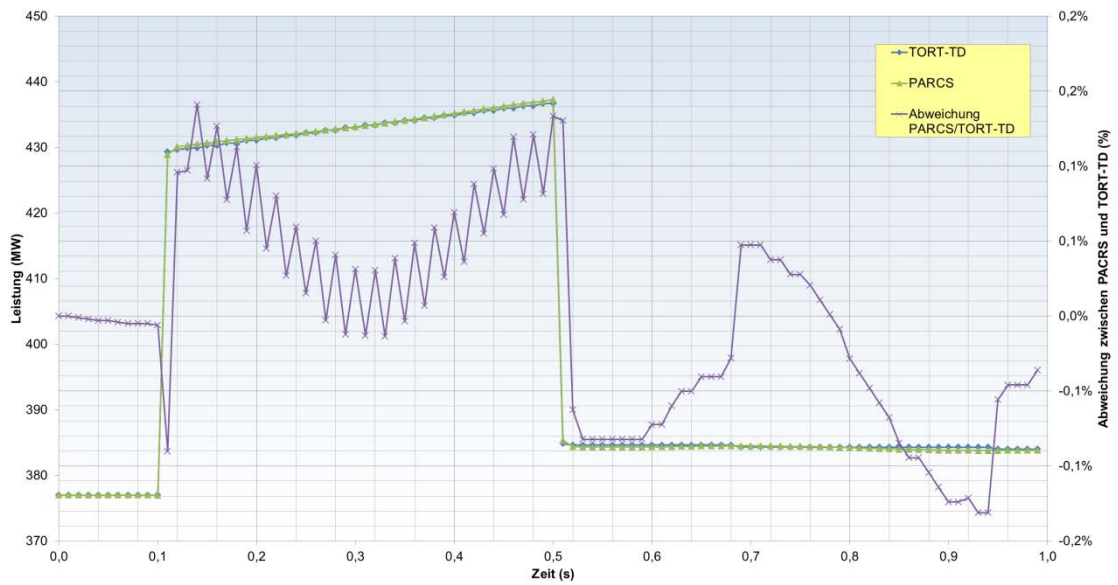
Für Transientenrechnungen mit externer zeitabhängiger Neutronenquellverteilung wurde die im OECD/NEA-Benchmark /COM01/ spezifizierte Quelldefinition verwendet und mit dem dort angegebenen Programm auf 8 Energiegruppen kondensiert. Das ursprünglich in 122 Energiegruppen definierte Spallationsspektrum und die axiale Verteilung der Quellstärke entlang des Targets sind in Abb. 3.14 gezeigt. Die Vergleichsrechnungen wurden mit dem in Abb. 3.15 dargestellten zeitlichen Verlauf der Gesamtquellstärke durchgeführt. Die mit PARCS und zum Vergleich mit TORT-TD errechneten Zeitverläufe der Gesamtleistung sind in Abb. 3.16 dargestellt. Wie erwartet, folgt der Leistungsverlauf der Neutronenquellstärke. Die relativen Abweichungen zwischen PARCS und TORT-TD liegen bei unter 0,2 %.



**Abb. 3.14** Links: Ursprüngliches Spallationsspektrum in 122 Energiegruppen. Rechts: axiale Verteilung der Quelle entlang des Targets.



**Abb. 3.15** Zeitlicher Verlauf der Gesamtquellstärke.



**Abb. 3.16** Zeitverläufe der mit PARCS und zum Vergleich mit TORT-TD gerechneten Quelltransiente zusammen mit den Abweichungen zwischen PARCS und TORT-TD.





## **4 AP 2: Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme**

### **4.1 AP 2.1: Kopplung Reaktorphysik mit Thermohydraulik**

ATHLET verfügt über eine generische Schnittstelle (Interface) zu neutronenkinetischen Modellen. Über dieses Interface wurden in der Vergangenheit Kopplungen von ATHLET zu einer Reihe von 3D-Diffusions- und Transportcodes realisiert, u.a. mit QUABOX/CUBBOX, DYN3D und TORT-TD. Die Schnittstelle ist in /LAN97a/ und /LAN97b/ dokumentiert. Über dieses Interface werden folgende Hauptaufgaben der gekoppelten Berechnung abgewickelt:

1. Lesen der Eingabedaten, bestehend aus den Eingabedaten der beiden unabhängigen Programme und der Beschreibung der Zuordnung zwischen fluiddynamischen Kanälen und der Kernbeladung.
2. Datenaustausch zwischen dem Systemcode und der Neutronenkinetik, also die Übertragung der Leistungsdichteverteilung und der Rückwirkungsgrößen zwischen den Rechenmodellen.
3. Kontrolle der stationären Rechnung durch Iteration zwischen Fluiddynamik und Neutronenkinetik, um einen stationären Zustand zu erreichen.
4. Kontrolle der zeitabhängigen Berechnung zur Synchronisation der Zeitschritte und der Folge der Rechenschritte von beiden Rechenmodellen.

Für die Kopplung mit PARCS, wird der Input-Parameter IQF10 in der ROD-Objektbeschreibung gleich 10 gesetzt (für die Kopplung mit QUABOX/CUBBOX IQF10 = 5). Im Interface wird PARCS als Subroutine mit 2 Schlüsselparametern (iopt und ired), denen unterschiedliche Kombinationen entsprechend den verschiedenen Berechnungsphasen, aufgerufen. Für die in diesem Bericht beschriebenen Anwendungen wurde die neueste verfügbare und im Rahmen dieses Vorhabens erweiterte PARCS-Version mit der aktuellen ATHLET-Version (30B) gekoppelt.

### **4.2 AP 2.2: Reaktorphysikalische Modellierung thermo-struktureller Rückwirkungen**

Erhöhte Brennstofftemperaturen etwa bewirken axiale Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr bei gleichzeitiger Abnahme jeweiligen der Massendichten. Steigende Kühlmittemperatur am Kerneintritt hat eine thermische Ausdehnung der Kerngitterplatte zur

Folge. Dies resultiert in vergrößerten Zwischenräumen zwischen benachbarten Brennelementkästen (Wrapper), die mit Kühlmittel ausgefüllt werden. Obwohl die tatsächlichen Verschiebungen klein sind, können die damit verbundenen Reaktivitätsänderungen einen großen (negativen) Beitrag zur Gesamtreaktivität des Kerns bedeuten. Da die radialen Abmessungen des Wrappers als konstant angenommen werden, resultiert die Ausdehnung der Kerngitterplatte in einem veränderten (größeren) Brennelement-Pitch. Aus Sicht eines deterministischen Kernsimulators wie z. B. PARCS bedeutet diese Pitch-Änderung eine Änderung der radialen Nodalisierung

#### 4.2.1 Radiale Ausdehnung der Kerngitterplatte

##### 4.2.1.1 Methode

Für die Modellierung der radialen Ausdehnung der Kerngitterplatte wurde ein Ansatz gewählt, der auf einer Koordinatentransformation der Diffusionsgleichung basiert, und mit HELIOS und einem Weniggruppen-Finite-Elemente-Diffusionscode implementiert. Für den Energiegruppenindex  $g$  lautet die stationäre Diffusionsgleichung für den Neutronenfluss des nicht deformierten Kerns in Standardnotation:

$$-D_g(\vec{r})\Delta\Phi_g(\vec{r}) + \sigma_g^r(\vec{r})\Phi_g(\vec{r}) = q_g(\vec{r})$$

wobei der Quellterm der Energiegruppe  $g$  durch

$$q_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \sigma_{gg'}^s(\vec{r})\Phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{\lambda_g}{k} \sum_{g' \neq g} \nu\sigma_{g'}^f(\vec{r})\Phi_{g'}(\vec{r})$$

und der sog. Removal-Wirkungsquerschnitt durch  $\sigma_g^r(\vec{r}) = \sigma_g^t(\vec{r}) - \sigma_{gg}^s(\vec{r})$  gegeben sind. Die Hochindizes  $r$ ,  $s$ ,  $f$  und  $t$  bezeichnen Removal-, Streu-, Spalt-(Fission-) und totalen Wirkungsquerschnitt und  $k$  den Multiplikationsfaktor. Für den radial ausgedehnten (deformierten) Kern erfüllt der (veränderte) Neutronenfluss  $\Phi'_g(\vec{r})$  die modifizierte Diffusionsgleichung

$$-D'_g(\vec{r})\Delta\Phi'_g(\vec{r}) + \sigma'^r_g(\vec{r})\Phi'_g(\vec{r}) = q'_g(\vec{r}) \quad (1)$$

mit dem modifizierten Gruppenquellterm

$$q'_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \sigma'_{gg'}{}^s(\vec{r}) \Phi'_{g'}(\vec{r}) + \frac{\lambda_g}{k'} \sum_{g' \neq g} \nu \sigma'_{g'}{}^f(\vec{r}) \Phi'_{g'}(\vec{r})$$

und dem zugehörigen Multiplikationsfaktor  $k'$ . Durch  $k$  und  $k'$  drückt sich die Reaktivitätsänderung infolge der Kernaussdehnung aus. Da in Kernsimulatoren die räumliche Diskretisierung, also insbesondere die radiale Nodalisierung, einmal festgelegt wird, sind Änderungen an der Geometrie später nicht mehr unmittelbar durchführbar. Um dieses Problem zu umgehen, wird die Nodalisierung  $(x, y, z)$  des radial ausgedehnten Kernzustands auf die Nodalisierung des nicht ausgedehnten Kernzustands  $(\xi, \eta, z)$  durch eine Koordinatentransformation wie folgt abgebildet:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial y} \qquad \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial y}$$

Mittels der Jacobi-Matrix

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}$$

lassen sich die partiellen räumlichen Ableitungen des „ausgedehnten“ Kernzustands im Koordinatensystem des nicht ausgedehnten Kernzustands ausdrücken. Der Laplace-Operator der Diffusionsgleichung für den ausgedehnten Kernzustand operiert auf den entsprechend modifizierten Neutronenfluss gemäß

$$\Delta \Phi'_g \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \Phi'_g}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial \Phi'_g}{\partial y} \right)$$

und transformiert sich wie folgt:

$$\Delta \Phi'_g = \frac{1}{\det J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( y_\eta \frac{\partial \Phi'_g}{\partial x} - x_\eta \frac{\partial \Phi'_g}{\partial y} \right) + \frac{1}{\det J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( x_\xi \frac{\partial \Phi'_g}{\partial y} - y_\xi \frac{\partial \Phi'_g}{\partial x} \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(\det J)^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (x_\eta^2 + y_\eta^2) \frac{\partial \Phi'_g}{\partial \xi} - (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) \frac{\partial \Phi'_g}{\partial \eta} \right] \\
&\quad + \frac{1}{(\det J)^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (x_\xi^2 + y_\xi^2) \frac{\partial \Phi'_g}{\partial \eta} - (x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) \frac{\partial \Phi'_g}{\partial \xi} \right] \quad (2)
\end{aligned}$$

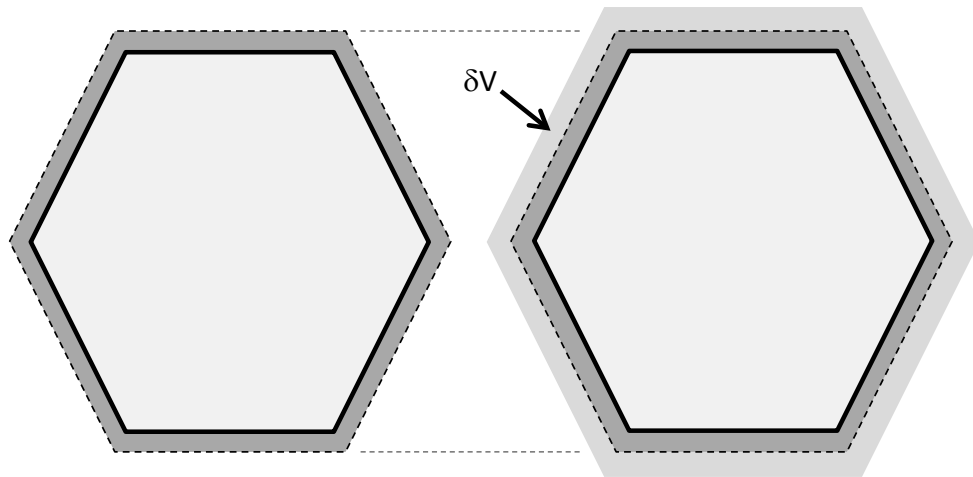
Darin bedeutet die Kurzschreibweise  $y_\eta = \frac{\partial y}{\partial \eta}$  etc., und  $\det J = x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta$  ist die Determinante der Jacobi-Matrix. Für hinreichend kleine radiale Deformationen gilt  $\frac{\partial x}{\partial \eta} \approx 0$  und  $\frac{\partial y}{\partial \xi} \approx 0$ , so dass Gleichung (2) sich zu

$$\Delta \Phi'_g = \frac{1}{x_\xi^2} \frac{\partial^2 \Phi'_g}{\partial \xi^2} + \frac{1}{y_\eta^2} \frac{\partial^2 \Phi'_g}{\partial \eta^2}$$

vereinfachen lässt. Setzt man diesen Ausdruck in die modifizierte Diffusionsgleichung (1) ein, so erhält man für die Diffusionsgleichung des radial ausgedehnten Kernzustands:

$$-\frac{D'_g(\vec{r})}{\left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2} \cdot \frac{\partial^2 \Phi'_g}{\partial \xi^2} - \frac{D'_g(\vec{r})}{\left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2} \cdot \frac{\partial^2 \Phi'_g}{\partial \eta^2} + \sigma'_{rg}(\vec{r}) \Phi'_g(\vec{r}) = q'_g(\vec{r}) \quad (3)$$

Diese Gleichung ähnelt der Diffusionsgleichung des nicht ausgedehnten Kernzustands mit dem Unterschied, dass die Diffusionskoeffizienten durch das Quadrat der Verhältnisse „deformiert zu normal“ in x- und y-Richtung dividiert sind. Ferner sind der Removal-Wirkungsquerschnitt als auch die im Quellterm erscheinenden Wirkungsquerschnitte so zu modifizieren, dass sie dem veränderten Kühlmittelanteil im veränderten Spalt zwischen benachbarten Brennelementen Rechnung tragen (siehe Abb. 4.1).



**Abb. 4.1** Brennelement einschließlich halben Zwischenraums zu den sechs Nachbarelementen im nicht deformierten Ausgangszustand (links) und im Zustand mit ausgedehnter Kerngitterplatte (rechts). Die hellgrau dargestellte Vergrößerung des Zwischenraums ist mit  $\delta V$  bezeichnet. Die Abmessung des Wrappers (schwarz) ist unverändert.

Da sich durch die Vergrößerung des Spalts die Gitterweite und damit offensichtlich das für die Wirkungsquerschnittserzeugung wichtige Homogenisierungsvolumen verändert, erfordert dies genaugenommen die Durchführung separater Wirkungsquerschnittsberechnungen für die aktuell vorliegende temperaturabhängige Gitterweite. Dies kann in Analogie zur Erzeugung zustandsabhängiger (Brennstofftemperatur, Kühlmitteldichte, ...) Wirkungsquerschnitte in parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken durch Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte nach der Brennelement-Gitterweite erfolgen. Um den damit verbundenen Aufwand in der Wirkungsquerschnittserzeugung zu reduzieren, wurde folgendes Gewichtungsschema als einfache praktikable Näherung verwendet:

$$\sigma'_g{}^\alpha(V + \delta V) \approx \sigma_g{}^\alpha \cdot V + \sigma_{cool,g}{}^\alpha \cdot \delta V$$

Darin bezeichnet  $\alpha$  den Wirkungsquerschnittstyp (Absorption, Removal, Streuung etc.) und  $\delta V$  die mit der Zwischenraumvergrößerung verbundene Kühlmittelvolumenänderung zwischen benachbarten Elementen; die Abmessung des Wrappers bleibt unverändert. Bei Ausdehnung der Kerngitterplatte ist  $\delta V > 0$ , bei Kompression  $\delta V < 0$ . In diesem Ausdruck ist  $\sigma_{cool,g}{}^\alpha$  der Wirkungsquerschnitt des Typs  $\alpha$  für den Kühlmittelzwischenraum.

Gemäß obiger Beziehung errechnen sich in Abhängigkeit von  $\delta V$  die modifizierten Wirkungsquerschnitte zu

$$\sigma'_g{}^\alpha = \frac{\sigma_g^\alpha \cdot V + \sigma_{cool,g}^\alpha \cdot \delta V}{V + \delta V} \quad (4)$$

Der Diffusionskoeffizient wird wegen des Zusammenhangs  $D = 1/(3\sigma_{tr})$  gesondert behandelt, indem der Transport-Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{tr}$  transformiert wird:

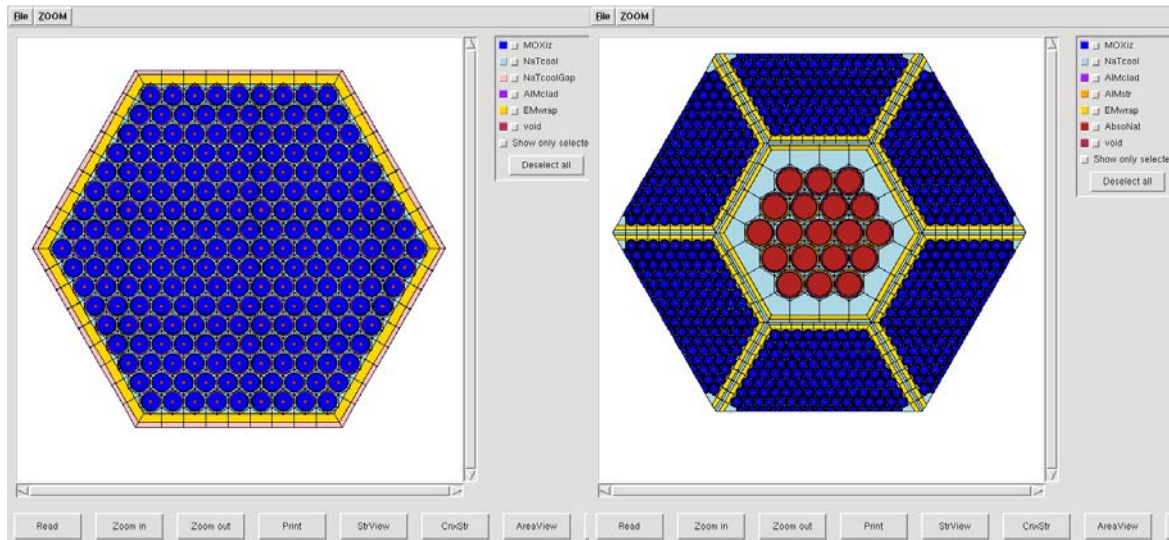
$$D'_g = \frac{V + \delta V}{\frac{V}{D_g} + \frac{\delta V}{D_{cool,g}}} \quad (5)$$

In Analogie zu Gleichung (4) bezeichnet  $D_{cool,g}$  den Diffusionskoeffizienten des Kühlmittels im Spalt zwischen benachbarten Brennelementen.

#### 4.2.1.2 Implementierung und Testrechnungen

Das oben skizzierte Verfahren wurde zunächst in einen 3D-Weniggruppen-Finite-Elemente-Diffusionscode (FEMDiff3D) implementiert, dessen Entwicklung auf ein früheres BMWi-Vorhaben zurückgeht /PAU12/. Dieses Programm löst die direkte und adjungierte Mehrgruppen-Diffusionsgleichung nach dem Galerkin-Verfahren auf geraden Dreiecksprismen unter Verwendung linearer Basisfunktionen. Die Neutronenflussverteilung je Energiegruppe wird nach dem Verfahren der konjugierten Gradienten mit Präkonditionierung durch unvollständige LU-Zerlegung berechnet. Die Finite-Elemente-Methode bietet den Vorteil der geometrischen Flexibilität, d.h. Kernkonfigurationen mit rechteckigen und hexagonalen Brennelementquerschnitten können mit demselben Code berechnet werden; der Unterschied liegt allein in den Knoten- und Element-konnektivitätslisten. Entsprechend Gleichung (2) wurde FEMDiff3D dahingehend erweitert, dass die modifizierte Diffusionsgleichung (3) gelöst wird und gemäß den Gleichungen (4) und (5) für jedes Brennelement zwei verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken eingelesen werden, wobei die eine Bibliothek den undeformierten (Referenz-)Zustand ( $\sigma_g^\alpha$  bzw.  $D_g$  in Gleichung (4) bzw. (5)) und die andere Bibliothek das Kühlmittel im Zwischenraum repräsentiert ( $\sigma_{cool,g}^\alpha$  bzw.  $D_{cool,g}$  in Gleichung (4) bzw. (5)). Diese beiden Bibliotheken werden mit dem Zell-Abbrand-Code HELIOS-1.12 /CAS92/ generiert. Als Anwendungsbeispiel dient die generische Auslegung des natriumgekühlten Generation-IV-Konzepts ASTRID, welches in dem parallel laufenden EU-

Projekt ESNII+ /ESN13/ untersucht wird. Abb. 4.2 zeigt die HELIOS-Modelle für ein Brennelement und ein Steuerelement.



**Abb. 4.2** HELIOS-Modelle für ein Brennelement (links) und ein Steuerelement (rechts) einschließlich benachbarter halber Brennelemente.

Da im Unterschied zu Leichtwasserreaktoren Steuerelemente schneller Systeme kein spaltbares Material enthalten, werden für die Erzeugung von Steuerelement-Wirkungsquerschnitten Superzellmodelle verwendet, bei denen die lokale Brennelementnachbarschaft zur Bereitstellung des erforderlichen Neutronenspektrums einbezogen wird. Die Homogenisierung erfolgt nur über den hexagonalen Querschnitt des Steuerelements einschließlich des halben Kühlmittelzwischenraums zu den Nachbarerelementen. Alle nuklearen Weniggruppendaten wurden für die in Tab. 4.1 wiedergegebene 8-Energiegruppen-Struktur berechnet.

**Tab. 4.1** Energiegruppenstruktur für die Erzeugung der nuklearen Gruppendaten.

Energiegruppenindex	Untergrenze (eV)
1	2.2313E+6
2	8.2085E+5
3	3.0197E+5
4	1.1109E+5
5	4.0868E+4
6	1.5034E+4
7	7.4852E+2
8	1.0000E-4



Zusätzlich zur Referenz-Gitterweite des undeformierten Kernzustands erhält FEMDiff3D die Gitterweite entsprechend der temperaturabhängig ausgedehnten Kerngitterplatte, errechnet daraus  $\delta V$  und die modifizierten Wirkungsquerschnitte und Diffusionskoeffizienten gemäß den Gleichungen (4) und (5). Temperaturabhängige Gitterweiten werden nach der im Rahmen von ESNII+ bereitgestellten thermischen Ausdehnungskorrelation als Funktion der Temperatur der Kerngitterplatte berechnet.

Abgesehen vom durch die Nominaltemperatur der Kerngitterplatte von 400 °C gegebenen Referenzzustand wurden drei verschiedene radiale Ausdehnungszustände, die den Temperaturen 600 °C, 800 °C und 1000 °C der Kerngitterplatte entsprechen, betrachtet. Die zugehörigen temperaturabhängigen Gitterweiten sind in Tab. 4.2 wiedergegeben.

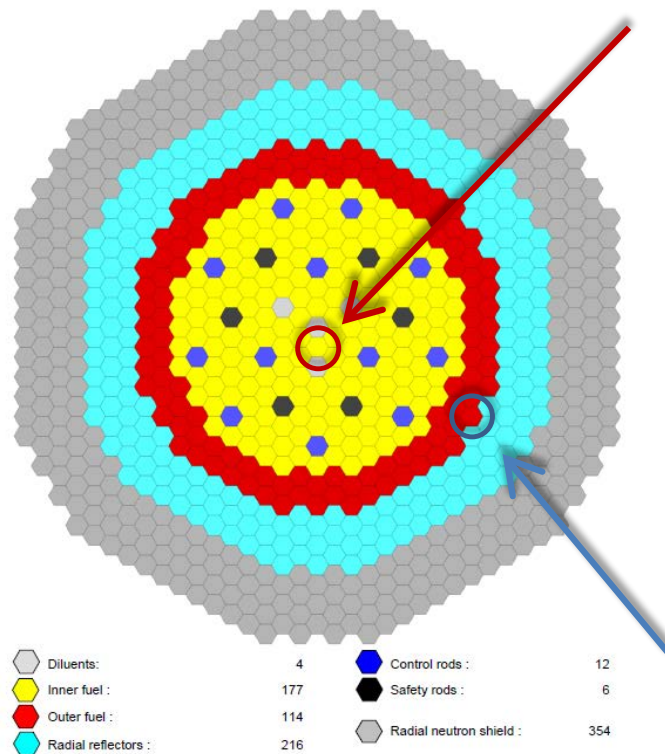
**Tab. 4.2** Ergebnisse des Modells für die radiale Ausdehnung der Kerngitterplatte für die generische ASTRID-Spezifikation.

Kerngitterplatten-Temperatur	Gitterweite (cm)	$k_{eff}^{exact}$	Reaktivitätsänderung (pcm)	$k_{eff}^{approx}$	$\Delta\rho$ (pcm)
400 °C (nom.)	17.611	1.00466	0	–	–
600 °C	17.674 (+0.36%)	1.00280	–185	1.00277	–3
800 °C	17.741 (+0.74%)	1.00089	–375	1.00076	–13
1000 °C	17.809 (+1.1%)	0.99893	–570	0.99873	–20

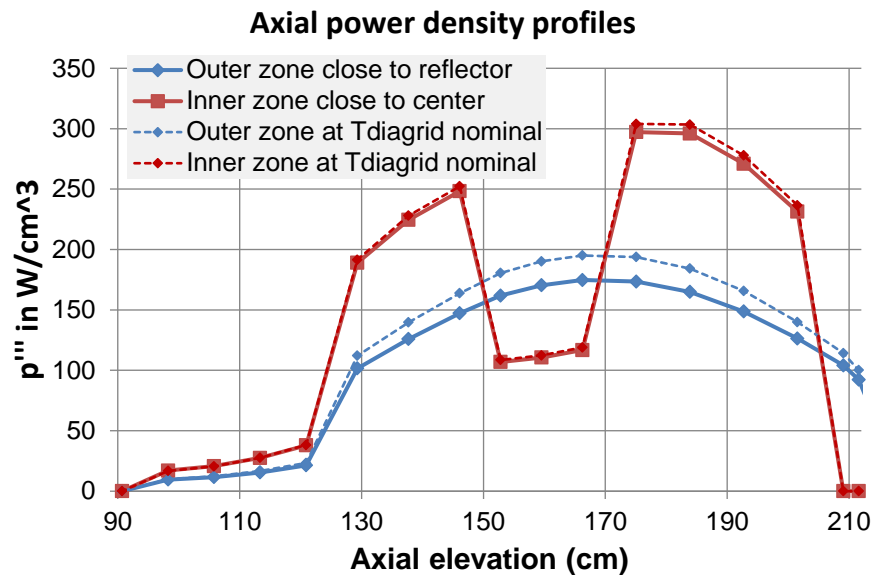
Für jede Temperatur wurden zwei Rechnungen durchgeführt. In der „exakten“ Rechnung, deren Multiplikationsfaktoren in Spalte  $k_{eff}^{exact}$  der Tab. 4.2 angegeben sind, wurde die radiale Nodalisierung gemäß der jeweiligen Gitterweite ausgeführt. Die zweite Rechnung verwendet das beschriebene Modell zur radialen Kernaussdehnung unter Verwendung der Gitterweite des Nominalzustands (400 °C). Die entsprechenden Multiplikationsfaktoren sind in Spalte  $k_{eff}^{approx}$  eingetragen. Die durch die Ausdehnung der Kerngitterplatte bewirkte Reaktivitätsänderung gegenüber dem Referenzzustand ist in der Spalte „Reaktivitätsänderung“ in pcm eingetragen. Die rechte Spalte schließlich gibt die Reaktivitätsdifferenz zwischen exakter und Näherungsrechnung an.

Die Abweichungen zur exakten Rechnung liegen im unteren zweistelligen pcm-Bereich und damit deutlich unter den mit der radialen Ausdehnung verbundenen Reaktivitäts-

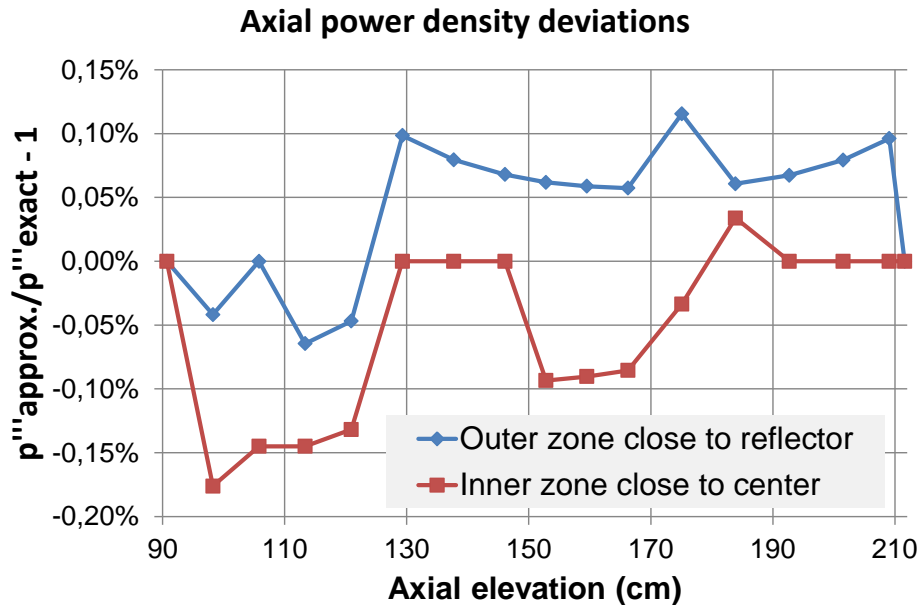
änderungen. Dies ist ein erster Hinweis darauf, dass die beschriebene Methode grundsätzlich in der Lage ist, radiale Ausdehnungseffekte mit existierenden deterministischen Kernberechnungsprogrammen und ihren einmal fixierten Nodalierungen zu beschreiben, ohne die radiale Nodalierung der temperaturabhängigen Brennelement-Gitterweite anpassen zu müssen. Dies gilt auch für die Berechnung axialer Leistungsdichteprofile. Dazu wurden exemplarisch die beiden in Abb. 4.3 markierten Brennelementpositionen im Kern – die eine im Zentrum und die andere in der Brutzone am Rand zum Reflektor – ausgewählt, für die jeweils die mit der Näherungsmethode ermittelten axialen Leistungsdichteprofile mit der exakten Rechnung verglichen wurden. Abb. 4.4 zeigt zunächst die mit der Näherungsmethode berechneten axialen Leistungsdichteprofile (durchgezogene Linien) für die Kerngitterplattentemperatur von 1000 °C im Vergleich zum Referenzzustand bei 400 °C (gestrichelte Linien). Erwartungsgemäß ist der Effekt der radialen Kernaussdehnung in Kernmitte (rot) geringer als an der Peripherie (blau). Die relativen Abweichungen in den axialen Leistungsdichteprofilen zwischen exakter Rechnung und dem Näherungsmodell (jeweils für die Kerngitterplattentemperatur von 1000 °C) sind in Abb. 4.5 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass einerseits die Fehler mit unter 1 % relativ gering ausfallen, andererseits das Näherungsmodell die Leistungsdichte an der peripheren Position tendenziell überschätzt, im Zentrum dagegen leicht unterschätzt. Insgesamt sind die durch das Näherungsmodell bewirkten Abweichungen zur exakten Rechnung deutlich geringer als die durch die Kerngitterplattenausdehnung verursachten Änderungen in den axialen Leistungsdichteprofilen. Dies ist zur Verdeutlichung in Abb. 4.6 veranschaulicht.



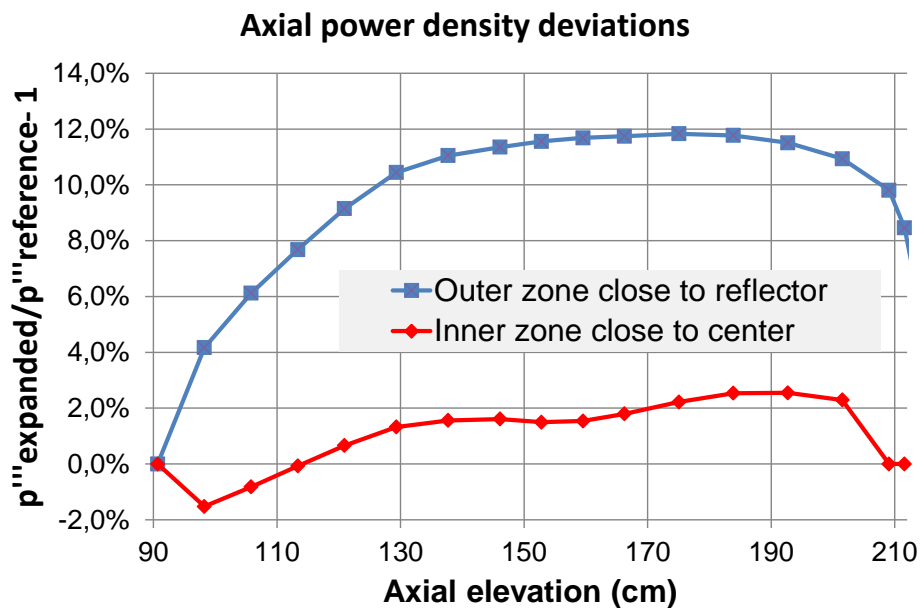
**Abb. 4.3** Ausgewählte Brennelementpositionen, für die axiale Leistungsdichteprofile ausgewertet werden.



**Abb. 4.4** Durchgezogene Linien: Mit dem radialen Ausdehnungsmodell für  $T_{\text{diagrid}} = 1000 \text{ }^\circ\text{C}$  berechnete axiale Leistungsdichteprofile in den ausgewählten Brennelementpositionen. Gestrichelte Linien: Leistungsdichteprofile des Referenzzustands ( $T_{\text{diagrid}} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$ ) zum Vergleich.



**Abb. 4.5** Relative Abweichung der genähert berechneten axialen Leistungsdichte-profile von der exakten Rechnung für  $T_{\text{diagrid}} = 1000 \text{ }^{\circ}\text{C}$  in den ausgewählten Brennelementpositionen.



**Abb. 4.6** Abweichungen der axialen Leistungsdichteprofile zwischen radial ausgedehntem und Referenz-Kernzustand.

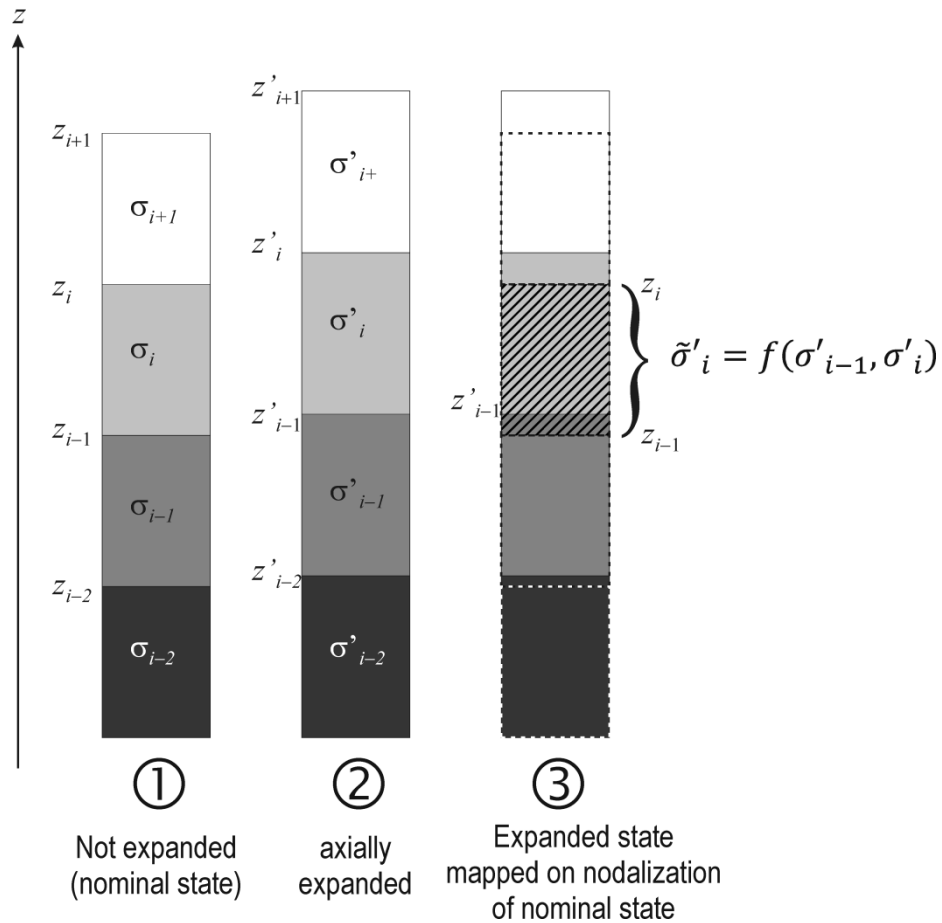
Die in diesem Arbeitspunkt durchgeführten Modellentwicklungen und Untersuchungen zeigen, dass ein deterministisches Kernrechnungsprogramm mit einmal festgelegter und fixierter Nodalisierung grundsätzlich in der Lage ist, radiale Kernaussdehnungseffekte nicht nur bezüglich der Reaktivitätsänderung, sondern auch hinsichtlich der Leis-

tungsdichteverteilung zu beschreiben. Dies ist insbesondere für transiente Kernberechnungen von Bedeutung.

#### **4.2.2 Axiale Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr**

#### **4.2.3 Methode**

In Analogie zur Modellierung der radialen Kernausdehnung liegt die Zielsetzung der Simulation axialer Ausdehnungseffekte von Brennstoff und Hüllrohr in der Anwendung existierender deterministischer 3D-Kernberechnungsprogramme mit ihren einmalig für den Ausgangszustand unter z. B. Nominalbedingungen festgelegten räumlichen Nodalisierungen. Problemstellung und Lösungsansatz sind in Abb. 4.7 dargestellt. Darin ist ein aus vier Materialzonen bestehender axialer Abschnitt (z. B. eines Brennelements) im Ausgangszustand ((1), Referenz) und im axial ausgedehnten Zustand ((2) und (3), erhöhte Brennstoff- bzw. Hüllrohrtemperatur) abgebildet. Jede Materialzone wird durch ihre jeweilige Wirkungsquerschnitte ( $\sigma_i$ ) repräsentiert. Die axiale Diskretisierung ( $z_i$ ) in (1) ist so gewählt, dass die Maschengrenzen mit den Materialzonengrenzen des Referenzzustands übereinstimmen. In (2) wird der ausgedehnte Zustand durch eine den axial verschobenen Materialzonengrenzen angepasste axiale Diskretisierung ( $z'_i$ ) und zusätzlich temperatur- und dichteabhängige Wirkungsquerschnitte ( $\sigma'_i$ ) beschrieben.

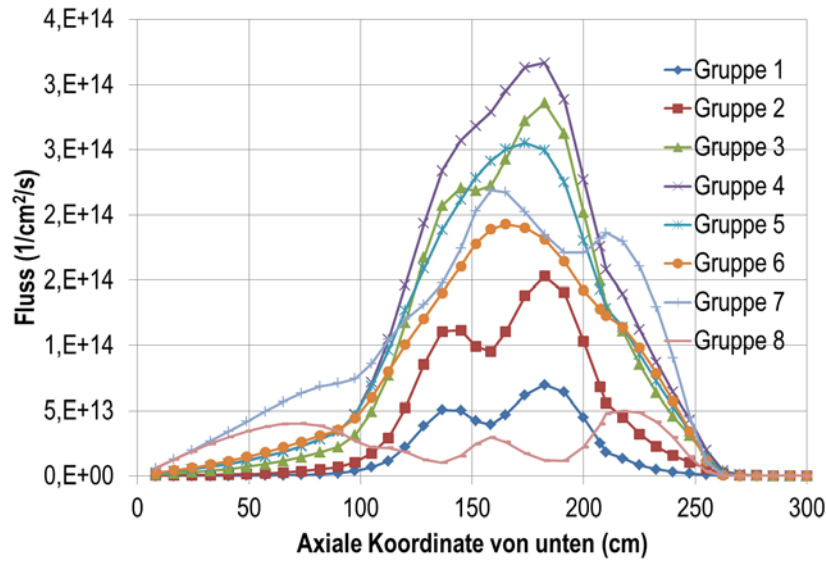


**Abb. 4.7** Schema des Modells zur Beschreibung axiale Ausdehnungseffekte am Beispiel eines aus vier Materialzonen bestehenden axialen Abschnitts.

Ziel ist es, den ausgedehnten Zustand (2) unter Berücksichtigung der temperatur- und dichteabhängige Wirkungsquerschnitte ebenfalls in der Nodalisierung des Referenzzustands (1) darzustellen, wie in Abb. 4.7 (3) gezeigt (gestrichelte Linien). Dies bedeutet, dass die Materialgrenzen nun nicht mehr mit den Nodegrenzen zusammenfallen, sondern innerhalb eines Nodes des Referenzzustands liegen können. Dies ist in Abb. 4.7 (3) anhand schraffiert dargestellten Nodes  $i$  gezeigt, in den von unten ein Teil der darunterliegenden Materialzone  $i-1$  eindringt. Die nuklearen Materialeigenschaften des Nodes  $i$  im ausgedehnten Zustand, dargestellt in der Nodalisierung des Referenzzustands, werden offensichtlich durch eine geeignete Kombination („Mischung“) des ursprünglichen Wirkungsquerschnitts  $\sigma'_i$  und des Wirkungsquerschnitts  $\sigma'_{i-1}$  der darunterliegenden Materialzone beschrieben:

$$\tilde{\sigma}'_i = f(\sigma'_{i-1}, \sigma'_i)$$

Im hier entwickelten Modell wird die Kombination durch eine geeignete Interpolation der zonenweisen Wirkungsquerschnitte unter Verwendung der aktuellen iterierten der axialen Neutronenflussverteilung in jedem Brennelement und jeder Energiegruppe erreicht. Da in nodalen Diffusionscodes wie z. B. PARCS für jede axiale Masche nur ein mittlerer Wert für den Neutronenfluss in jeder Energiegruppe berechnet wird (siehe das Beispiel in Abb. 4.8), liegt keine Information über das Flussprofil innerhalb einer axialen Masche vor.



**Abb. 4.8** Gruppenweise axiale Neutronenflussprofile für das generische ASTRID-Modell in einem zentralen Brennelement. Jede Markierung kennzeichnet einen nodalen Flussmittelwert, die Geraden dazwischen entsprechen einem linearen Flussverlauf zwischen zwei Nodes.

Die Materialmischung würde demnach einer einfachen Volumenhomogenisierung entsprechen. Um die damit verbundenen Nachteilen zu vermeiden, wird stattdessen eine Fluss-Volumen-Gewichtung zwischen den Materialgrenzen des Referenzzustands durchgeführt:

$$\tilde{\sigma}'_i = \frac{\int_{z_{i-1}}^{z_i} dz' \sigma'(z') \Phi_i(z')}{\int_{z_{i-1}}^{z_i} dz' \Phi_i(z')} = \frac{\sigma'_{i-1} \int_{z_{i-1}}^{z_{i-1}'} dz' \Phi_i(z') + \sigma'_i \int_{z_{i-1}'}^{z_i} dz' \Phi_i(z')}{\int_{z_{i-1}}^{z_i} dz' \Phi_i(z')}$$

Darin bezeichnet  $\Phi_i(z)$  den räumlichen Flussverlauf innerhalb des axialen Nodes  $i$  (untere und obere Maschengrenze bei  $z_{i-1}$  bzw.  $z_i$ ) und  $\sigma'_{i-1}$  bzw.  $\sigma'_i$  die temperaturkorrigierten Wirkungsquerschnitte der Nodes  $i-1$  bzw.  $i$ , wobei der besseren Lesbarkeit

wegen der Energiegruppenindex  $g$  weggelassen wurde. Der Diffusionskoeffizient ( $D$ ) wird über den Transportwirkungsquerschnitt  $\sigma_{trans} = (3 \cdot D)^{-1}$  verarbeitet. Für den räumlichen Flussverlauf  $\Phi_i(z)$  innerhalb eines axialen Nodes sind geeignete Annahmen zu treffen. Im hier beschriebenen Modell wird der intranodale Flussverlauf durch räumliche Interpolation zwischen den nodalen Flusswerte in den beiden Nachbarnodes (Indizes  $i-1$  und  $i+1$ ) approximiert, die als Randbedingungen für die Interpolation dienen und die der aktuellen Iterierten des axialen nodalen Flussprofils entnommen werden. Für die Interpolation wurden ein linearer und ein quadratischer Ansatz implementiert, wobei in letzteren die Steigung des Flusses an einer Nodegrenze als zusätzliche Randbedingung eingeht. Genauere Approximationen des intranodalen Flussverlaufes können durch eine parallel geschaltete numerische Lösung der eindimensionalen Diffusionsgleichung auf einem feinen Gitter entlang der einzelnen Brennelemente erhalten werden, die ihre Randbedingungen von den aktuellen Iterierten der nodalen axialen Flussprofile erhält. Dies wurde testweise in Verbindung mit FEMDiff3D realisiert, wobei hierzu das Diffusionsmodul von TORT-TD adaptiert wurde.

#### 4.2.4 Implementierung und Testrechnungen

Das vorstehend beschriebene Verfahren wurde in den Code PARCS implementiert. Dabei kann zwischen linearer und quadratischer intranodaler Flussinterpolation gewählt werden. PARCS wurde ferner dahingehend erweitert, dass zusätzlich zur brennelementweisen nodalen Materialspezifikation (Schlüsselwort `assy_type`) eine axiale nodale Temperaturverteilung nach dem gleichen Schema vorgegeben werden kann. Dazu wurde das Schlüsselwort `assy_temp` eingeführt:

```

grid_z      11*8.1818  4*7.5000  3*8.3333  3*6.6667  4*8.7500  1*7.5000  1*2.5000  1*7.5000  4*7.7389
            4*7.8573  3*7.2157
assy_type   1  11*001  4*002  3*003  3*004  4*003  1*001  1*005  1*005  4*005  4*006  3*006  fuel
assy_type   2  11*001  4*002  3*007  3*007  4*007  1*007  1*007  1*001  4*005  4*006  3*006  fuel
assy_type   3  11*008  4*008  3*008  3*008  4*008  1*008  1*008  1*008  4*009  4*009  3*009  fuel
assy_type   4  11*010  4*010  3*010  3*010  4*010  1*010  1*010  1*010  4*011  4*011  3*012  fuel
assy_type   5  11*013  4*013  3*013  3*013  4*013  1*013  1*013  1*013  4*013  4*013  3*013  fuel
assy_type   6  11*014  4*014  3*014  3*014  4*014  1*014  1*014  1*014  4*014  4*014  3*014  fuel
assy_type   7  11*015  4*015  3*015  3*015  4*015  1*015  1*015  1*015  4*015  4*015  3*015  refl

assy_temp   1  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   2  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   3  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   4  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   5  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   6  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999
assy_temp   7  11*675  4*675  3*675  3*675  4*675  1*675  1*675  1*675  4*-999  4*-999  3*-999

```

Mit dem Wert -999 können einzelne axiale Nodes von der thermischen Ausdehnung ausgeschlossen werden, um z. B. räumlich ortsfeste Strukturen zu berücksichtigen.



Zum Test des Modells zur axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr wurde wurden PARCS-Modelle der generischen ASTRID-Kernkonfiguration erstellt, und zwar für die Geometrie im kalten Zustand (20 °C) und für verschiedene globale Brennstoff-/Hüllrohrtemperaturen. Da die in /ESN13/ spezifizierten Daten für das Zyklusende gelten, kann davon ausgegangen werden, dass der im frischen Zustand vorhandene gasgefüllte Spalt zwischen Brennstoff und Hüllrohrinnenwand geschlossen ist und somit Brennstoff und Hüllrohr sich simultan ausdehnen. Zur Beschreibung der temperaturabhängigen Ausdehnung wurde die ebenfalls in /ESN13/ angegebene Korrelation verwendet. Mittels HELIOS-1.12 wurde eine Wirkungsquerschnittsbibliothek in acht Energiegruppen erstellt, die nach der Brennstoff-/Hüllrohrtemperatur parametrisiert ist und somit ausdehnungsabhängige Änderungen der Massendichte von Brennstoff- und Hüllrohrmaterial und radialen Abmessungen dieser Materialien (Durchmesser des Brennstoffpellets und Dicke des Hüllrohrs) nach den in /ESN13/ angegebene Korrelationen berücksichtigt. Um die Genauigkeit des Modells zur axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr beurteilen zu können, wurden für bestimmte Brennstoff-/Hüllrohrtemperaturen spezielle PARCS-Modelle (im Folgenden als „exakte“ Modelle bezeichnet) erstellt, bei denen die axiale Diskretisierung mit den infolge der Ausdehnung verschobenen Materialzonengrenzen übereinstimmt.

Global fuel/cladding temperature (°C)	$k_{eff}^{exact}$	Quadratic intranodal flux interpolation	
		$k_{eff}$	$\Delta\rho$ (pcm)*
475	1.00799	1.00799	0
675	1.00776	1.00785	9

**Tab. 4.1** Ergebnisse des in PARCS implementierten Modells zur axialen Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung im Vergleich zur exakten Rechnung. \* $\Delta\rho$  ist die Reaktivitätsdifferenz bezüglich  $k_{eff}^{exact}$ .

Die mit den „exakten“ PARCS-Modellen berechneten Multiplikationsfaktoren für die Brennstoff-/Hüllrohrtemperaturen von 475 °C und 675 °C sind in Tab. 4.1, Spalte  $k_{eff}^{exact}$ , angegeben. Erwartungsgemäß sinkt der Multiplikationsfaktoren mit zunehmender Temperatur. Die Multiplikationsfaktoren in Spalte  $k_{eff}$  sind das Ergebnis des axialen Ausdehnungsmodells in Verbindung mit quadratischer intranodaler Flussinterpolat-

tion, wobei die Geometrie des kalten Zustands (20 °C) zugrunde gelegt wurde. Dies führt dazu, dass in einzelne sehr kleine axiale Maschen die Materialzonengrenze des darunterliegenden Nodes relativ weit eindringt. Die in der letzten Spalte aufgeführte Reaktivitätsdifferenz zwischen genäherter und exakter Rechnung liegt unterhalb des durch die axiale Ausdehnung bedingten Reaktivitätseffekts und zeigt, dass das beschriebene Modell die axiale Ausdehnung von Brennstoff- und Hüllrohr grundsätzlich zufriedenstellend simulieren kann.

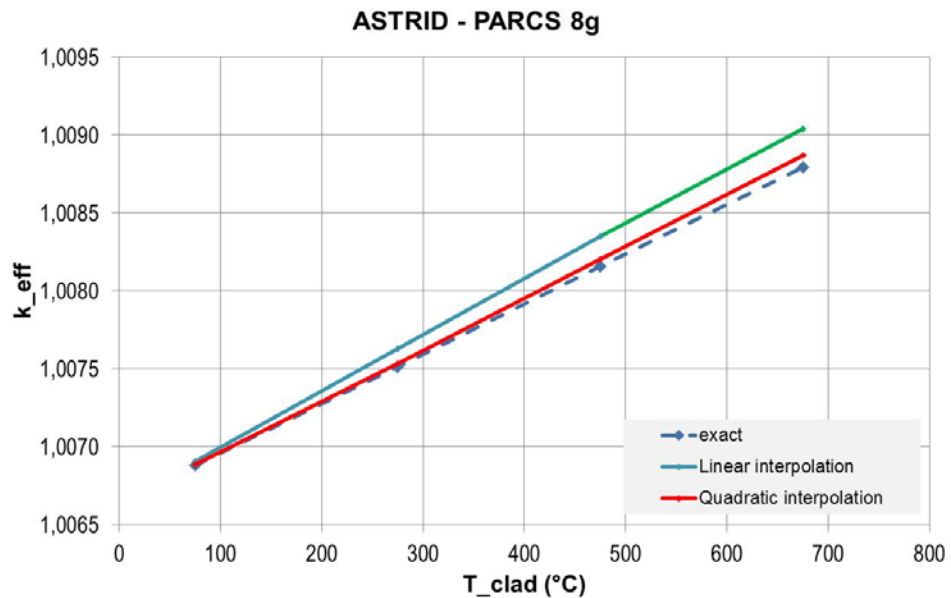
Um den Einfluss der Art der intranodalen Flussinterpolation zu untersuchen, wurden PARCS-Rechnungen für verschiedene Brennstoff-/Hüllrohrtemperaturen mit linearer und quadratischer Flussinterpolation durchgeführt, hier jedoch ohne die Temperaturabhängigkeit der Materialdichten zu berücksichtigen. Wiederum basiert das PARCS-Modell auf der Geometrie bei 20 °C, und für jeden Wert der folgenden Brennstoff-/Hüllrohrtemperaturen wurde zum Vergleich ein PARCS-Modell verwendet, bei dem die axiale Diskretisierung den durch die jeweilige axiale Ausdehnung verschobenen Materialzonengrenzen entspricht.

Global fuel/cladding temperature (°C)	$k_{eff}^{exact}$	Linear intranodal flux interpolation		Quadratic intranodal flux interpolation	
		$k_{eff}$	$\Delta\rho$ (pcm)*	$k_{eff}$	$\Delta\rho$ (pcm)*
75	1.00688	1.00691	3	1.00688	0
275	1.00751	1.00763	12	1.00753	2
475	1.00816	1.00835	19	1.00820	4
675	1.00879	1.00904	24	1.00887	8

**Tab. 4.2** Ergebnisse des in PARCS implementierten Modells zur axialen Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung im Vergleich zur exakten Rechnung (feste Materialdichten) für lineare und quadratische intranodale Flussinterpolation. \* $\Delta\rho$  ist die Reaktivitätsdifferenz bezüglich  $k_{eff}^{exact}$ .

Die Ergebnisse sind in Tab. 4.2 zusammengefasst, wobei dieselben Bezeichnungen wie in Tab. 4.1 gelten. Wegen der hier nicht betrachteten Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte steigen erwartungsgemäß die Multiplikationsfaktoren mit wachsender Brennstoff-/Hüllrohrtemperatur. Wiederum sind die Reaktivitätsdifferenzen zwi-

schen den Ergebnissen des Ausdehnungsmodells und der „exakten“ Rechnung kleiner als die durch die Ausdehnung selbst bewirkten Reaktivitätsänderungen. Die quadratische intranodale Flussinterpolation liefert jedoch deutlich geringere Abweichungen als die lineare Interpolation. Dies ist in nochmals Abb. 4.9 veranschaulicht.



**Abb. 4.9** Graphische Darstellung der Ergebnisse von Tab. 4.1.

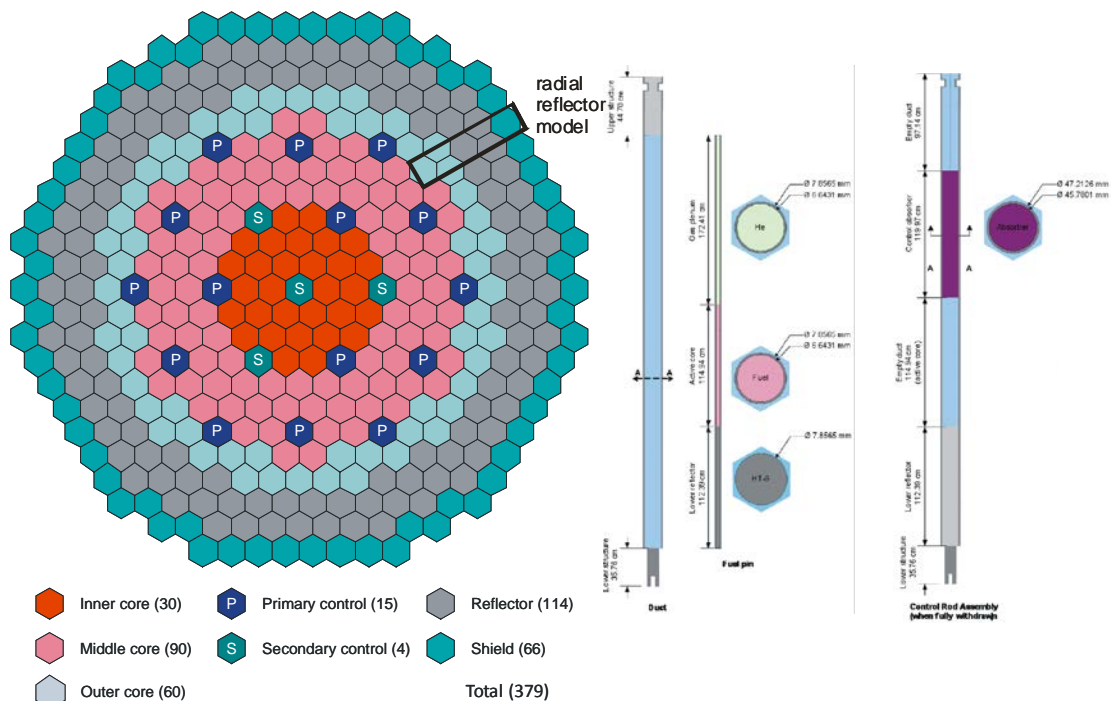
#### 4.2.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden elementare Modelle zur neutronenphysikalischen Beschreibung thermostruktureller Ausdehnungseffekte von Kerngitterplatte (radial) und Brennstoff und Hüllrohr (axial) entwickelt und in PARCS implementiert. Ziel war die Nutzung validierter 3D-Neutronenkinetik-Codes mit ihren fest vorgegebenen räumlichen Diskretisierungen. Das Modell für die radiale Ausdehnung der Kerngitterplatte basiert auf einer Koordinatentransformation der Diffusionsgleichung, das Modell für die axiale Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr arbeitet mit einer geeigneten flussgewichteten intranodalen Interpolation der Wirkungsquerschnitte, die die axiale Material(grenzen)verschiebung nachbildet. Die gezeigten ersten Testfälle für das ASTRID-Kernkonzept belegen die Anwendbarkeit beider Modelle. Weiterentwicklungen dieser Modelle betreffen u.a. axial variierende Brennelement-Gitterweiten zur Beschreibung des sog. Core-Flowering-Effekts, Simulation der Ausdehnung des Steuerstabantriebs und Kombination beider Modelle.

## 4.3 AP 2.3: Erstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten

### 4.3.1 Medium Size Oxide Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions

In der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions /BLA11/ werden je zwei Konzepte für große (3600 MW thermische Leistung) und mittelgroße (1000 MW thermische Leistung) natriumgekühlte schnelle Systeme betrachtet, von denen das eine auf metallischem und das andere auf Oxid-Brennstoff basiert. Von dem mittelgroße Konzept, das auf dem ABR-Kern (Advanced Burner Reactor) basiert, wird im Folgenden die Variante mit Oxid-Brennstoff (Medium Size Oxide Core) betrachtet.



**Abb. 4.10** Konfiguration des Medium Size Oxide Core. Das Rechteck kennzeichnet das radiale Reflektormodell, siehe hierzu Abb. 4.12.

Die Kernanordnung des Medium Size Oxide Core ist in Abb. 4.10 wiedergegeben. Der Kern besteht aus 180 Brennelementen, 114 radialen Reflektor-, 19 Steuer-Elementen sowie 66 Elementen des radialen Schields. Die aktive Zone besteht in radialer Richtung aus drei Bereichen, die als innere, mittlere und äußere Kernzone bezeichnet werden und 30, 90 bzw. 60 Brennelemente mit jeweils unterschiedlicher Brennstoffzusammensetzung umfassen. Ausgewählte Kenngrößen sind in Tab. 4.3 angegeben. Wie Abb. 4.10 rechts zu entnehmen ist, bestehen die Brennelemente in axialer Richtung aus einer 114,94 cm hohen aktiven Zone, die von MOX-Brennstoff gebildet wird und nach

unten von einem unteren axialen Reflektor und nach oben von einem Heliumgas-Plenum abgeschlossen ist. Die wendelförmigen Abstandshalter zwischen den einzelnen Stäben werden bezüglich ihrer Geometrie nicht explizit betrachtet, sondern in das Hüllrohr eingerechnet, um so die Komplexität des neutronenphysikalischen Rechenmodells zu begrenzen, ohne gleichzeitig die kernphysikalischen Eigenschaften der Abstandshalter zu vernachlässigen. An allen Seiten der 3D-Kernanordnung gelten Vakuum-Randbedingungen für den Neutronenfluss.

Parameter	Value
Thermal power	1000 MW
Average fuel temperature	1027.0 °C
Average structure and coolant temperature	432.5 °C
Subassembly pitch	16.2471 cm
Subassembly duct outer flat-to-flat distance	15.8123 cm
Subassembly duct wall thickness	0.3966 cm

**Tab. 4.3** Ausgewählte Kenngrößen des Medium Size Oxide Kerns.

Die reaktorphysikalische Kernberechnung erfolgt in zwei Schritten. Im ersten Schritt wurden homogenisierte Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für die drei Brennelementtypen, die Steuer-, Reflektor- und Schild-Elemente sowie die axialen Regionen des unteren Reflektors und des oberen Gasplenums mit Hilfe des Zell-Abbrand-Codes HELIOS-1.12 /CAS92/ generiert. Im zweiten Schritt wurden deterministische 3D-Kernberechnungen mit PARCS durchgeführt (siehe Kapitel 4.4).

Für die Wirkungsquerschnittserzeugung mit HELIOS wurden die nuklearen Datenbibliotheken in 112- und die 190-Energiegruppen herangezogen. Im Unterschied zur 190-Gruppen-Bibliothek enthält die 112-Gruppen-Bibliothek nukleare Daten, die mit einem schnellen Spektrum vorkondensiert wurden. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurde in einer 23-Gruppen-Struktur berechnet, die auf der 33-Energiegruppen-Struktur des Gitter-Transport-Moduls ECCO von ERANOS /RUG06/ basiert und deren Energiegrenzen in angegeben Tab. 4.4 sind.

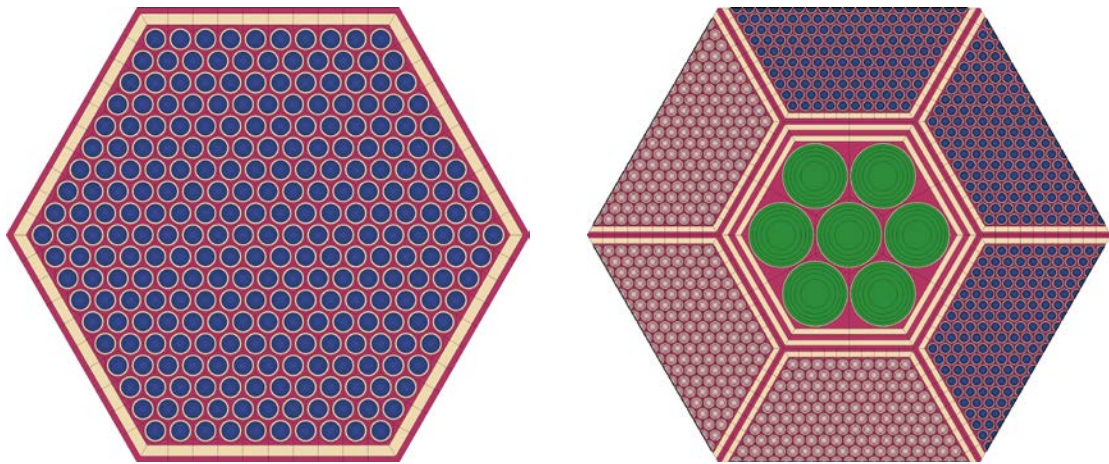
Group index	Lower limit (eV)	Group index	Lower limit (eV)
1	1.0000E+7	13	2.4788E+4
2	6.0653E+6	14	1.5034E+4
3	3.6788E+6	15	9.1188E+3
4	2.2313E+6	16	5.5308E+3
5	1.3534E+6	17	3.3546E+3
6	8.2085E+5	18	2.0347E+3
7	4.9787E+5	19	1.2341E+3
8	3.0197E+5	20	7.4852E+2
9	1.8316E+5	21	4.5400E+2
10	1.1109E+5	22	3.1203E+2
11	6.7379E+4	23	0
12	4.0868E+4		

**Tab. 4.4** Energiegrenzen der 23-Gruppen-Struktur.

Für die Brennelemente, die nicht an den Reflektor grenzen, wurden zweidimensionale Modelle im unendlichen Gitter mit reflektierenden Randbedingungen erstellt. Ein Beispiel hierfür ist in Abb. 4.11 links zu sehen, welche neben dem Stabgitter auch den hexagonalen Brennelementkasten (Wrapper) und den halben Kühlmittelspalt zu den sechs Nachbarelementen zeigt. Je nach axialer Brennstoffzusammensetzung wurden mit entsprechenden Varianten dieses Modells für jede axiale Zone individuelle Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten mit HELIOS erzeugt.

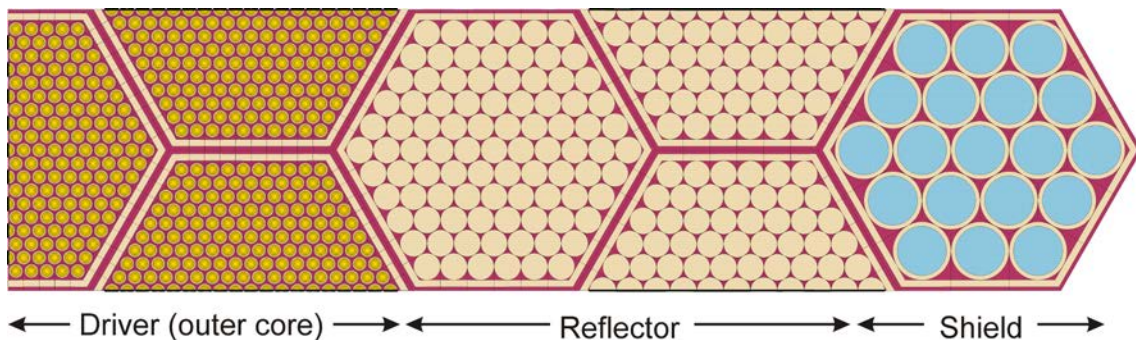
Da Steuer- und Reflektorelemente, die Elemente des radialen Schilds sowie unterer Reflektor und oberes Gasplenum keine spaltbaren Materialien enthalten, muss eine Neutronenquelle mit dem dort jeweils herrschenden Energiespektrum bereitgestellt werden. Dies kann am einfachsten geschehen, indem an die sechs Seitenflächen benachbarte Brennelemente angeschlossen werden /FRI13/, wie in Abb. 4.11 rechts für ein Steuerelement gezeigt ist. Superzellmodelle dieser Art enthalten sechs halbierte Brennelemente der lokalen Umgebung, so dass eine periodische Fortsetzung im unendlichen Gitter möglich wird. Das Homogenisierungsvolumen ist der Bereich des zentralen Steuerelement-Hexagons einschließlich des halben, mit Kühlmittel gefüllten

Spalts zu den Nachbarelementen. Die Geometrie der Steuerelemente wurde im Detail nachgebildet, also keine Materialhomogenisierung durchgeführt.



**Abb. 4.11** HELIOS-Modelle eines Driver-Elements (links) und eines Steuer-Elements (rechts).

Das radiale Reflektormodell besteht aus drei Zonen, die radialen Schild, radialen Reflektor und den Rand der äußeren radialen Kernzone enthalten. Es ist in Abb. 4.12 gezeigt und entspricht dem in Abb. 4.10 mit einem Rechteck markierten Ausschnitt des radialen Reflektors. In diesem Superzellmodell gelten reflektierende Randbedingungen an allen Seiten außer dem rechten Rand, der an Vakuum grenzt. Mit diesem Modell wurden in HELIOS Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für radialen Reflektor und radialen Schild generiert, wobei die unterschiedlichen axialen Brennstoffzusammensetzungen der äußeren Kernzone berücksichtigt wurden.



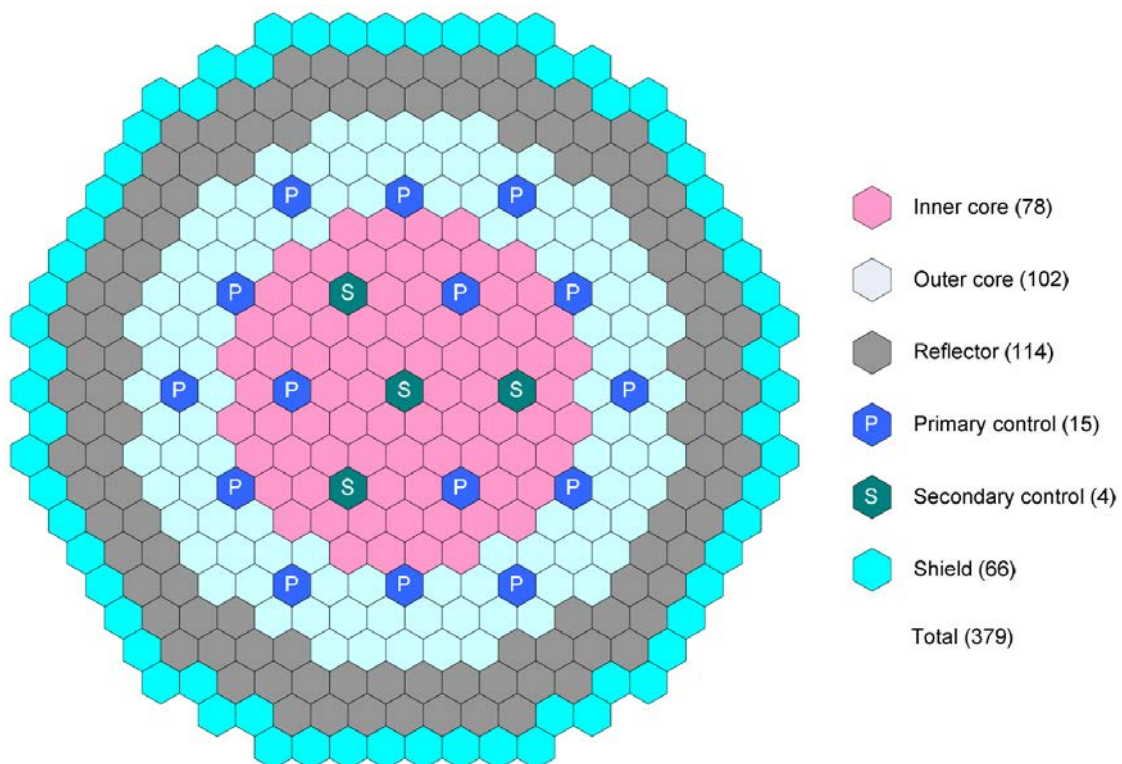
**Abb. 4.12** HELIOS-Modell für den radialen Reflektor mit drei verschiedenen Homogenisierungsgebieten.

#### 4.3.2 Medium Size Metallic Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions

Anhand des Medium-Size-Metallic-Kerns der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions wurden im vorliegenden Vorhaben folgende Ziele verfolgt:

- Modellierung eines natriumgekühlten schnellen Systems mit dem Monte-Carlo Code SERPENT 2.18
- Vergleich der Erzeugung der Wirkungsquerschnitte zwischen HELIOS und SERPENT, insbesondere des Einflusses der Gruppenstruktur.
- Deterministische Kernberechnungen und Vergleich mit Monte Carlo.

Die Kernanordnung ist in Abb. 4.13 gezeigt und besteht aus 180 Brennelementen, 114 radialen Reflektorelementen, 66 Elementen des radialen Schields und 19 Steuerelementen. Der Kern ist radial in zwei Zonen, eine Innenzone mit 78 Brennelementen und eine Außenzone mit 102 Brennelementen, geteilt.



**Abb. 4.13** Radiale Kernanordnung des Medium-Size-Metallic-Kerns.

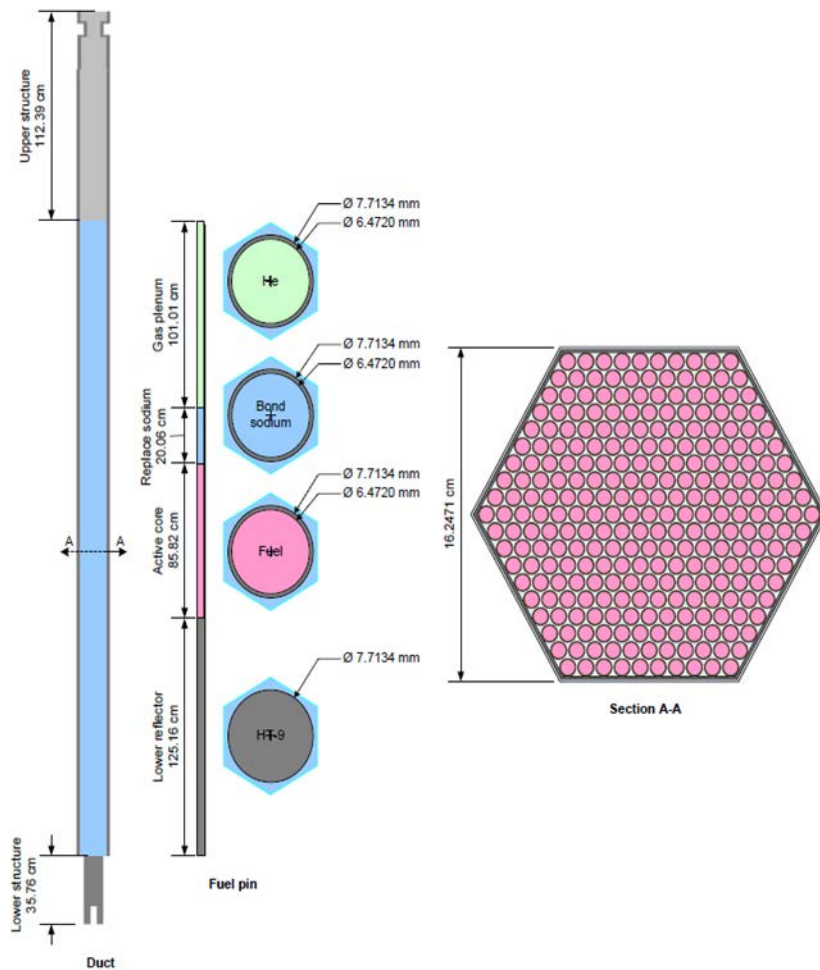
Die thermische Leistung ist mit 1000 MW angegeben, die Kühlmittel ein- bzw. -austrittstemperatur mit 355 °C bzw. 510 °C, die mittlere Brennstofftemperatur mit 534 °C und mittlere Temperatur von Kühlmittel und Strukturmaterialien 432,5 °C. Als



Brennstoff dient MOX, dessen Zusammensetzung für den zu betrachtenden Zyklusbeginn in Tab. 4.5 für die beiden radialen Kernzonen angegeben ist. Die geometrische Struktur der Brennelemente ist in Abb. 4.14 gezeigt; sie ist in Innen- und Außenzone identisch. Die aktive Zone hat jeweils 5 axiale Abschnitte mit verschiedenen Brennstoffzusammensetzungen.

<b>Isotop</b>	<b>Innenkern</b>	<b>Außenkern</b>
U	81.5%	75.4%
U-235	0.1%	0.1%
Pu	17.0%	22.2%
Pu-239	9.1%	11.5%
Pu-240	5.4%	7.2%
MA	1.5%	2.3%
TRU	18.5%	24.6%
Fissile	10.2%	13.3%

**Tab. 4.5** Nuklidzusammensetzung des Brennstoffs in Kern-Innen- und Außenzone.



**Abb. 4.14** Abmessungen und axiale Zonen von Brennelement und Brennstab sowie hexagonales Stabgitter im Brennelementkasten.

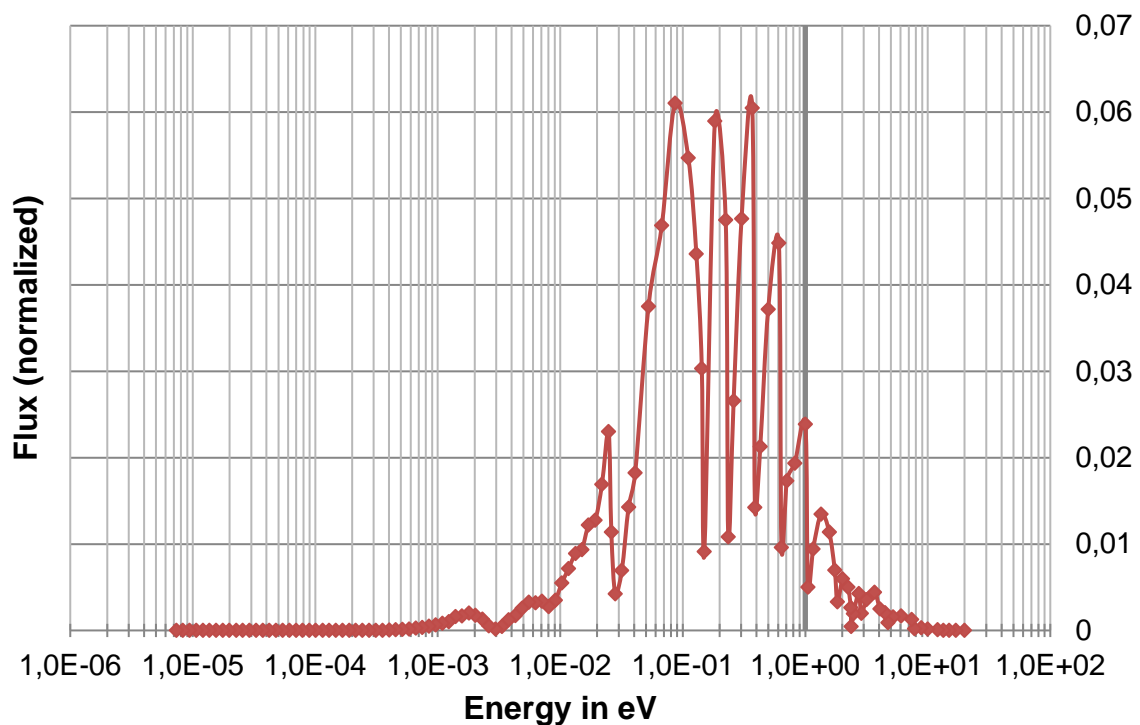
Zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für deterministische 3D-Kernberechnungen wurden in Analogie zum Medium-Size-Oxide-Kern (siehe Kapitel 4.3.1) wurden für jeden Brennelementtyp (und jede axiale Zone darin) mit dem Monte-Carlo-Code SERPENT und HELIOS zweidimensionale Modelle im unendlichen Gitter sowie Superzellmodelle für die übrigen Kernelemente erstellt. Der Vorteil von SERPENT gegenüber HELIOS liegt einerseits im Referenzcharakter der Monte-Carlo-Methode in Verbindung mit nuklearen Punktdaten und andererseits in der Austauschbarkeit der nuklearen Datenbibliothek. So ist es mit SERPENT möglich, den Einfluss verschiedener nuklearer Punktdatenbibliothekerevaluationen (hier JEFF-3.1 und ENDF/B-VII) zu untersuchen. Um den Einfluss der Energiegruppenstruktur auf die deterministischen 3D-Kernberechnungen quantifizieren zu können, wurden Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten in verschiedenen Gruppenstrukturen erzeugt, die in Tab. 4.6 zusammengefasst sind. Die 33-Gruppen-Struktur entspricht der im Modul

ECCO von ERANOS /RUG06/ angewandten Struktur, die 8-Gruppen-Struktur basiert auf Referenz /WAL12/, und die 7- und 11-Gruppen-Strukturen sind jeweils von der 8-Gruppen-Struktur abgeleitet.

33 Gruppen	11 Gruppen	8 Gruppen	7 Gruppen
1.00E+07			
6.07E+06	6.07E+06		
3.68E+06			
2.23E+06	2.23E+06	2.23E+06	2.23E+06
1.35E+06			
8.21E+05	8.21E+05	8.21E+05	8.21E+05
4.98E+05			
3.02E+05	3.02E+05	3.02E+05	3.02E+05
1.83E+05			
1.11E+05	1.11E+05	1.11E+05	1.11E+05
6.74E+04			
4.09E+04	4.09E+04	4.09E+04	
2.48E+04			
1.50E+04	1.50E+04	1.50E+04	1.50E+04
9.12E+03			
5.53E+03	5.53E+03		
3.35E+03			
2.03E+03	2.03E+03		
1.23E+03			
7.49E+02	7.49E+02	7.49E+02	7.49E+02
4.54E+02			
3.12E+02			
2.75E+02			
1.47E+02			
8.94E+01			
6.96E+01			
4.22E+01			
2.26E+01			
1.37E+01			
8.32E+00			
3.93E+00			
5.30E-01			
1.12E-01			
1.00E-04	1.00E-04	1.00E-04	1.00E-04

**Tab. 4.6** Für die Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten verwendete Gruppenstrukturen (untere Energiegrenzen in eV).

Für die SERPENT-Rechnungen wurden insgesamt 1000 Zyklen mit je 100 000 Neutronenschicksalen je Zyklus simuliert, wobei die Resultate der ersten 100 Zyklen verworfen wurden (inaktive Zyklen). Dabei zeigte sich, dass im unteren Energiebereich die Neutronenpopulation sehr niedrig und infolgedessen die statistischen Unsicherheiten relativ hoch sind, so dass die 33-Gruppenstruktur nur bedingt geeignet ist. Dies ist beispielhaft anhand des Neutronenspektrums für das Brennelement der inneren Kernzone in Abb. 4.15 gezeigt.



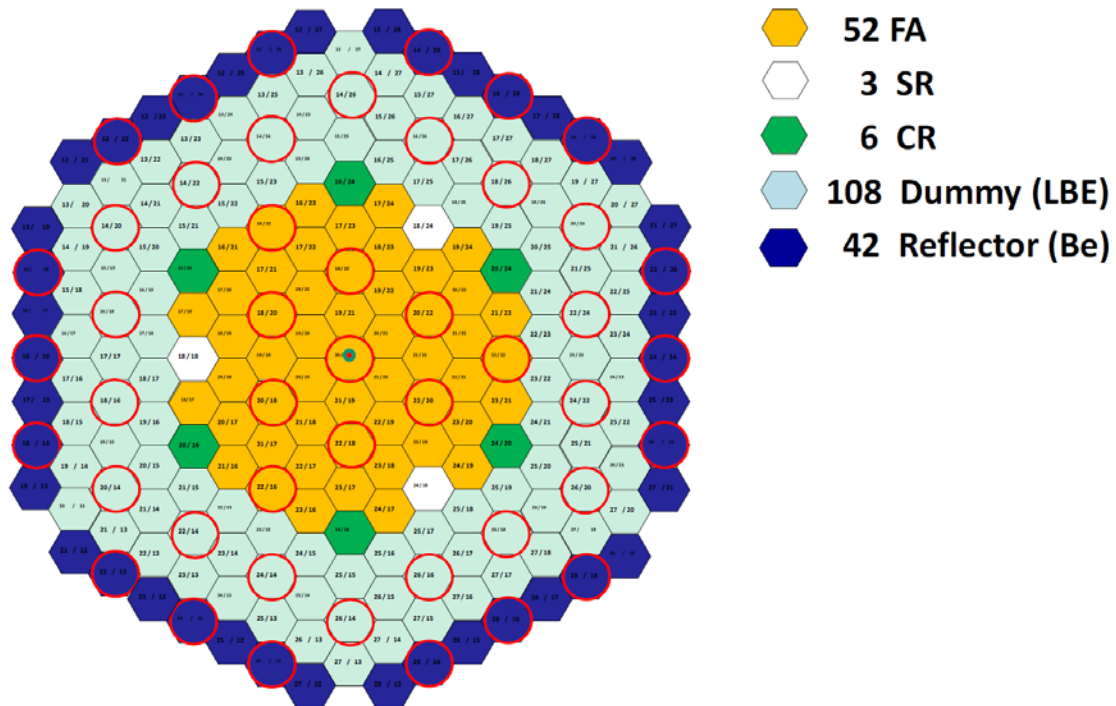
**Abb. 4.15** Mit SERPENT berechnetes Neutronenspektrum für das Brennelement der inneren Kernzone.

Im Ergebnis wurden für den Medium-Size-Metallic-Kern Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten mit SERPENT unter Verwendung der ENDF/B-VII-Punktdatenbibliothek in 7, 8 und 11 Energiegruppen und mit HELIOS in 7, 8 und 33 Energiegruppen generiert, wobei man bei HELIOS-1.12 auf die mitgelieferte ENDF/B-VI-basierte nukleare Datenbibliothek festgelegt ist. Der Vorteil der HELIOS-Rechnungen gegenüber SERPENT liegt in der erheblichen Rechenzeitersparnis. So benötigt SERPENT mit der oben genannten Neutronenpopulation je hexagonalem Kern-Element und je axialer Zone in den beiden Brennelementtypen eine CPU-Zeit von ca. 5 h, insgesamt ca. 180 CPU-h. Die entsprechenden HELIOS-Rechenzeiten liegen bei ca. 5-10 min.

Für die Postprozessierung der Weniggruppendaten von SERPENT wurde ein Python-Softwarewerkzeug erstellt, welches die SERPENT-Ausgabedaten interpretiert und in die Formate verschiedener 3D-Kernberechnungsprogramme (PARCS, DYN3D, FEMDiff3D) transformiert. Für HELIOS konnte auf ein bereits existierendes Fortran-Werkzeug zurückgegriffen werden.

### 4.3.3 Der Kern der geplanten Anlage MYRRHA

Bei der Anlage MYRRHA (Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications) handelt es sich um eine europäische Demonstrationsanlage für ein beschleunigergetriebenes System (Accelerator Driven System, ADS) mit schnellem Neutronenspektrum, das am belgischen Kernforschungszentrum SCK-CEN errichtet werden und voraussichtlich um 2023 den Betrieb aufnehmen soll /MUE10/. Die Flexibilität des von einer eutektischen Blei-Wismut-Legierung (Lead Bismuth Eutectic, LBE) gekühlten MYRRHA-Kerns erlaubt sowohl einen kritischen mit U-Pu-MOX-Brennstoff als auch einen unterkritischen Betrieb mit hoher Flussrate schneller Neutronen zur Demonstration der Transmutation minorer Actiniden. Im Rahmen des EU-Projekts MAXSIMA (siehe Kapitel 0) stehen Informationen zur Kernkonfiguration von MYRRHA /SAR14/ zur Verfügung, auf deren Basis reaktorphysikalische und thermohydraulische Modelle für deterministische und Monte-Carlo-Kernberechnungen entwickelt wurden. In diesem Kapitel wird die Erstellung und Überprüfung von Modellen für die Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für 3D-Kernberechnungen des Minimum-critical-Kerns von MYRRHA dokumentiert. Die Entwicklung eines thermohydraulischen Modells mit ATHLET ist in Kapitel 6.4 beschrieben, und die Durchführung gekoppelter transienter 3D-Kernberechnungen mit PARCS/ATHLET ist Gegenstand von Kapitel 4.4.3.



**Abb. 4.16** Radiale Kernanordnung des Minimum-critical-Kerns /SAR14/.

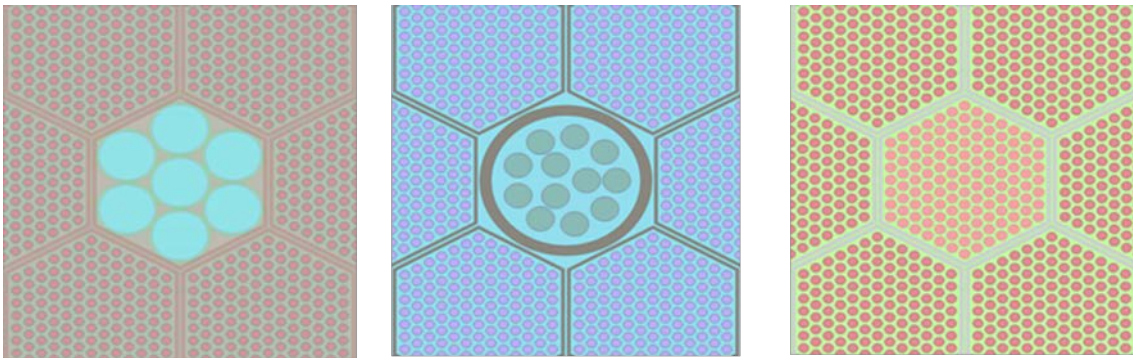
Die radiale Konfiguration des Minimum-critical-Kerns von MYRRHA ist in Abb. 4-16 gezeigt. Der Kern mit einer thermischen Leistung von 80 MW umfasst 52 Brennelemente, 6 Steuerelemente, 3 Abschalt-Elemente (Safety-Rods), 108 Dummy-Elemente (im Wesentlichen vom Kühlmittel durchströmte hexagonale Brennelementkästen) und 42 Reflektorelemente. Für diese Kernkonfiguration wurden folgende vier Zustände betrachtet und entsprechende Modelle zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten erstellt:

- sämtliche Steuerelemente und Abschaltetelemente ausgefahren (CRin/SRin),
- sämtliche Steuerelemente und Abschaltetelemente eingefahren (CRout/SRout),
- sämtliche Steuerelemente eingefahren und alle Abschaltetelemente ausgefahren (CRin/SRout),
- sämtliche Steuerelemente ausgefahren und alle Abschaltetelemente eingefahren (CRout/SRin).

Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten werden nach zwei verschiedenen Methoden, die nachfolgend beschrieben sind, berechnet. Für die Energiediskretisierung wurde die in Kapitel 4.3.2 beschriebene 8-Gruppen-Struktur (siehe Tab. 4.6) verwendet. Alle Berechnungen wurden mit SERPENT-2.1.23 durchgeführt.

#### 4.3.3.1 Methode 1

Methode 1 entspricht dem Standardverfahren, nach der in einem 2D-Spektralmodell ein einzelnes Brennelement im unendlichen Gitter dargestellt wird. Alle übrigen Elemente (Steuer- und Abschaltelemente sowie Reflektor- und Dummyelemente) werden in Form von Superzell-Modellen unter Einbeziehung benachbarter Brennelemente (vgl. Kapitel 4.3.1) behandelt. Abb. 4.17 drei Beispiele für derartige Superzellmodelle, wobei stets über das zentrale hexagonale Element inklusive Kasten (Wrapper) und halbem Kühlmittelspalt zum Nachbarelement homogenisiert wird.



**Abb. 4.17** 2D-Superzell-Spektralmodelle in SERPENT für radialen Reflektor, Abschaltelement und unteren Reflektor (v.l.n.r.) von MYRRHA.

Die SERPENT-Rechnungen basieren auf 1000 Zyklen mit je 100 000 Neutronenschicksalen je Zyklus, wobei die ersten 100 Zyklen verworfen wurden. Damit benötigt ein einzelnes Modell zur Wirkungsquerschnittserzeugung ca. 10 CPU-Stunden, der gesamte Rechenaufwand summierte sich auf ca. 310 CPU-Stunden.

Für gekoppelte neutronenkinetisch-thermohydraulische 3D-Kern- und Transientenberechnungen mit PARCS/ATHLET (siehe Kapitel 4.4.3) wurden mit SERPENT zusätzlich parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken einschließlich Neutronengeschwindigkeiten in ebenfalls 8 Energiegruppen und die in Tab. 4.7 angegebenen Parameter und deren Stützstellen erstellt. Die Daten verzögerter Neutronen ( $\beta_i, \lambda_i$ ) wurden in 7 Zeitgruppen bereitgestellt.

Parameter	1	2	3	4
Brennstofftemperatur (°C)	20	200	1150	2500
Kühlmitteltemperatur (°C)	20	200	700	

**Tab. 4.7** Parameter und Stützstellen für die Erstellung der parametrisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek.

#### 4.3.3.2 Methode 2

Methode 2 basiert auf dem 3D-Ganzkernmodell der Konfiguration CRout/SRout in SERPENT und der damit berechneten 3D-Neutronenflussverteilung, wobei über räumliche Ausschnitte, die den einzelnen (Brenn-)Elementen entsprechen, homogenisiert wird. Ein typischer räumlicher Ausschnitt hat die Form eines hexagonalen Prismas, dessen Höhe sich über eine axiale Zone erstreckt, innerhalb derer sich Geometrie und Nuklidzusammensetzung nicht ändert. Jeder solche räumliche Ausschnitt wird in SERPENT als ein Universum definiert, in dem dann der Homogenisierungs- und Gruppenkondensationsprozess stattfindet. Der Vorteil dieser Methode gegenüber Methode 1 liegt darin, dass die tatsächliche 3D-Neutronenflussverteilung in den Homogenisierungs- und Kondensationsprozess eingeht und somit Einflüsse der lokalen Umgebung (z. B. Flussgradienten, Neutronenspektrum) direkt berücksichtigt werden können.

Das SERPENT-Ganzkernmodell ist im Detail in Kapitel 4.4.3 beschrieben. Es dient nicht nur der Wirkungsquerschnittserzeugung, sondern auch als Referenz für die ebenfalls in Kapitel 4.4.3 beschriebenen deterministischen 3D-Kernberechnungen. Im Ergebnis liefert Methode 2 einen Satz von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, der formal dem der Methode 1 entspricht.

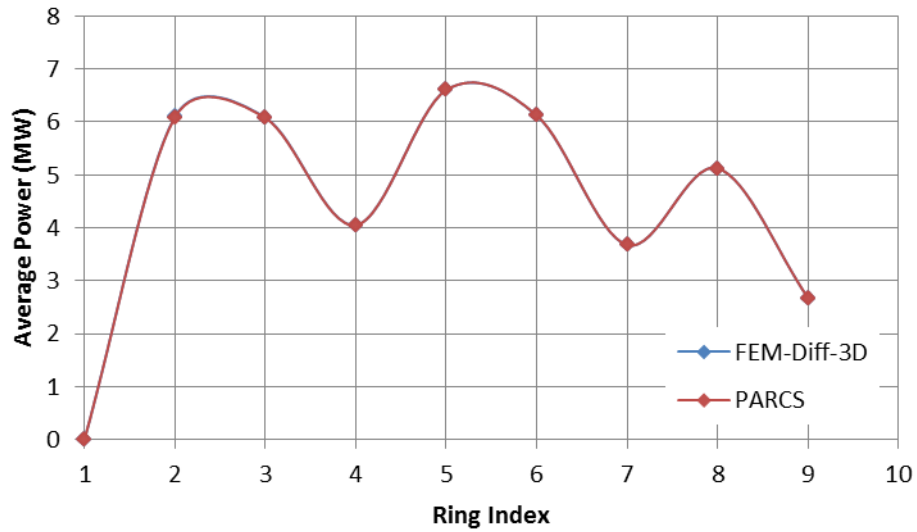


#### 4.4 AP 2.4 und 2.5: Erstellung von Kernmodellen kritischer und unterkritischer Systeme und Berechnung ausgewählter stationärer und transienter Probleme

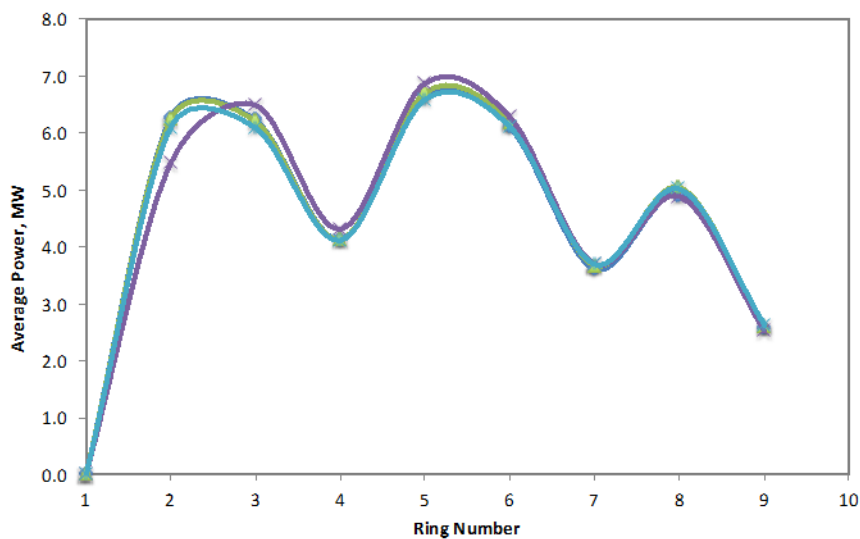
##### 4.4.1 Medium Size Oxide Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions

Für den von der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core spezifizierten Medium-Size-Oxide-Kern wurde in PARCS ein deterministisches 3D-Kernmodell entwickelt /SEU14a/. Dabei kam die Mehrgruppen-TPEN-Methode (Triangular Polynomial Expansion Nodal) zum Einsatz, die die Diffusionsgleichung für hexagonale Brennelementgitter in mehreren Energiegruppen löst. Da PARCS vorwiegend für leichtwassermoderierte Systeme in zwei Energiegruppen (thermisches Spektrum) eingesetzt wird, liegt weniger umfangreiche Erfahrung für schnelle Systeme in mehreren Energiegruppen vor, so dass hier zu Vergleichszwecken ein entsprechendes 3D-Kernmodell für das Finite-Elemente-Diffusionsprogramm FEMDiff3D entwickelt wurde, welches dieselbe Wirkungsquerschnittsbibliothek in 23 Energiegruppen (siehe Kapitel 4.3.1) benutzt.

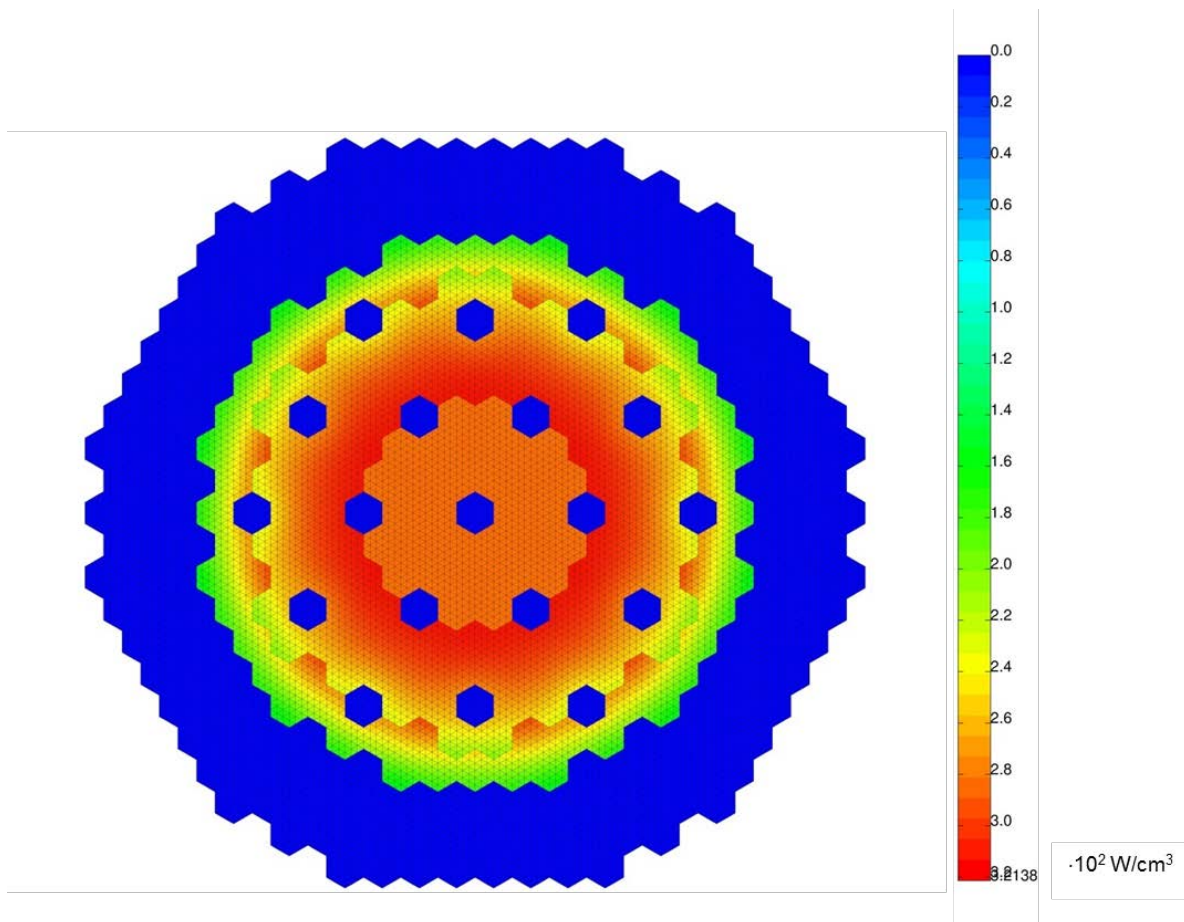
Die 3D-Kernberechnung mit PARCS liefert den Multiplikationsfaktor  $k_{eff} = 1,04172$  für die mit HELIOS und der 190-Gruppenbibliothek berechneten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten und  $k_{eff} = 1,04168$  für die HELIOS-Rechnung mit der 112-Gruppenbibliothek. Der mit FEMDiff3D und den Wirkungsquerschnitten auf Basis der 190-Gruppen-HELIOS-Bibliothek berechnete Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 1,03961$  liegt näher an den in /KIM12/ veröffentlichten Ergebnissen, die allerdings eine weite Streuung von 1,01869 bis 1,03993 aufweisen. Die mit PARCS erhaltene, axial integrierte radiale Leistungsverteilung über konzentrische Ringe ist in Abb. 4-18 rot dargestellt und unterscheidet sich von den entsprechenden FEMDiff3D-Ergebnissen nur unwesentlich (maximale relative Abweichung 0,23 %). Wie durch Vergleich mit Abb. 4-19 zu sehen ist, ist das HELIOS-PARCS-Ergebnis in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen anderer Rechencodes innerhalb dieses Benchmarks. Abb. 4.20 zeigt die mit FEMDiff3D berechnete radiale Leistungsdichteverteilung in der axialen Mittelebene der aktiven Kernzone. Dabei wurde jedes der 6 ein Hexagon bildendes Dreiecksprisma in weitere 9 gleich große Dreiecksprismen zerlegt, so dass jedes hexagonale Element durch 54 Dreiecksprismen dargestellt wird und somit lokale Leistungsdichtegradienten in radialer Richtung entsprechend aufgelöst werden können.



**Abb. 4.18** Mit PARCS berechnete ringweise radiale Leistungsverteilung für den Medium-Size-Oxide-Kern (rot) im Vergleich mit der FEM-Lösung (blau).



**Abb. 4.19** Ergebnisse anderer Rechencodes für die ringweise radiale Leistungsverteilung des Medium-Size-Oxide-Kerns /KIM12/.



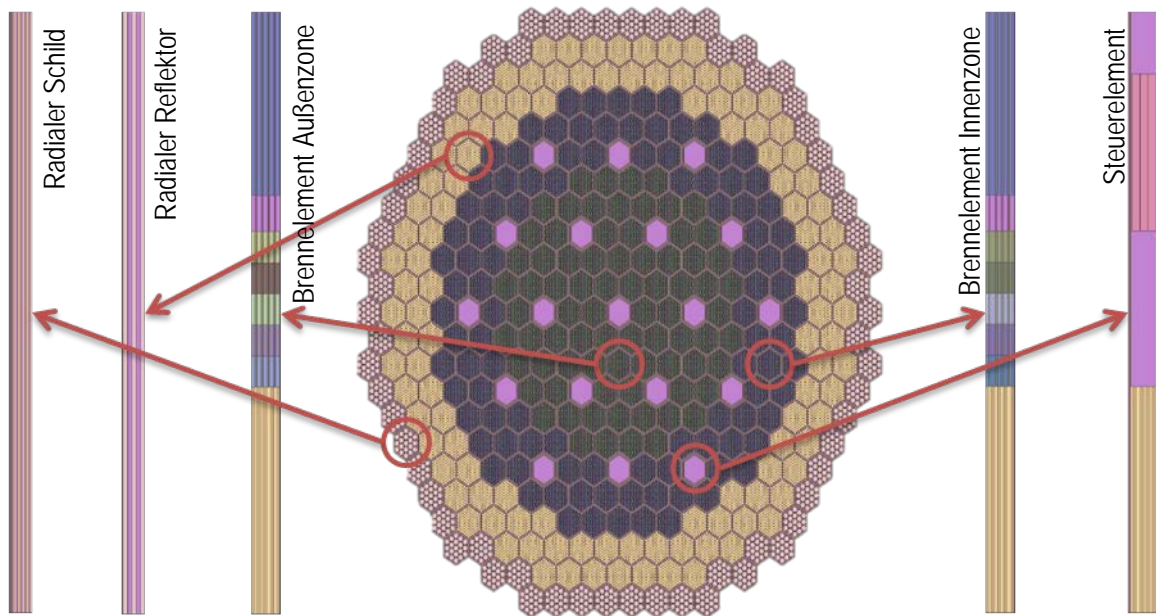
**Abb. 4.20** Radiale Leistungsdichteverteilung des Medium-Oxide-Kerns in der axialen Mittelebene der aktiven Kernzone aus der FEMDiff3D-Rechnung mit 54 Prismen je hexagonalen Node.

#### 4.4.2 Medium Size Metallic Core der OECD/NEA-Taskforce on Sodium Fast Reactor Core Definitions

##### 4.4.2.1 Ganzkern-Modell für den Monte-Carlo-Code SERPENT

Für den Monte-Carlo-Code SERPENT-2.1.18 wurde ein detailliertes 3D-Ganzkernmodell des Medium-Size-Metallic-Kerns entwickelt. Die von SERPENT generierte graphische Darstellung ist in Abb. 4.21 gezeigt und enthält neben der radialen Kernanordnung auch die axialen Schnitte der 5 verschiedenen (Brenn-)Elementtypen, aus denen der Kern zusammengesetzt ist. Für die Monte-Carlo-Simulation wurden insgesamt 1500 Zyklen mit je 100 000 Neutronenschicksalen je Zyklus simuliert, wobei die Resultate der ersten 200 Zyklen verworfen wurden (inaktive Zyklen). Die Rechnung, die ca. 25 CPU-h beansprucht, wurde sowohl mit ENDF/B-VII- als auch mit

JEFF-3.1-Punktdaten durchgeführt; die statistische Unsicherheit im Multiplikationsfaktor liegt bei  $\pm 10$  pcm.



**Abb. 4.21** SERPENT-Ganzkernmodell des Medium-Size-Oxide-Kerns. Mitte: radiale Kernanordnung, Rand: axiale Schnitte der 5 Elementtypen.

	ENDF/B-VII.0	JEFF-3.1
SERPENT	1.03124	1.04030
Mittelwert der Benchmarkteilnehmer	1.02331	1.03597
Standardabweichung der Benchmarkteilnehmer (pcm)	256	400

Tab. 4.8: Multiplikationsfaktoren der SERPENT-Ganzkernrechnungen mittels ENDF/B-VII.0 bzw. JEFF-3.1 und im Vergleich mit den jeweiligen Mittelwerten der Benchmarkteilnehmer und der zugehörigen Standardabweichung.

Die Multiplikationsfaktoren der SERPENT-Ganzkernrechnungen sind in Tab. 4.8 zusammen mit den Mittelwerten der Benchmarkteilnehmer und den zugehörigen Standardabweichung angegeben. Es fällt auf, dass allein die nukleare Datenbibliothek einen Unterschied von ca. 900 pcm im Multiplikationsfaktor bewirkt. Ein vergleichbarer Befund ist auch an den Mittelwerten der Multiplikationsfaktoren der Benchmarkteilnehmer zu erkennen. Die Streuung der Multiplikationsfaktoren der Benchmarkteilnehmer

ist, wie die Standardabweichung erkennen lässt, jedoch mit 256 pcm bzw. 400 pcm für ENDF/B-VII- bzw. JEFF-3.1-Daten recht groß.

#### 4.4.2.2 Deterministische 3D-Kernberechnungen

Mit den in Kapitel 4.3.2 generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten wurden deterministische Kernberechnungen mit PARCS durchgeführt. Die Zielsetzung lag dabei einerseits in der Suche nach einer möglichst kompakten Gruppenstruktur, die den Rechenaufwand bei 3D-Transientenanalysen begrenzt und gleichzeitig möglichst nahe an der Monte-Carlo-Referenzlösung liegt, und andererseits im Vergleich von HELIOS mit SERPENT und damit verbunden im Einfluss der nuklearen Basisdaten. Ergänzend zu PARCS wurden zu Verifikation entsprechende Kernberechnungen mit DYN3D durchgeführt.

##### 4.4.2.2.1 SERPENT-Wirkungsquerschnittsdaten

Tab. 4.9 zeigt die Multiplikationsfaktoren der deterministischen 3D-Kernberechnungen unter Verwendung der mit SERPENT auf Basis von ENDF/B-VII-Punktdateen generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten in verschiedenen Energiegruppenstrukturen. Die darin angegebenen Abweichungen bezeichnen die Reaktivitätsunterschiede zur SERPENT-Ganzkernrechnung (siehe Kapitel 4.4.2.1).

	7 Gruppen		8 Gruppen		11 Gruppen	
Code	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm
PARCS	1.033092	174	1.031885	61	1.031624	36
DYN3D	1.033171	181	1.031956	67	1.031694	43

**Tab. 4.9** Deterministische 3D-Kernberechnungen des Medium-Size-Metallic-Kerns mit PARCS und DYN3D mit SERPENT-Weniggruppensdaten.

Es zeigt sich, dass die Kernberechnung mit PARCS unter Verwendung der 11-Gruppen-Struktur mit einem Reaktivitätsunterschied von lediglich 36 pcm sehr nahe an der Monte-Carlo-Referenzrechnung liegt. Dies gilt auch für die 8-Gruppen-Struktur (Reaktivitätsunterschied 61 pcm). Für die 7-Gruppen-Struktur jedoch liefert einen Reaktivitätsunterschied zur SERPENT-Rechnung, der gegenüber der 11-Gruppen-Lösung

knapp fünfmal und zur 8-Gruppen-Lösung annähernd dreimal größer ausfällt. Die 8-Gruppen-Struktur ist für deterministische Kernberechnungen grundsätzlich geeignet. Dies wird durch zusätzliche Vergleichsrechnungen mit DYN3D bestätigt, deren Multiplikationsfaktoren nur unwesentlich von denen von PARCS differieren.

#### 4.4.2.2.2 HELIOS-Wirkungsquerschnittsdaten

Die Multiplikationsfaktoren der deterministischen 3D-Kernberechnungen unter Verwendung der mit HELIOS generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten sind in Tab. 4.10 dokumentiert. Wiederum unterscheiden sich die Ergebnisse von PARCS nur unwesentlich von den DYN3D-Vergleichsrechnungen, jedoch liefern die HELIOS-Weniggruppensdaten systematisch zu hohe Multiplikationsfaktoren. Als Ursache werden die auf ENDF/B-VI basierten nuklearen Datenbibliotheken von HELIOS-1.12 vermutet, wie gesonderte Vergleichsstudien (siehe Kapitel 4.4.2.2.3) nahelegen.

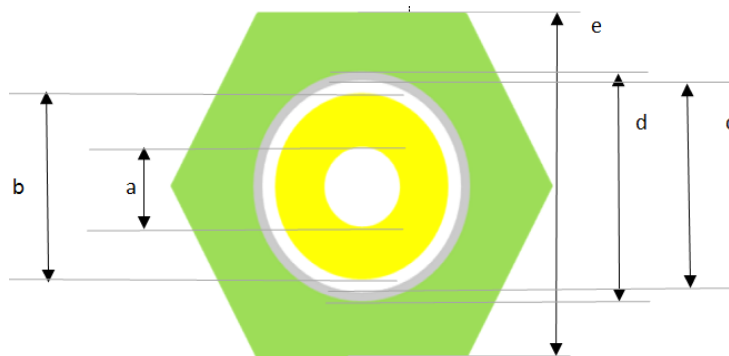
	7 Gruppen		8 Gruppen		33 Gruppen	
	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm	$k_{eff}$	Abweichung $\Delta\rho$ in pcm
PARCS	–	–	1.049017	1643	1.047017	1461
DYN3D	1.050370	1766	1.049187	1659	1.047117	1470

**Tab. 4.10** Deterministische 3D-Kernberechnungen des Medium-Size-Metallic-Kerns mit PARCS und DYN3D mit HELIOS-Weniggruppensdaten.

Ein Sonderfall ist die PARCS-Rechnung mit 7 Energiegruppen, bei der das numerische Lösungsverfahren aus TPEN-Solver und nodaler CMFD-Beschleunigung nicht konvergiert hat. Eine mögliche Ursache könnte darin liegen, dass zur Konditionierung des Mehrgruppen-Lösungsverfahrens von PARCS parallel stets eine 2-Gruppen-Lösung durchgeführt wird (PARCS ist ursprünglich für thermische Systeme entwickelt, die i.d.R. durch eine 2-Gruppen-Struktur beschrieben werden), die bei schnellen Systemen aufgrund des niedrigen Neutronenflusses im thermischen Energiebereich (Gruppe 2) zu numerischen Problemen führt. Es wurde diesbezüglich Kontakt mit den Entwicklern von PARCS aufgenommen.

#### 4.4.2.2.3 Vergleichsstudie HELIOS-1.12 mit SERPENT

Zur Beurteilung der HELIOS-1.12-Rechnungen wurde eine Vergleichsstudie mit SERPENT unter Verwendung von nuklearen Punktdaten der ENDF/B-VII.0- bzw. ENDF/B-VI.8-Bibliothek durchgeführt. Als Modellsystem dient eine einzelne Stabzelle im unendlich-periodischen Gitter, siehe Abb. 4.22. Die geometrischen Parameter und die Materialzusammensetzung sind in Tab. 4.11 angegeben und entsprechen den Spezifikationen von ASTRID aus dem EU-Projekt ESNII+, siehe Kapitel 9.1.



**Abb. 4.22** Stabzelle für die Vergleichsstudie von HELIOS-1.12 mit SERPENT. Grün: Kühlmittel (Natrium), gelb: Brennstoff, grau: Hüllrohr, weiß: leer.

Geometry (cm)	Fissile inner zone	Fissile outer zone
Inner hole diameter a	0,2229	0,2229
Outer pellet diameter b	0,8561	0,8561
Cladding inner diameter c	0,8766	0,8766
Cladding outer diameter d	0,9774	0,9774
Lattice pitch e	1,088	1,088
Material Composition	Fissile inner zone	Fissile outer zone
Fuel material	MOX-IZ	MOX-OZ
Hole and gas gap material	He	He
Cladding material	AIM1CLAD	AIM1CLAD
Coolant	Sodium	Sodium

**Tab. 4.11** Geometrie und Materialzusammensetzung der Stabzelle.

Für Brennstoff der Kerninnen- bzw. -außenzone wurden mit HELIOS-1.12 und SERPENT jeweils die Multiplikationsfaktoren für verschiedene Brennstofftemperaturen berechnet. Wie die Ergebnisse in Abb. 4.23 und Abb. 4.24 zeigen, liegen die mit SERPENT unter Verwendung der aktuellen ENDF/B-VII.0-Datenbibliothek berechneten

Multiplikationsfaktoren (blau dargestellt) systematisch unter den entsprechenden HELIOS-1.12-Resultaten (grün dargestellt). Wie bereits erwähnt, basieren die nuklearen Daten von HELIOS-1.12 auf der ENDF/B-VI-Bibliothek. Dies bestätigen die Wiederholungen der SERPENT-Rechnungen unter Verwendung der ENDF/B-VI.8-Bibliothek (rot dargestellt).



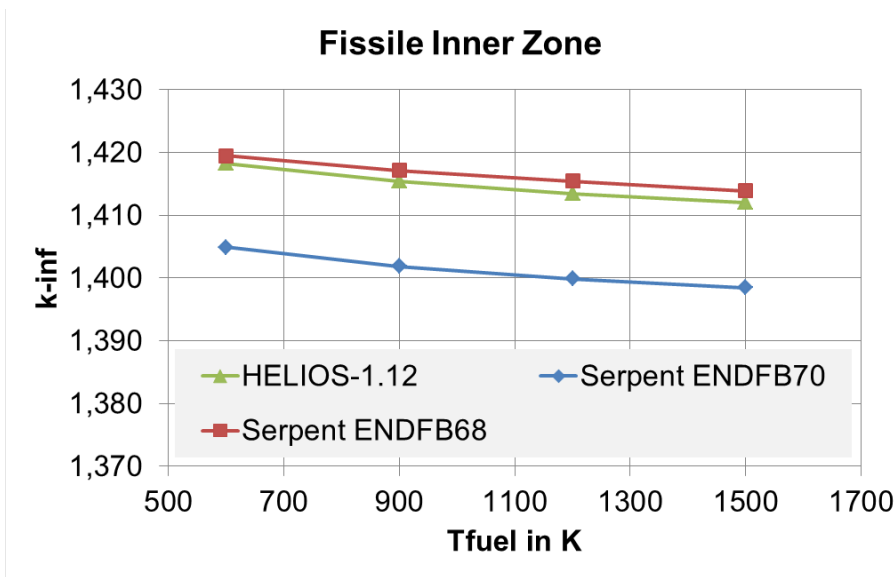


Abb. 4.23 Vergleich der Multiplikationsfaktoren für Brennstoff der Kerninnenzone.

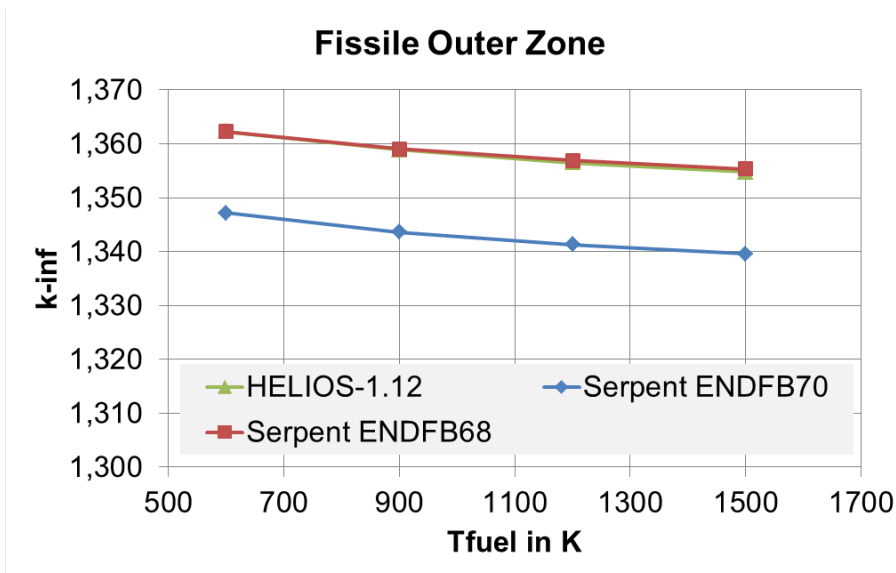


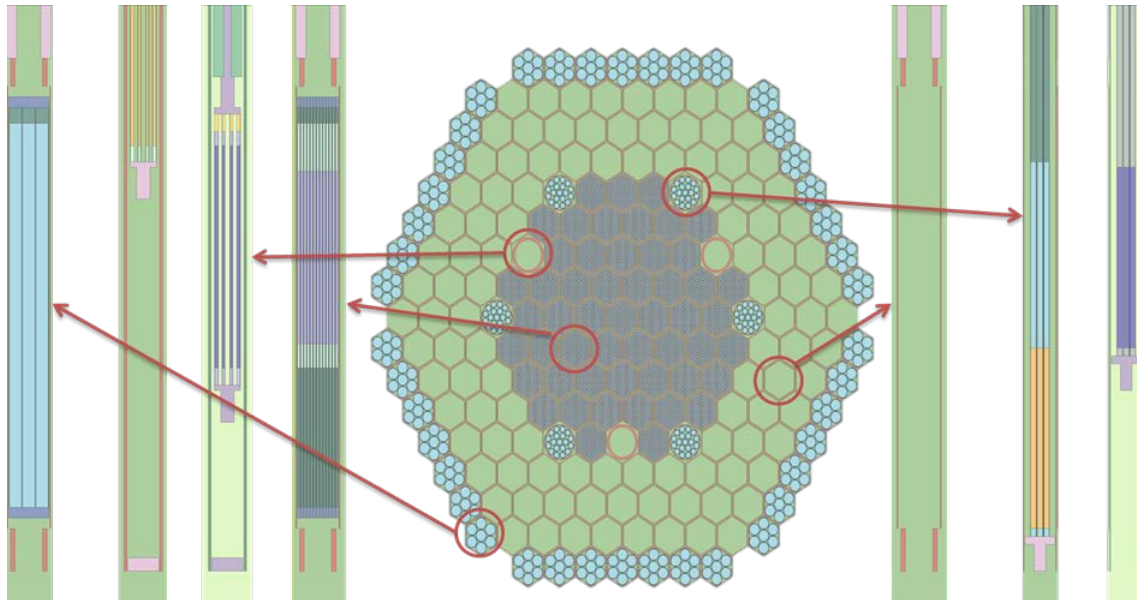
Abb. 4.24 Vergleich der Multiplikationsfaktoren für Brennstoff der Kernaußenzone.

#### 4.4.3 Stationäre 3D-Kernberechnungen zu MYRRHA

##### 4.4.3.1 Monte-Carlo-Ganzkernmodell in SERPENT

Der Minimum-critical-Kern von MYRRHA ist in Abb. 4-25 gezeigt, die auf dem in diesem Vorhaben entwickelten SERPENT-Ganzkernmodell basiert. Die darin abgebildeten axialen Schnitte der in der radialen Kernanordnung vorkommenden Bündeltypen

entsprechen (von links nach rechts) dem Reflektorbündel, dem Abschalt-Bündel im aus- und eingefahrenen Zustand, dem MOX-Brennelement, dem Dummy-Element und dem Steuerelement im aus- und eingefahrenen Zustand.



**Abb. 4.25** SERPENT-Modell der radialen Kernanordnung des Minimum-critical-Kerns (Mitte) mit axialen Schnitten der verschiedenen Elementtypen (Ränder). Näheres siehe Text.

#### 4.4.3.2 3D-Kernmodell in PARCS und stationäre Kernberechnungen

Mit den in Kapitel 4.3.3 generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten wurden zunächst deterministische 3D-Kernberechnungen mit PARCS durchgeführt. Die Zielsetzung lag dabei im Vergleich der beiden Methoden zur Weniggruppen-Wirkungsquerschnittserzeugung zur SERPENT-Ganzkernrechnung. Folgende vier verschiedene Zustände des Minimum-critical-Kerns von MYRRHA wurden berechnet:

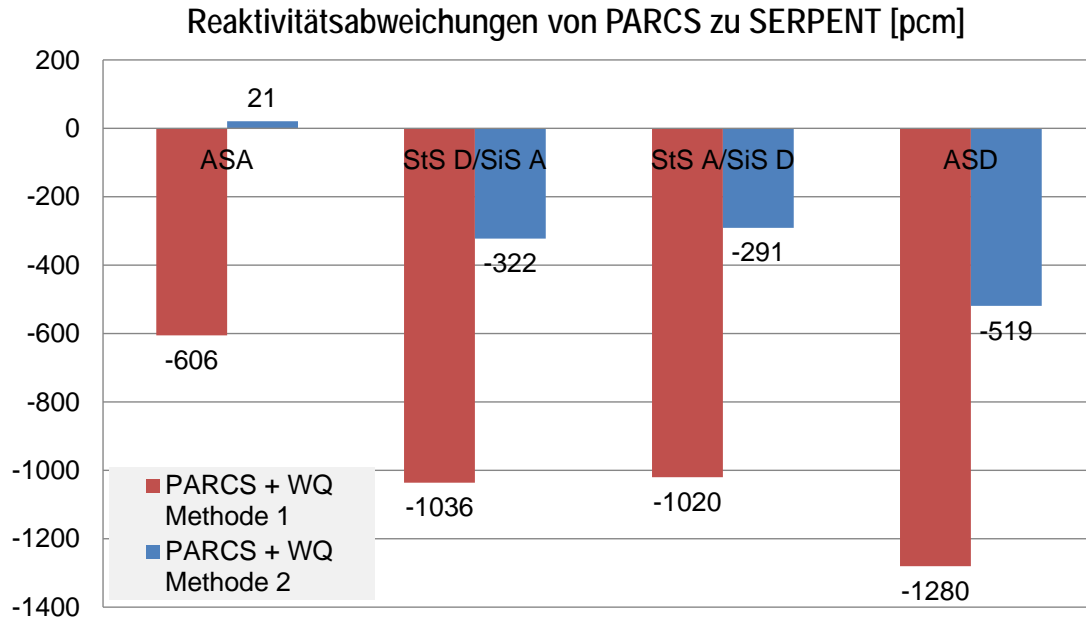
- sämtliche Steuerelemente und Abschaltetelemente ausgefahren (CRout/SRout),
- sämtliche Steuerelemente und Abschaltetelemente eingefahren (CRin/SRin),
- sämtliche Steuerelemente eingefahren und alle Abschaltetelemente ausgefahren (CRin/SRout),
- sämtliche Steuerelemente ausgefahren und alle Abschaltetelemente eingefahren (CRout/SRin).

• Code	Zustand			
	CRout/SRout	CRin/SRout	CRout/SRin	CRin/SRin
<b>Serpent</b> (Referenz) ENDF/B-VII.0	1.01070	0.94837	0.97552	0.92473
<b>PARCS</b> Methode 1	1.00455	0.93914	0.96591	0.91391
<b>PARCS</b> Methode 2	1.01091	0.94548	0.97276	0.92031

**Tab. 4.12** Multiplikationsfaktoren von SERPENT und PARCS für die vier betrachteten Zustände des Minimum-critical-MYRRHA-Kerns.

#### 4.4.3.2.1 Multiplikationsfaktoren

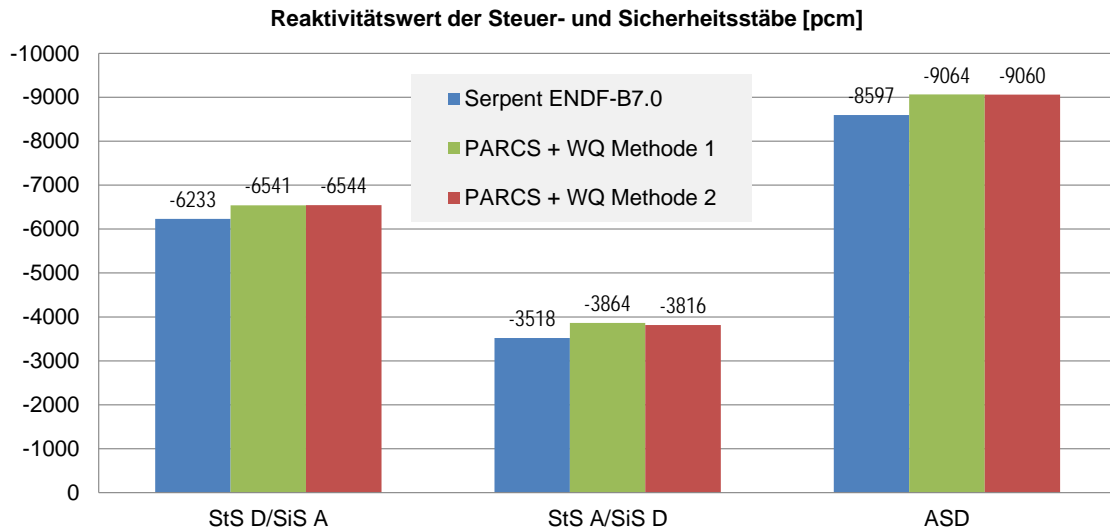
Die mit PARCS berechneten Multiplikationsfaktoren für die vier betrachteten Zustände des Minimum-critical-MYRRHA-Kerns sind zusammen mit der SERPENT-Referenzlösung in Tab. 4.12 angegeben. Offensichtlich sind die PARCS-Lösungen mit den Wirkungsquerschnitten nach Methode 2 deutlich näher an den jeweiligen SERPENT-Ergebnissen. So beträgt die Reaktivitätsdifferenz für den Zustand CRout/SRout nur 21 pcm, für die übrigen Zustände liegen die Abweichungen betragsäßig bei maximal 519 pcm. Demgegenüber liefert PARCS in Verbindung mit den Wirkungsquerschnitten nach Methode 1 wesentlich größere Abweichungen, selbst Zustand CRout/SRout übersteigt die Reaktivitätsdifferenz mit –606 pcm bereits den Unterschied, der nach Methode 2 für den Fall komplett eingefahrener Steuer- und Abschaltstäbe (CRin/SRin) ermittelt wird (–519 pcm).



**Abb. 4.26** Reaktivitätsunterschiede zwischen den beiden PARCS-Modellen und dem SERPENT-Ganzkernmodell für die verschiedenen Zustände des Minimum-critical-MYRRHA-Kerns.

#### 4.4.3.2.2 Reaktivitätswirksamkeiten der Steuer- und Abschalt Elemente

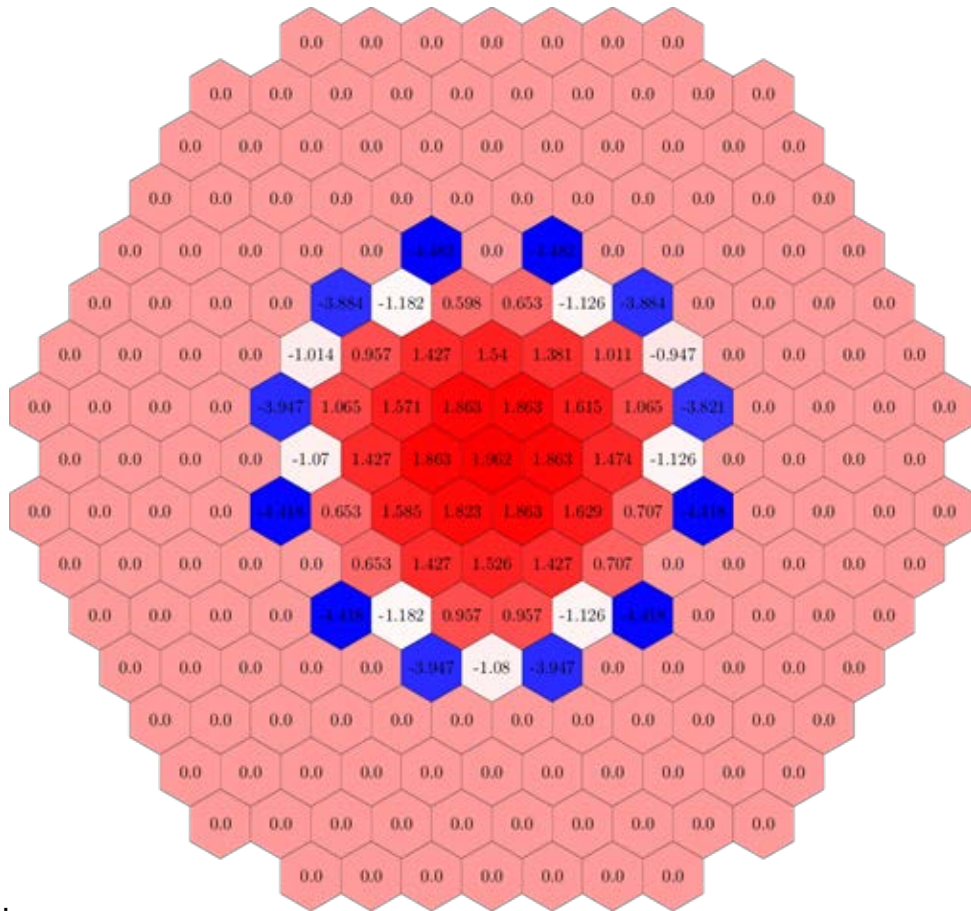
Zusätzlich wurden Reaktivitätswirksamkeiten der Steuer- und Abschalt Elemente des Minimum-critical-Kerns mit PARCS nach den beiden verschiedenen Methoden zur Wirkungsquerschnittserzeugung ermittelt und jeweils mit der entsprechenden SERPENT-Ganzkernrechnung mit ENDF/B-VII.0-Punktdateien verglichen. Die Ergebnisse sind in Abb. 4-27 graphisch dargestellt. Die Unterschiede zwischen deterministischer und Monte-Carlo-Rechnung liegen zwischen 311 pcm für CRin/SRout und 467 pcm für CRin/SRin. Wie der graphischen Darstellung zu entnehmen ist, gibt es nur unwesentliche Differenzen zwischen den beiden Methoden zur Wirkungsquerschnittserzeugung. Dies ist bereits aus Abb. 4.26 ablesbar.



**Abb. 4.27** Mit PARCS berechnete Reaktivitätswirksamkeiten der Steuer- und Abschalt Elemente nach Methode 1 und 2 im Vergleich zu den SERPENT-Ganzkern-Referenzrechnungen.

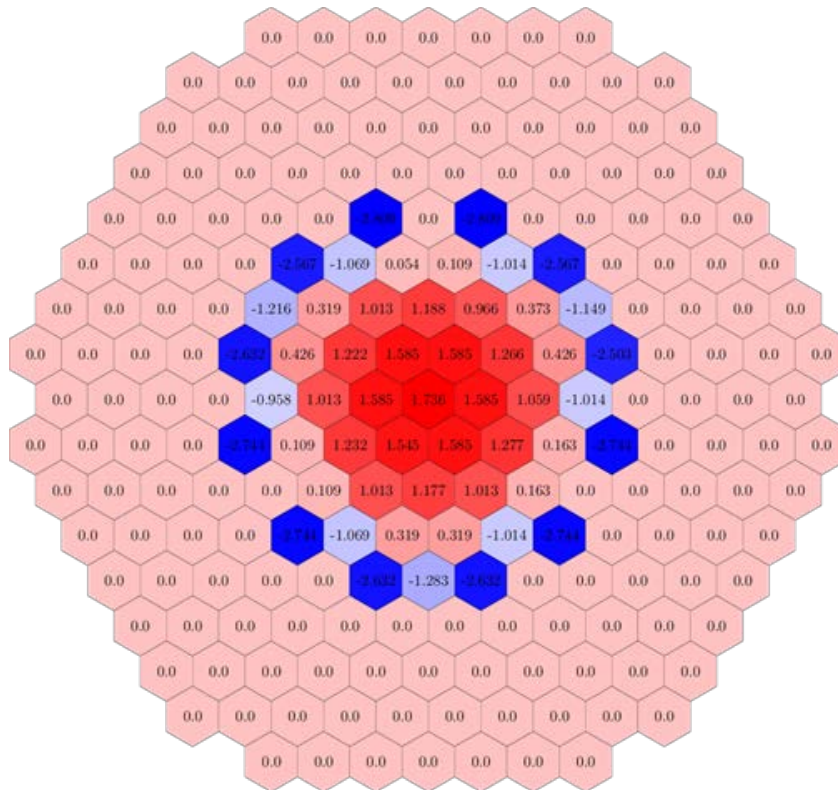
#### 4.4.3.2.3 Leistungsverteilungen

Abschließend wurden die mit PARCS berechneten Leistungsverteilungen ausgewertet und mit der SERPENT-Ganzkernrechnung verglichen. Dies wurde anhand des Zustands CRout/SRout für die beiden Methoden zur Wirkungsquerschnittserzeugung durchgeführt. Für jedes Brennelement wurde nach den beiden Methoden die Leistung berechnet und die relative Differenz zu den entsprechenden SERPENT-Leistungswerten ermittelt. Die brennelementweisen prozentualen Abweichungen der PARCS-Rechnung unter Verwendung der nach Methode 1 (2D-Spektralmodelle im unendlichen Gitter) berechneten Wirkungsquerschnitte ist in Abb. 4.28 dargestellt und liegen in Kernzentrum knapp 2 % oberhalb und am Kernrand ca. 4,5 % unterhalb der SERPENT-Lösung. Die Ursache für die größere Abweichung am Kernrand ist in erster Linie im Reflektormodell zur Wirkungsquerschnittserzeugung zu suchen, welches die lokale Umgebung eines Reflektormodells nur unzureichend berücksichtigt. Die Normierung auf die Gesamtleistung des Minimum-critical-Kerns führt dann zu einer Überbewertung der Leistung in der Kernmitte und somit zu einer leichten Verkipfung („tilt“) der radialen Leistungsverteilung.

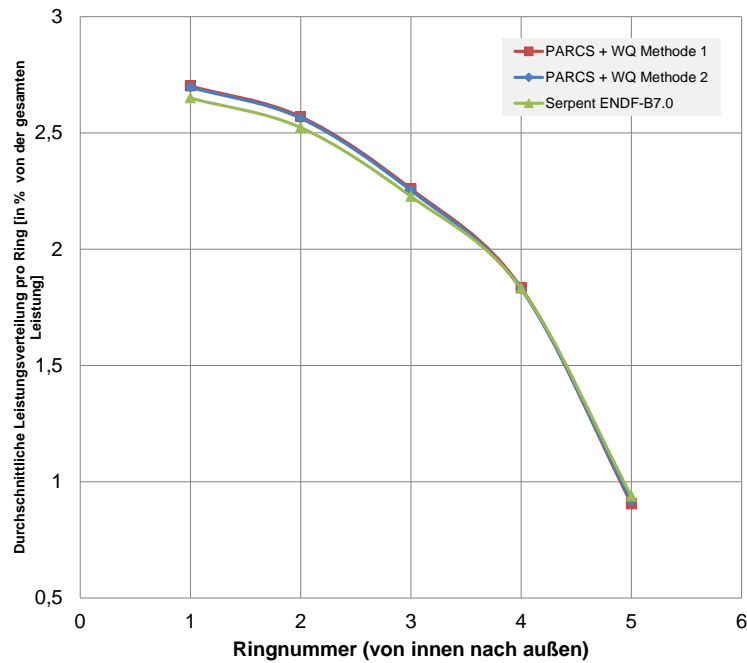


**Abb. 4.28** Prozentuale Abweichung der brennelementweisen Leistungsverteilung von der SERPENT-Referenzlösung für die PARCS-Rechnung nach Methode 1.

Die Verwendung der nach Methode 2 (Monte-Carlo-Ganzkern-Modell in SERPENT) berechneten Wirkungsquerschnitte in PARCS führt nahe des radialen Reflektors zu einer um ca. 38 % verringerten prozentualen Abweichung zwischen PARCS und SERPENT, wie die Auswertung in Abb. 4.29 zeigt. So ist der relative Unterschied zu SERPENT in Kernmitte ca. +1,7 % und am Rand zum Reflektor ca. -2,8 %. Auch für die Wirkungsquerschnitte nach Methode 2 ist eine – wenn auch gegenüber Methode 1 deutlich geringere – Verkippung der radialen Leistungsverteilung zu beobachten. Diese Effekte sind auch in Abb. 4.30 erkennbar, die die auf die Gesamtleistung bezogene ringweise Leistungsverteilung zeigt, und könnten durch den Einsatz von SPH-korrigierten Wirkungsquerschnitten bzw. Diskontnuitätsfaktoren oder eine erweiterte Gruppenstruktur weiter reduziert werden.



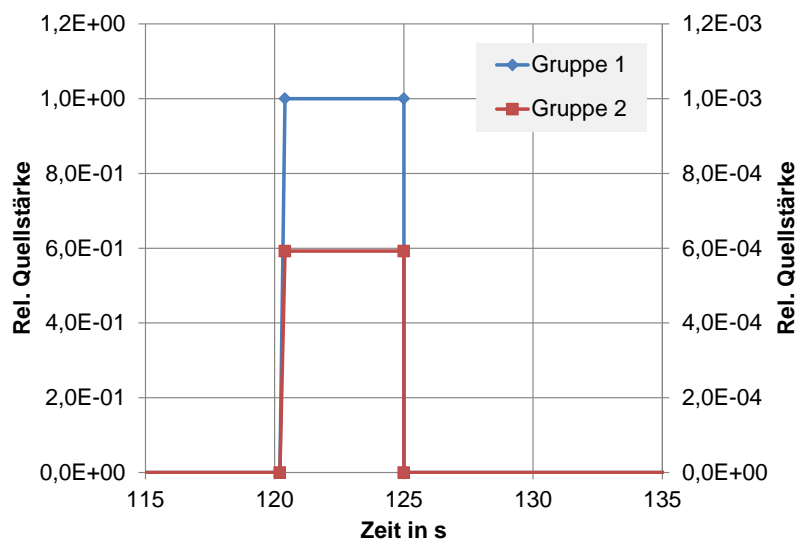
**Abb. 4.29** Prozentuale Abweichung der brennelementweisen Leistungsverteilung von der SERPENT-Referenzlösung für die PARCS-Rechnung nach Methode 2.



**Abb. 4.30** Ringweise radiale Leistungsverteilungen von PARCS im Vergleich mit der SERPENT-Referenzlösung.

#### 4.4.4 Gekoppelte transiente 3D-Kernberechnungen zu MYRRHA

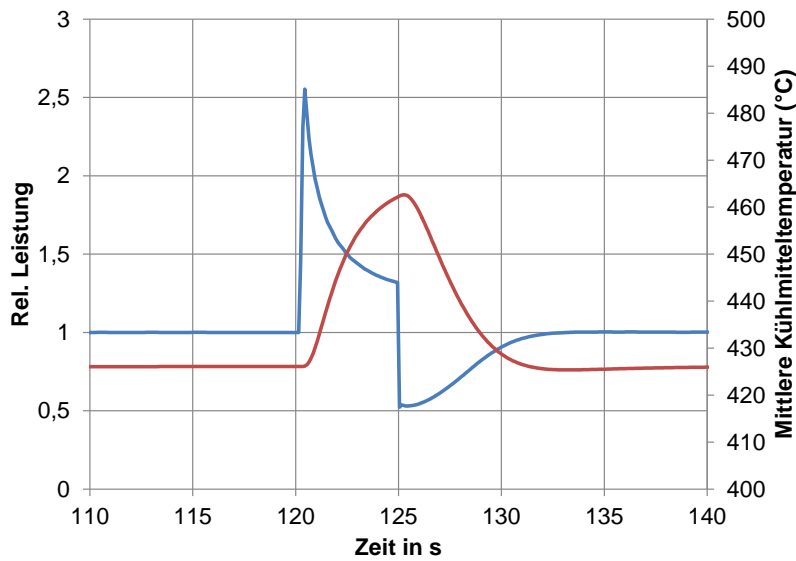
Als Testfall für das gekoppelte Programmsystem PARCS/ATHLET wurde eine Transiente mit einer zeitabhängigen externen Neutronenquelle im Spallationstarget simuliert, die einer Beschleunigerstrahltransiente (beam over power) entspricht. Dazu wurde der in Abb. 4.31 gezeigte rechteckförmige Zeitverlauf in den Energiegruppen 1 und 2 (in Anlehnung an die in Kapitel 3.3 mit MCNPX berechnete Spallationsenergieverteilung) angenommen. Das PARCS-Modell basiert auf der in Kapitel 4.3.3 berechneten parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliothek in 8 Energiegruppen. Das ATHLET-Modell ist in Kapitel 6.4 beschrieben. Darin wird jedes Subassembly durch einen eigenen thermohydraulischen Kanal beschrieben. Die thermohydraulischen Rückwirkungen werden durch eine 1:1-Abbildung zwischen PARCS und ATHLET modelliert.



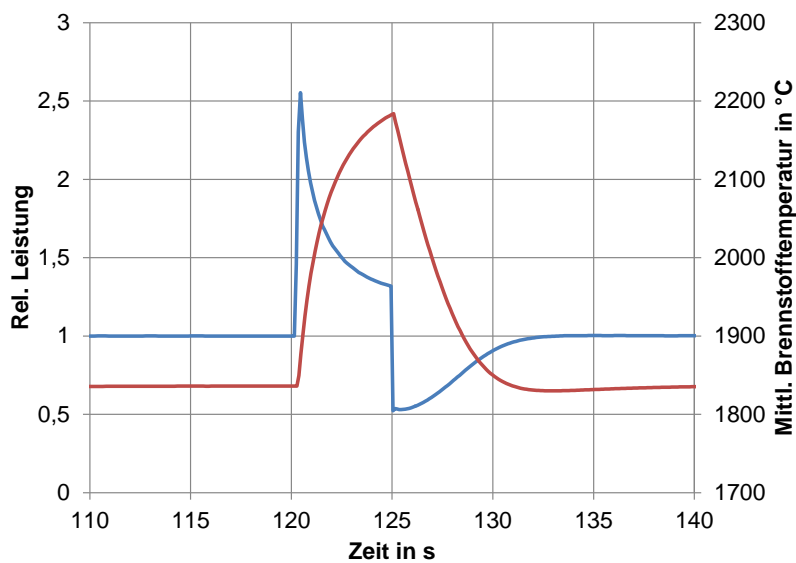
**Abb. 4.31** Rechteckförmiger Zeitverlauf für die externe Neutronenquelle in der PARCS/ATHLET-Simulation für MYRRHA.

Wie aus Abb. 4.32 (blaue Kurve) hervorgeht, wird die Gesamtleistung des Systems maßgeblich durch die externe Neutronenquelle bestimmt, d.h. die Leistung steigt zu Beginn des Quellpulses nahezu sprunghaft an. Dies entspricht den Befunden von Kapitel 3.4.5. Im Gegensatz dazu bewirkt die thermohydraulische Rückwirkung (siehe rote Kurven in Abb. 4.32 und Abb. 4.33, die Aufheizung von Brennstoff und Kühlmittel erfolgt zeitlich verzögert) ein Absinken der Leistung während des Quellpulses; nach Abschalten der Quelle fällt die Leistung sprunghaft ab und erreicht im weiteren Verlauf wieder einen stationären Zustand.





**Abb. 4.32** Zeitliche Verläufe von Gesamtleistung (blau) und mittlerer Kühlmitteltemperatur (rot) während des Neutronenquellpulses.



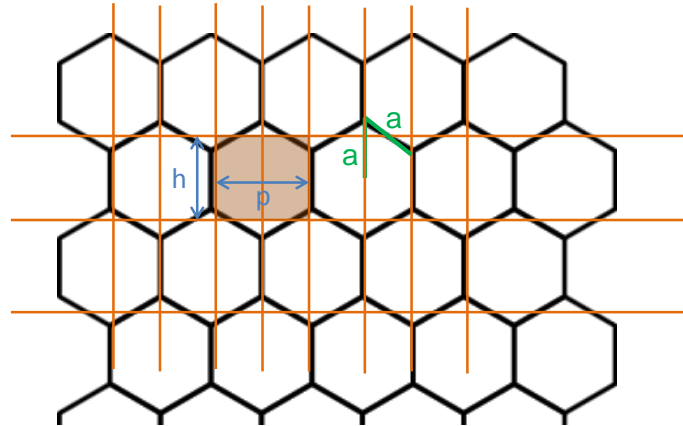
**Abb. 4.33** Zeitliche Verläufe von Gesamtleistung (blau) und mittlerer Brennstofftemperatur (rot) während des Neutronenquellpulses.

#### 4.4.5 Äquivalente cartesische Modellierung hexagonaler Kernanordnungen

Das Schema der Abbildung einer hexagonalen Gitterstruktur auf ein cartesisches Koordinatensystem ist in Abb. 4.34 dargestellt. Jedes Hexagon wird in horizontaler Richtung durch zwei cartesische Maschen repräsentiert wird, deren Größe der halbe Git-

terweite  $p$  entspricht und deren Fläche zusammen gleich der Fläche des Hexagons sein soll:

$$p \cdot h = \frac{1}{2} p^2 \sqrt{3} \Leftrightarrow h = \frac{1}{2} p \sqrt{3}$$



**Abb. 4.34** Abbildung des hexagonalen auf ein cartesisches Gitter (orange Linien).

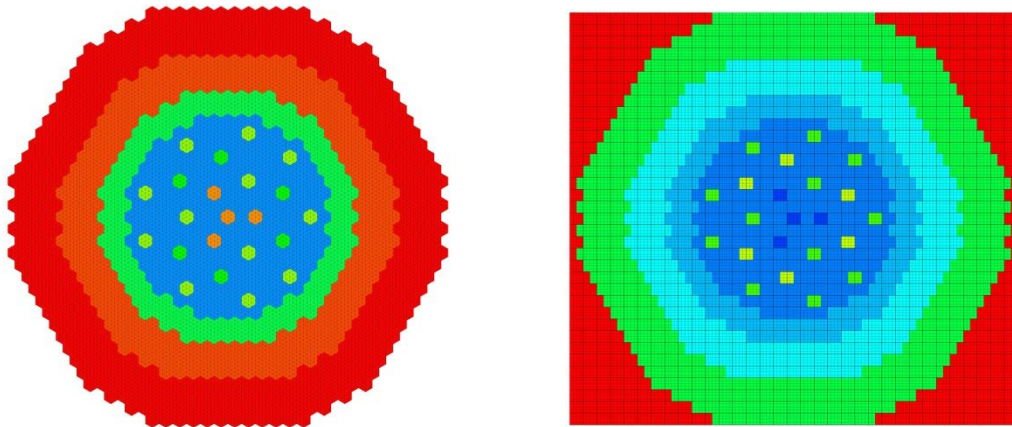
Der vertikale Abstand zweier horizontaler cartesischer Gitterlinien ist dabei gleich dem Abstand  $d_H = \frac{3}{2} a$  zweier Hexagon-Zeilen, denn wegen  $a = \frac{p}{\sqrt{3}}$  ist:

$$d_H = \frac{3p \sqrt{3}}{2 \cdot 3} = \frac{p}{2} \sqrt{3} = h$$

Während in der cartesianischen Darstellung eines Hexagons die Fläche erhalten bleibt, ist der Umfang  $U_C = 2(p + h) = 2p \left(1 + \frac{1}{2} \sqrt{3}\right)$  um ca. 7,7 % größer als der Umfang  $U_H = 6a = 2p\sqrt{3}$  des Hexagons. Dies kann zu Abweichungen zwischen cartesianischer und hexagonaler Darstellung führen, da z. B. die Neutronenleckageeffekte im cartesianischen Modell nicht genau dem hexagonalen Modell entsprechen.

Der Test der Transformationsvorschrift, die ja nur die radiale Richtung betrifft, wurde an einem axial verkleinerten ASTRID-Kern durchgeführt, der in PARCS (hexagonal) und TORT-TD (cartesisch) modelliert wurde und bei dem der obere axiale Reflektor weggelassen und die axiale Abfolge aus unterem Gasplenum, unterer Brutzone, unterer Spaltzone, innerer Brutzone und oberer Spaltzone jeweils 20 cm dick sind. Abb. 4.36 zeigt links das PARCS-Modell (Graphik erzeugt mit dem FEM-Programm FEM-Diff-3D) und rechts das äquivalente cartesianische TORT-TD-Modell (unterschiedliche Farben für dieselben Materialien aufgrund verschiedener Farbtabelle). Aufgrund des rechtwinkli-

gen Problemgebiets müssen in TORT-TD Maschenzellen mit „Vakuum“ ergänzt werden, die den Raum zwischen hexagonalem Kernrand und rechtwinkligem Rand des Problemgebiets ausfüllen (rote Farbe in Abb. 4.35 rechts).

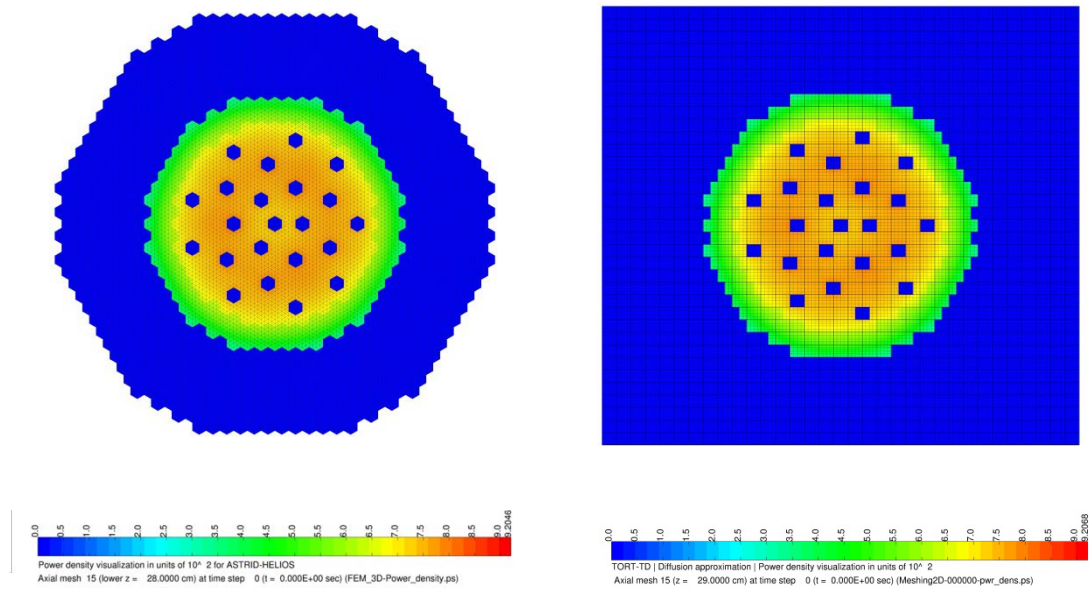


**Abb. 4.35** Materialverteilung im hexagonalen (links) und äquivalenten cartesischen Modell (rechts).

Der von PARCS errechnete Multiplikationsfaktor unterscheidet sich um lediglich 37 pcm in der Reaktivität vom Ergebnis der TORT-TD-Rechnung, siehe Tab. 4.13. Zusätzlich ist der Multiplikationsfaktor der FEM-Diff-3D-Lösung ( $\Delta\rho = -49$  pcm), mit der die Graphiken erzeugt wurden, angegeben. Die gute Übereinstimmung zeigt sich auch anhand der radialen Leistungsdichteverteilung, wie aus Abb. 4-36 hervorgeht.

Rechencode	Multiplikationsfaktor	Reaktivitätsdifferenz (pcm)
PARCS (hexagonal)	0,99382	–
TORT-TD (Cartesisch)	0,99345	-37
FEM-Diff-3D (hexagonal)	0,99333	-49

**Tab. 4.13** Vergleich der Multiplikationsfaktoren für hexagonale und Cartesische Modelle.



**Abb. 4.36** Leistungsdichteverteilung im hexagonalen (links) und äquivalenten Cartesischen Modell (rechts).

Die beispielhafte Untersuchung anhand von ASTRID bestätigt die Resultate von Kapitel 3.4.4 und eröffnen somit Neutronenkinetikprogrammen der GRS wie TORT-TD oder QUABOX-CUBBOX, die keine hexagonale Geometrieoption bieten, den Einsatz für hexagonale Kernanordnungen in schnellen und thermischen Systemen, etwa WWER-Reaktoren.



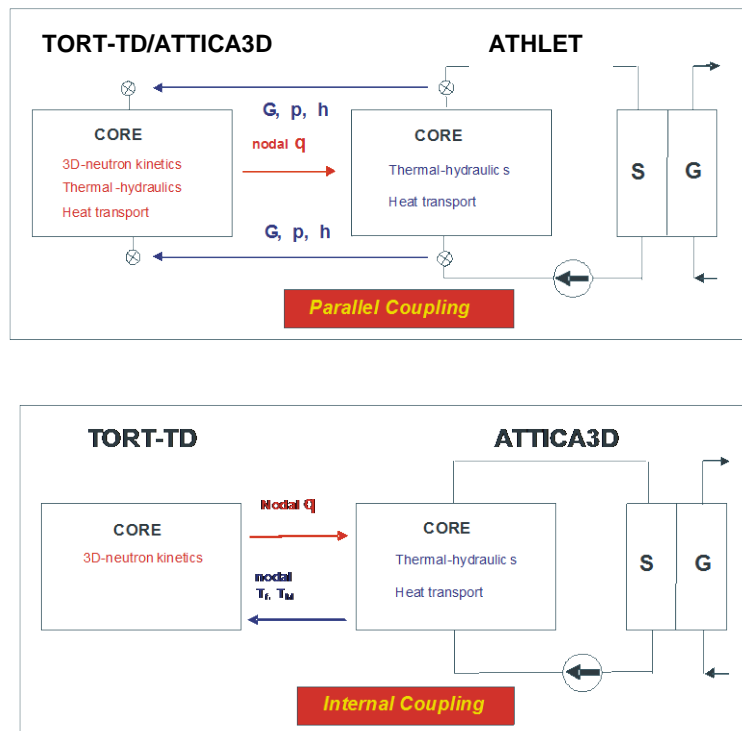
## **5 AP 3: Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren**

### **5.1 AP 3.1: Kopplung von TORT TD/ATTICA3D mit ATHLET zur Primärkreislaufsimulation von Kugelhaufen-V/HTR**

Für die Kopplung von TORT-TD/ATTICA3D mit ATHLET wurde der in Abb. 5.1 oben dargestellte parallele Kopplungsansatz realisiert. Darin werden Fluidodynamik und Wärmetransportprozesse im Reaktorkern sowohl von ATTICA3D als auch von ATHLET simuliert. Die Kopplung erfolgt über den Austausch der Randbedingungen an Ein- und Austritt des Kerns. Zusätzlich wird die von TORT-TD/ATTICA3D berechnete räumliche Leistungsverteilung an ATHLET übergeben.

Im Programmsystem TORT-TD/ATTICA3D /SEU12/ seinerseits ist eine interne Kopplung zwischen den Codes für Reaktordynamik (TORT-TD) und Thermohydraulik (ATTICA3D) implementiert (siehe Abb. 5.1 unten), die in einer Kooperation mit dem Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart entwickelt wurde.

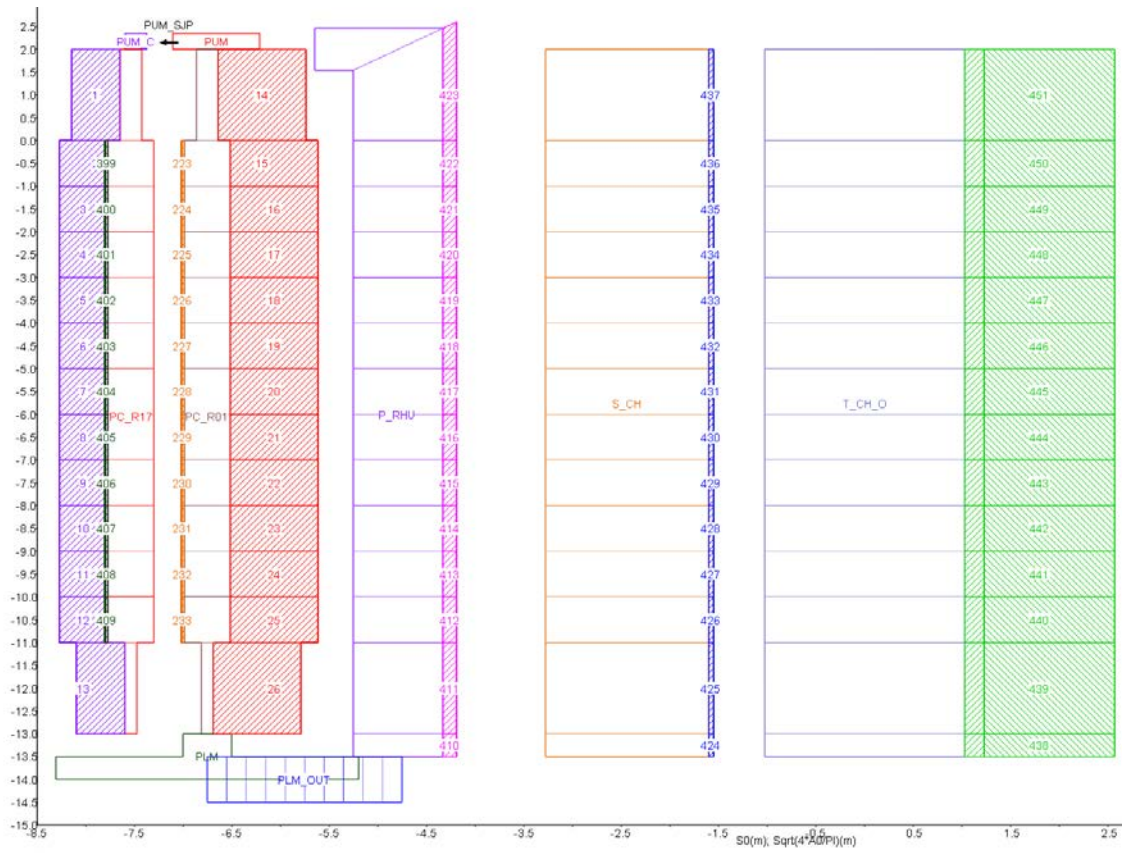
Die Kopplung zwischen TORT-TD/ATTICA3D und ATHLET wurde durch eine direkte Code-Kopplung durch Datenaustausch im Arbeitsspeicher, also ohne Umwege über Datenaustausch mittels ausgelagerter Dateien realisiert. Das gekoppelte Programmsystem wird durch eine einzelne ausführbare Datei dargestellt. Für den Austausch der Randbedingungen an Ein- und Austritt des Kerns greift TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET direkt auf die TFO-Objekte über deren Namen zu. Die Übergabe der räumlichen Leistungsdichteverteilung von TORT-TD/ATTICA3D an ATHLET erfolgt über das im ATHLET-Interface implementierte Mapping-Schema zwischen Reaktordynamik- und Thermohydraulikcode.



**Abb. 5.1** Schema der Kopplung zwischen TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET (oben). Das Bild unten zeigt die in TORT-TD/ATTICA3D realisierte interne Kopplung.

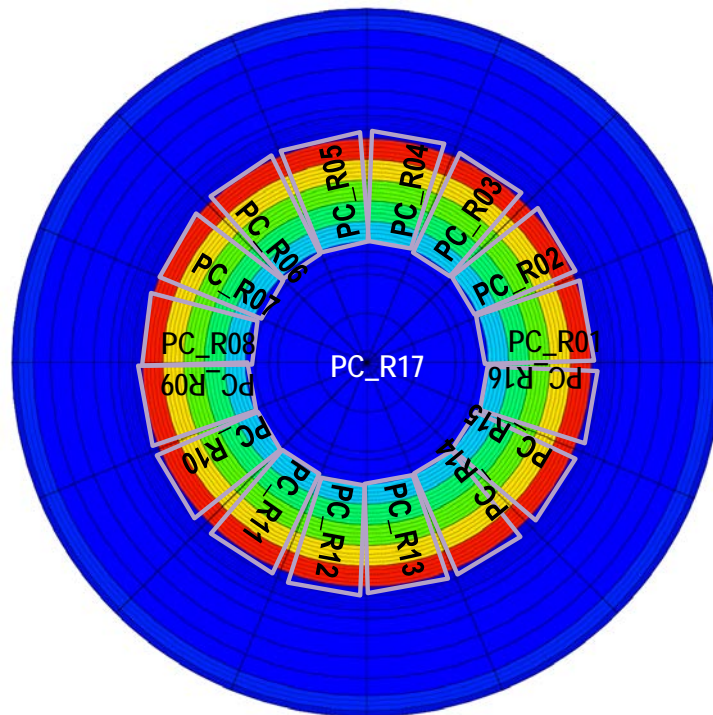
Das ATHLET-Modell des PBMR-400-Kerns besteht aus 17 parallelen thermohydraulischen Kanälen mit Querverbindungen (PC\_R01 bis PC\_R17), wobei der ringförmige Kern durch 16 identische Kanäle und der zentrale Reflektor durch Kanal PC\_R17 dargestellt werden. Abb. 5.2 zeigt die graphische Darstellung des ATHLET-Modells. Das entsprechende TORT-TD-Modell in radialer Darstellung geht aus Abb. 5.3 hervor. Darin ist zusätzlich die Zuordnung der 17 thermohydraulischen Kanäle auf das Rechengitter der Neutronenkinetik eingezeichnet. Als Testfall wurde mit TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET eine Druckentlastungstransiente (Depressurized Loss Of Forced Convection, DLOFC) ohne Reaktorabschaltung für das PBMR-400-Design in Anlehnung an den OECD/NEA-PBMR-400-Benchmark /REI13/ simuliert. Dabei wird die Druckentlastung zu Beginn der Transiente durch eine 13 Sekunden dauernde lineare Rampe von 90 bar (System-Nennndruck) auf 1 bar (Atmosphärendruck) simuliert. Im selben Zeitraum wird der Helium-Massenstrom am Kerneintritt ebenfalls linear von 192,7 kg/s auf 0,0 kg/s reduziert. Die Zeitverläufe von Reaktorgesamtleistung und Nachzerfallsleistung sind in Abb. 5.4 gezeigt. Nach Berechnung des gekoppelten stationären Ausgangszustands wird zunächst für 50 s eine Nulltransiente gerechnet, um

das stationäre Verhalten nachzuweisen. Deutlich ist das rasche Absinken der Gesamtleistung zu erkennen, die sich im weiteren Verlauf der Nachzerfallsleistung nähert.

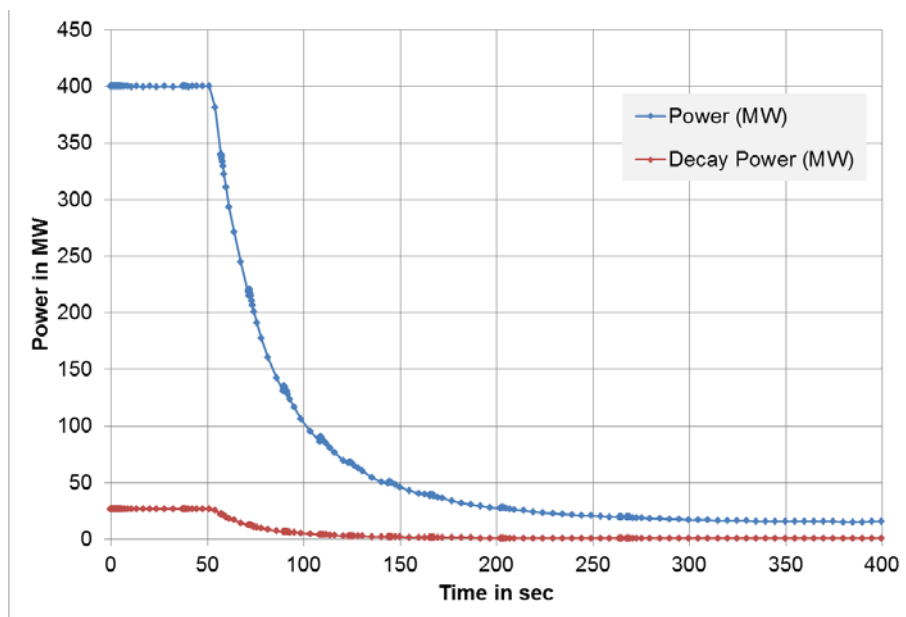


**Abb. 5.2** ATHLET-Modell des Kerns des PBMR-400-Designs.





**Abb. 5.3** TORT-TD-Modell des Kerns des PBMR-400-Designs mit eingezeichneter Zuordnung zu den 17 thermohydraulischen Kanälen.

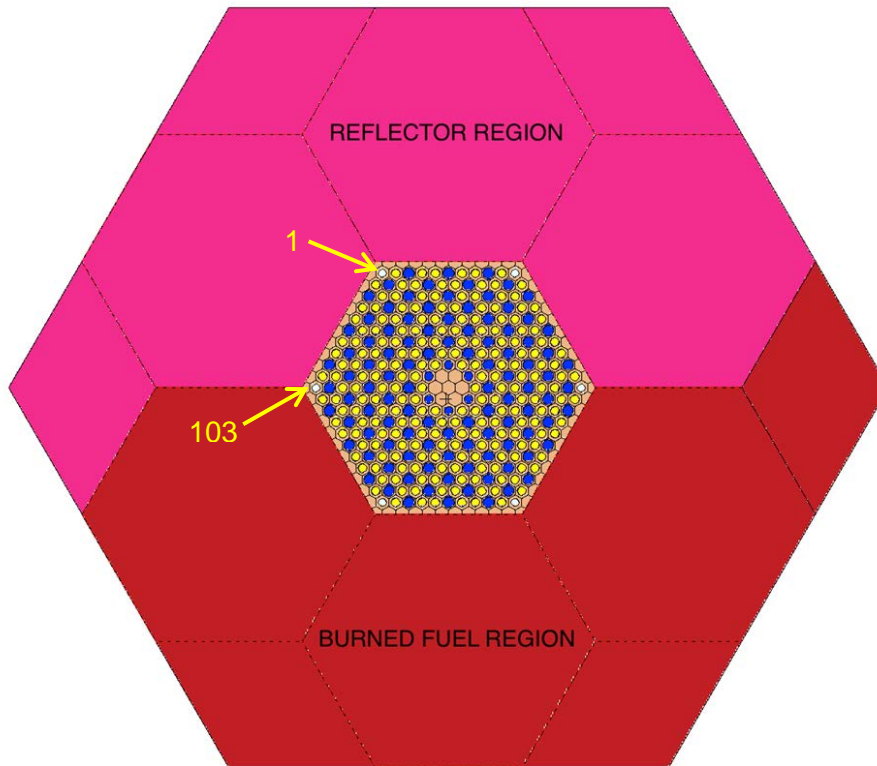


**Abb. 5.4** Von TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET berechnete Zeitverläufe von Reaktorleistung (blau) und Nachzerfallsleistung (rot) für eine Druckentlastungstransiente.

## **5.2 AP 3.2: Erstellung konsistenter Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für den prismatischen V/HTR**

### **5.2.1 Depletion Exercise des MHTGR-350MW-Benchmarks**

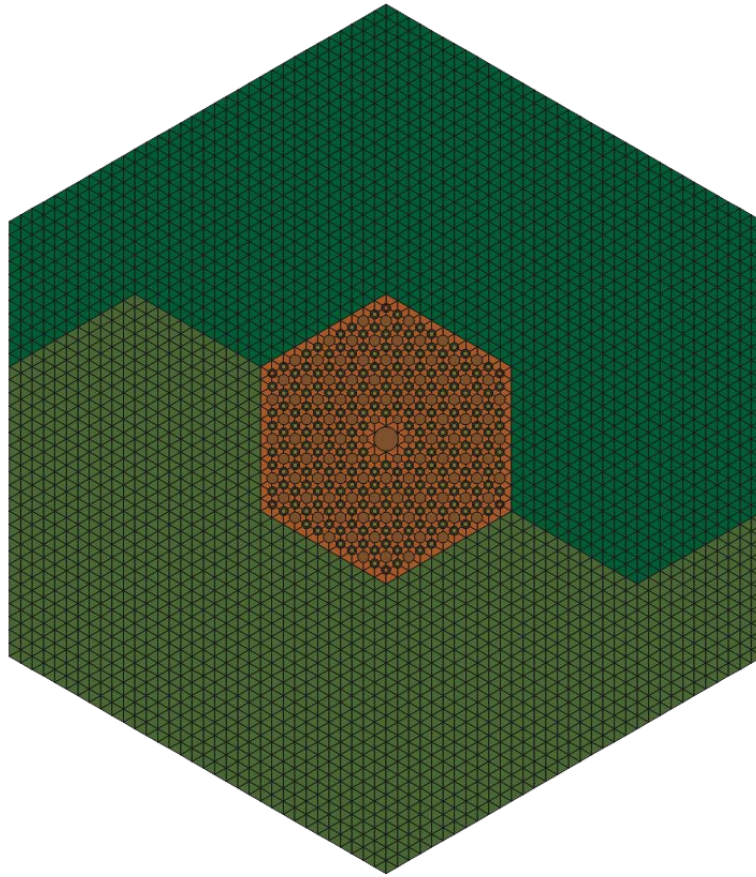
Im MHTGR-350MW-Benchmark ist eine Phase III (Depletion Exercise) definiert, deren Ziel die Evaluation von Rechenmethoden, Rechenmodellen und nuklearen Daten zur Spektralrechnung und Wirkungsquerschnittserzeugung für prismatische V/HTR ist. Um Spektraleffekte durch die lokale Umgebung, insbesondere zwischen aktiver Zone und Reflektor, berücksichtigen zu können, wird eine Superzelle definiert, siehe Abb. 5.5. Diese besteht aus drei Bereichen, einem Brennstoff-Block in der Mitte, einer Reflektorregion oben und einer homogenisierten Brennstoffregion unten. In die 6 Bohrungen an den Ecken des Brennstoffblocks können Absorberstäbe (Fixed Burnable Poison rods, FBP) eingesetzt werden, die abbrennbare Neutronengifte enthalten. Im Zustand ohne eingefahrene Absorberstäbe wird in diese Positionen jeweils Block-Graphit eingesetzt. Die hier beschriebenen Modelle und Ergebnisse wurden mit DRAGON4 und HELIOS-1.12 erzielt /SEU14c/.



**Abb. 5.5** Superzellmodell für prismatischen V/HTR /ORJ13/. Zwei der sechs FBP-Positionen sind markiert.

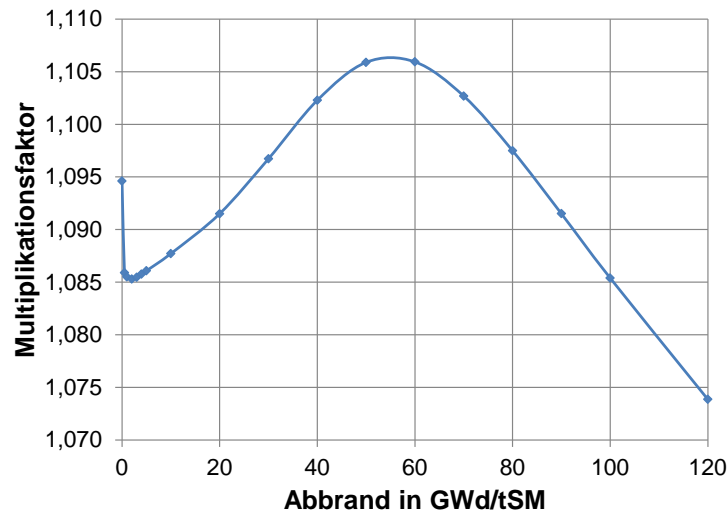
### 5.2.2 DRAGON4-Modellierung

Abb. 5.6 zeigt das Modell einer Superzelle in DRAGON4 /MAR94/. Die geometrische Modellierung erfolgt dabei mit den Modulen HEXT und CLUSTER, wobei HEXT die Superzelle mit ihren einzelnen Bestandteilen darstellt und mit CLUSTER die Anordnung der Brennstoff-Compacts einschließlich ihrer Bohrungen sowie die Kühlkanäle und die Bohrungen für die abbrennbaren Neutronenabsorber und die Absorber selbst modelliert werden. Für das Tracking werden die Module NXT in Verbindung mit MCCGT verwendet. Zur Behandlung der doppelten Heterogenitäten von Brennstoff und abbrennbaren Neutronenabsorbern wird das Modul BIHET verwendet. Für die Resonanz-Selbstabschirmung wird von dem Modul USS vorgenommen, und die Flussberechnungen vom Modul ASM in Verbindung mit dem Modul FLU. Zur Abbrandberechnung wird eine Schleife über die Abbrandwerte bis 120 GWd/tSM implementiert, wobei hier das Modul EVO eingesetzt wird.



**Abb. 5.6** Supercell-Modell in DRAGON4.

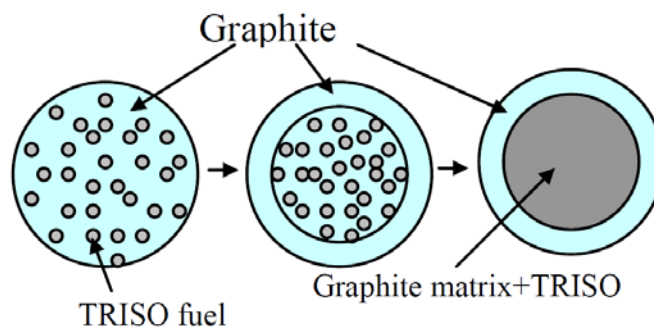
In einer Testrechnung wurde die Entwicklung des Multiplikationsfaktors als Funktion des Abbrands für einen Fall mit eingesetzten abbrennbaren Absorberstäben für 18 Abbrandpunkte berechnet. Diese Testrechnung, deren Ergebnis in Abb. 5.7 gezeigt ist, benötigte rund 56 CPU-Stunden oder 2,3 CPU-Tage Rechenzeit. Aufgrund dieser hohen Rechenzeiten wurden die Supercell-Rechnungen daher nicht mit DRAGON, sondern mit HELIOS durchgeführt.



**Abb. 5.7** DRAGON4-Testrechnung für die Superzelle mit eingesetzten Absorberstäben.

### 5.2.3 HELIOS-Modellierung in Verbindung mit Reactivity equivalent Physical Transform (RPT)

Im Gegensatz zu DRAGON4 gibt es in HELIOS keine Möglichkeit, doppelte Heterogenitäten in Brennstoff oder Absorberstäben zu berücksichtigen. Eine einfache volumengewichtete Homogenisierung der TRISO-Partikel in der Graphitmatrix würde zu einer signifikanten Unterschätzung des Selbstabschirmungseffekts und damit zu niedrigen Reaktivitäten führen. Die HELIOS-Modellierung erfolgt daher in Verbindung mit der sog. RPT-Methode (Reactivity equivalent Physical Transform) /KIM05/.

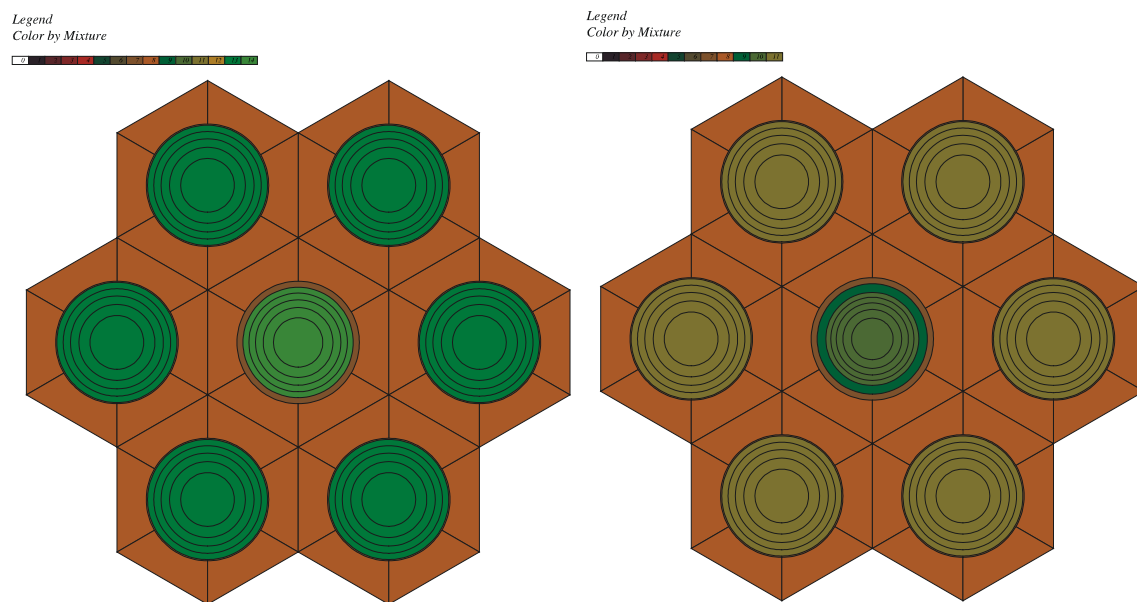


**Abb. 5.8** Schema der RPT-Methode /KIM05/.

In der RPT-Methode wird der Selbstabschirmungseffekt bei Homogenisierung der TRISO-Partikel in der Graphitmatrix dadurch korrekt erfasst, indem die TRISO-Partikel in einem verkleinerten Volumen anstelle über der gesamten Graphitmatrix homogeni-

siert werden. Dieser Vorgang ist in Abb. 5.8 schematisch dargestellt. Der Radius ( $r_{RPT}$ ) des reduzierten Homogenisierungsvolumens wird so bestimmt, dass der Multiplikationsfaktor bzw. die Reaktivität gleich demjenigen eines Referenzmodells ist, welches doppelt-heterogene Struktur der TRISO-Partikel explizit darstellt. Die Reduktion von  $r_{RPT}$  hat einen Anstieg des Multiplikationsfaktors zur Folge, da der Selbstabschirmungseffekt verstärkt wird. Als Referenzmethode kann ein Monte-Carlo- oder ein deterministischer Code herangezogen werden, der über Modelle zur doppelten Heterogenität verfügt. Im vorliegenden Fall wurde DRAGON4 eingesetzt.

Für den MHTGR350-Benchmark tritt das Problem der doppelten Heterogenität sowohl im Brennstoff als auch im abbrennbaren Absorberstab auf. Die RPT-Methode muss daher separat für Brennstoff und Absorber angewandt werden. Für den Brennstoff wurde eine einzelne hexagonale Zelle im unendlichen Gitter mit einem TRISO-Compact jeweils in HELIOS und in DRAGON4 modelliert. Das Modell des Absorbers besteht aus sieben hexagonalen Zellen, von denen die zentrale Zelle den Absorberstab enthält und sechs nächste Nachbarzellen mit Brennstoff-Compacts das korrekte Neutronenspektrum liefern.



**Abb. 5.9** DRAGON4-Modell des Absorberstabs (mittig), links explizite Modellierung mittels BIHET, rechts RPT-Modell mit reduziertem Homogenisierungsvolumen.

Abb. 5.9 zeigt dieses Modell, links die explizite Modellierung mittels BIHET, rechts das RPT-Modell mit reduziertem Homogenisierungsvolumen. Das explizite Modell liefert ei-

nen Multiplikationsfaktor von  $k = 0,4471188$ . Wird der Homogenisierungs-Radius im RPT-Modell variiert, so ergibt sich die in dargestellte Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors vom RPT-Radius. Offensichtlich wird für  $r_{RPT} = 0,482$  cm die Reaktivitätsdifferenz  $\Delta\rho$  zum expliziten Modell minimiert. Dieser Radius wird im HELIOS-Modell für die äquivalente Darstellung der abbrennbaren Absorberstäbe verwendet. Für die Brennstoffzelle ergibt sich ein RPT-Radius von  $r_{RPT} = 0,44$  cm, siehe Tab. 5.2.

$r_{RPT}$ (cm)	$k$	$\Delta\rho$ (pcm)
0,30	0,4970557	22470
0,32	0,4872421	18417
0,34	0,4833302	16756
0,36	0,4727184	12112
0,38	0,4694532	10640
0,40	0,4640033	8138
0,42	0,4582021	5410
0,44	0,4562078	4456
0,46	0,4498889	1377
0,48	0,4472987	90
0,481	0,4472066	44
0,482	0,4471178	-1
0,50	0,4443198	-1409

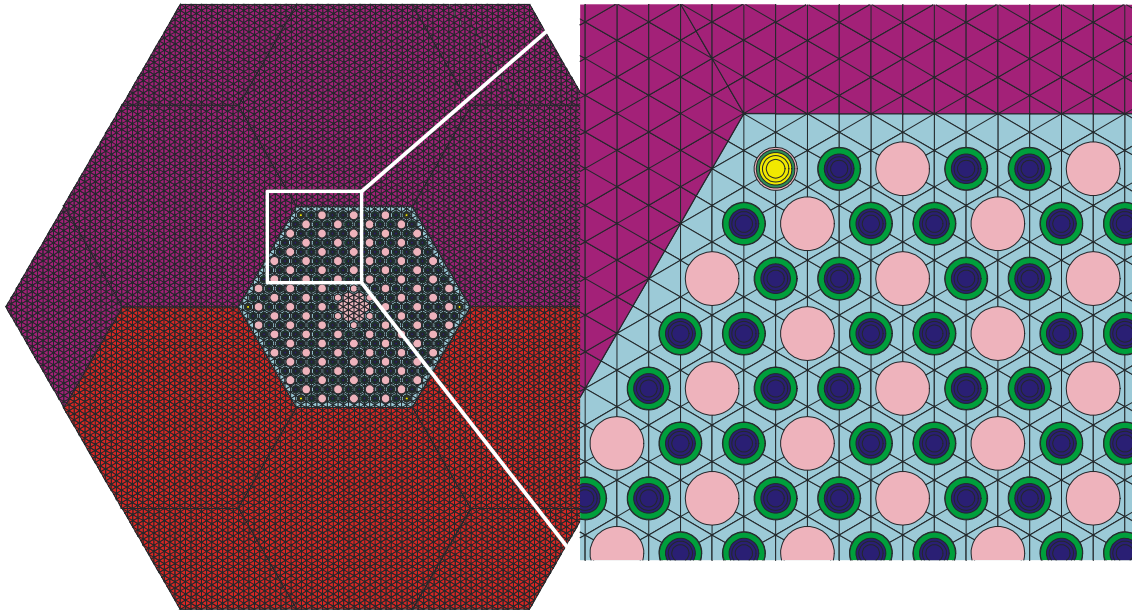
**Tab. 5.1** Multiplikationsfaktor als Funktion des RPT-Radius für die Absorberzelle.  $\Delta\rho$  ist die Reaktivitätsdifferenz zum Multiplikationsfaktor des expliziten Modells.

$r_{RPT}$ (cm)	$k$	$\Delta\rho$ (pcm)
0,3	1,330494	5177
0,32	1,324072	4812
0,33	1,321	4636
0,335	1,319808	4568
0,34	1,306218	3780
0,36	1,295348	3137
0,38	1,289259	2773
0,4	1,268724	1517
0,42	1,261614	1073
0,44	1,244738	-2
0,46	1,235042	-632
0,48	1,227943	-1100
0,5	1,209676	-2330

**Tab. 5.2** Multiplikationsfaktor als Funktion des RPT-Radius für die TRISO-Compact-Zelle.  $\Delta\rho$  ist die Reaktivitätsdifferenz zum Multiplikationsfaktor des expliziten Modells.

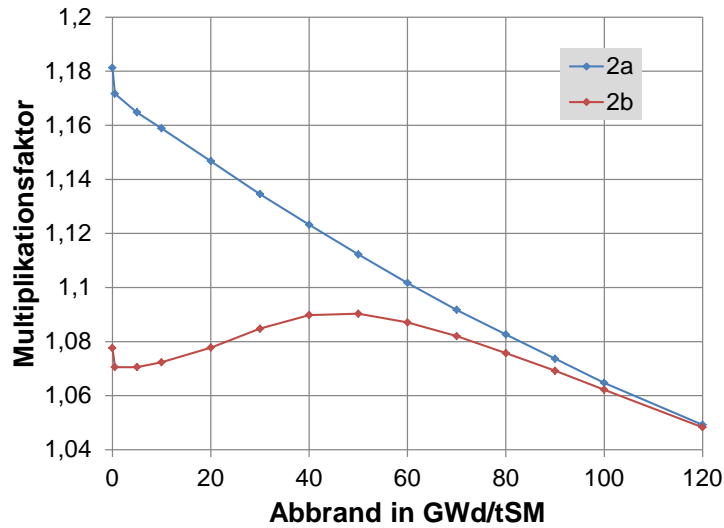
Das HELIOS-Modell der Superzelle ist in Abb. 5.10 für den Fall der eingesetzten Absorberstäbe gezeigt. Der vergrößerte Ausschnitt rechts zeigt die Details der räumlichen Diskretisierung. Sowohl die TRISO-Compacts als auch die Absorberstäbe werden durch mehrere Ringzonen dargestellt. Die HELIOS-Rechnungen wurden mit der 190-Energiegruppen-Bibliothek (unadjusted) durchgeführt.



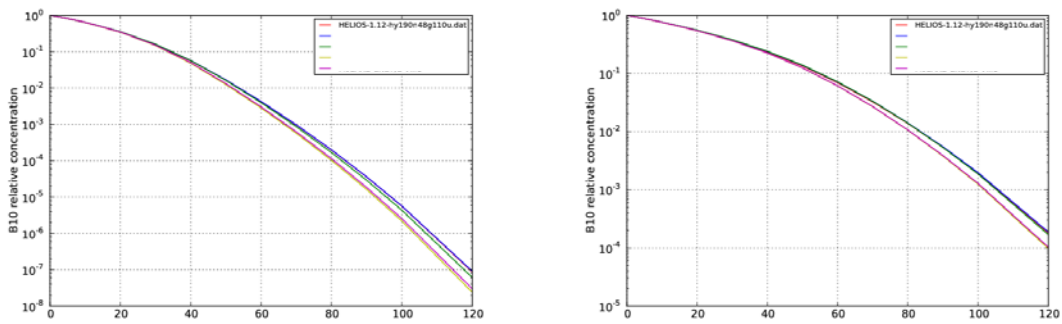


**Abb. 5.10** HELIOS-1.12-Modell der Superzelle, hier mit abbrennbaren Neutronenabsorbbern. Die Vergrößerung rechts zeigt einen Ausschnitt mit den geometrischen Details.

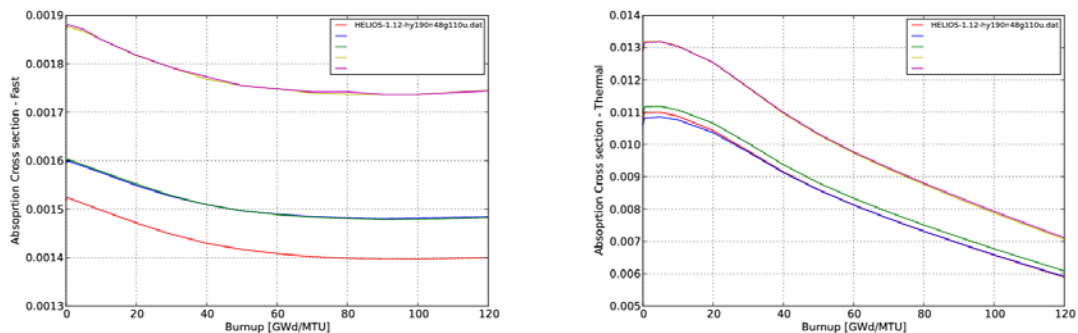
Abb. 5.11 zeigt die HELIOS-RPT-Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands ohne (2a) und mit (2b) eingesetzten Absorberstäben; die Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit Resultaten der anderen Benchmarkteilnehmer. Dies gilt auch für die relativen  $^{10}\text{B}$ -Konzentration als Funktion des Abbrands, die in Abb. 5.12 für zwei FBP-Positionen (siehe Abb. 5-5) dargestellt sind. Die Abb. 5.13 und Abb. 5.14 schließlich zeigen die über den Brennstoff-Block homogenisierten und auf zwei Energiegruppen (thermische Grenze bei 4,95 eV) kondensierten makroskopischen Absorptions- bzw. Spalt-Produktions-Wirkungsquerschnitte im Vergleich mit den Ergebnissen der anderen Benchmarkteilnehmer.



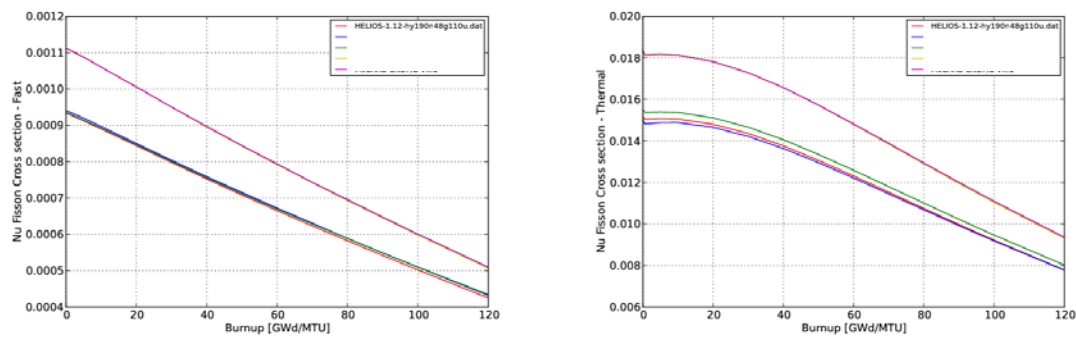
**Abb. 5.11** Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands ohne (2a, blau) und mit (2b, rot) eingesetzten Absorberstäben.



**Abb. 5.12** Relative <sup>10</sup>B-Konzentration als Funktion des Abbrands für die beiden FBP-Positionen 1 (links) und 103 (rechts).



**Abb. 5.13** Makroskopischer Absorptions-Wirkungsquerschnitt als Funktion des Abbrands für schnelle (links) und thermische Gruppe (rechts).



**Abb. 5.14** Makroskopischer Spalt-Produktions-Wirkungsquerschnitt als Funktion des Abbrands für schnelle (links) und thermische Gruppe (rechts).

### 5.3 AP 3.3: 3D-Kernberechnungen für prismatische V/HTR

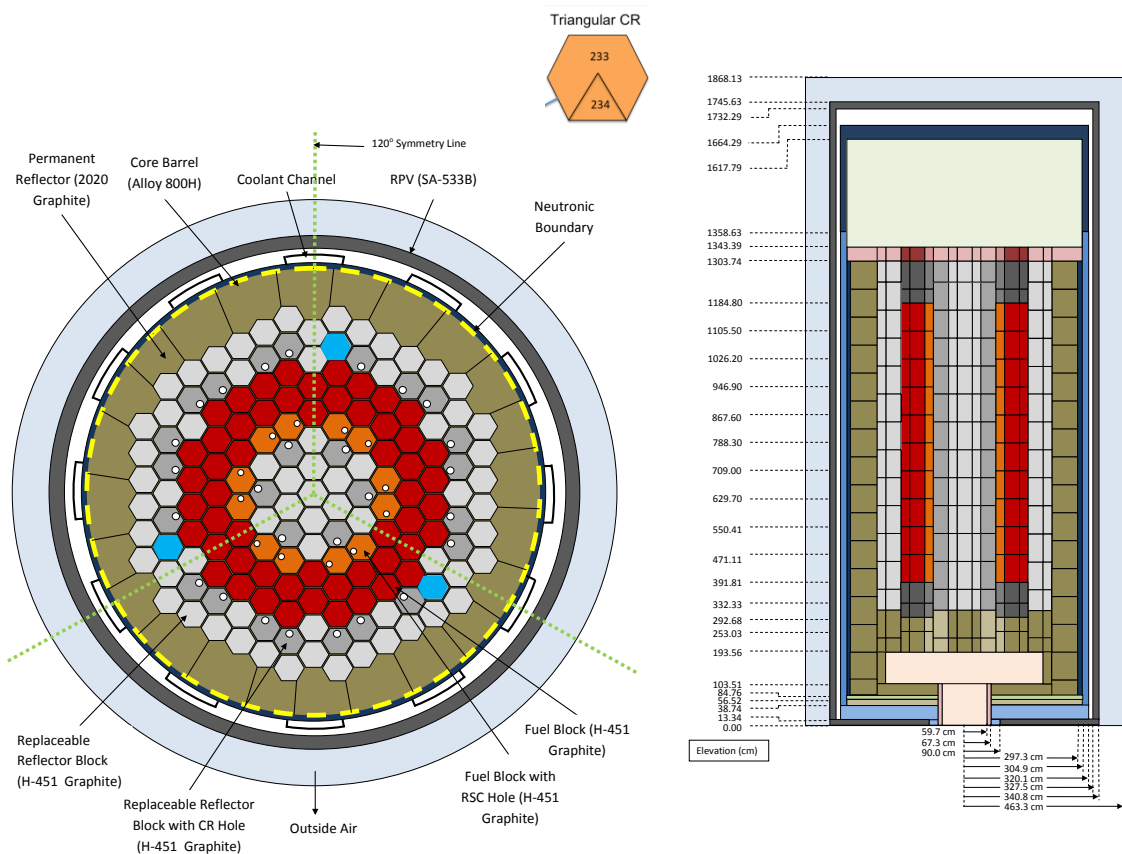
#### 5.3.1 Der MHTGR-350MW-Benchmark

Ähnlich dem HTR vom Kugelhaufentyp stehen die Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung prismatischer HTR hinter dem Stand der Rechenmethoden anderer Reaktorkonzepte zurück. Der MHTGR-350MW-Benchmark bietet die Möglichkeit, die Rechenprogramme und -methoden der GRS zu überprüfen und ggfs. weiterzuentwickeln. Dazu wurden zunächst 3D-Kernberechnungen für den stationären Zustand des MHTGR-350 mit festen thermohydraulischen Bedingungen (Phase I, Exercise 1) durchgeführt /SEU14b/. Zum Einsatz kamen dabei die verschiedenen deterministischen Programme.

Die radiale und axiale Kernanordnung des MHTGR-350 (350 MW thermische Nennleistung,  $5,9 \text{ MW/m}^3$  mittlere Leistungsdichte) ist in Abb. 5.15 wiedergegeben. Der Kern besteht aus einer ringförmigen aktiven Zone mit einem zentralen Graphitreflektor und einem äußeren radialen Reflektor, der aus einer permanenten Außenregion und einer innenliegenden austauschbaren Region besteht. Der aktive Kern besteht aus 7,9 m hohen Brennstoff-Säulen, die jeweils aus 10 aufeinander gestapelten Brennstoff-Blöcken bestehen. Es gibt 6 Steuerelemente im zentralen Reflektor und weitere 24 betriebliche Steuerelemente im austauschbaren Reflektor. Der Brennstoff ( $\text{UC}_{0.5}\text{O}_{1.5}$  mit 15,5 % Anreicherung) besteht aus TRISO-Partikeln, die in einer zylindrischen Graphitmatrix eingebettet sind und hiermit sog. Brennstoff-Compacts bilden. Die Brennstoff-

Compacts sitzen in Bohrungen in hexagonalen Graphitblöcken mit einer Breite von 36 cm.

Zur neutronenphysikalischen Modellierung wird im Rahmen des Benchmarks eine Wirkungsquerschnittsbibliothek in 26 Energiegruppen für den Zustand EOEZ zur Verfügung gestellt. Es handelt sich dabei um blockweise homogenisierte Wirkungsquerschnitte, die für 12 axiale Schichten und 91 hexagonale Blöcke je Schicht und 60°-Azimutsegment gegeben sind. Der Kern wird durch insgesamt 234 verschiedene Materialien repräsentiert, von denen 220 die aktive Zone beschreiben. Im Zustand EOEZ ist eine Steuerelementgruppe (6 Blöcke, blau markierte Hexagons in Abb. 5.15 links) genau eine Blockhöhe unter die Unterkante des oberen axialen Reflektors eingefahren (axial Position 1105,5 cm). Die kontrollierten Blöcke können entweder durch ein volles Hexagon oder durch ein in sechs Dreiecke unterteiltes Hexagon dargestellt werden; entsprechende Wirkungsquerschnittsdaten stehen zur Verfügung.



**Abb. 5.15** Radiale und axiale Kernanordnung des MHTGR-350 /ORJ13/. Hellblaue Markierung links: Positionen der teilweise eingefahrenen Steuerstabgruppe.

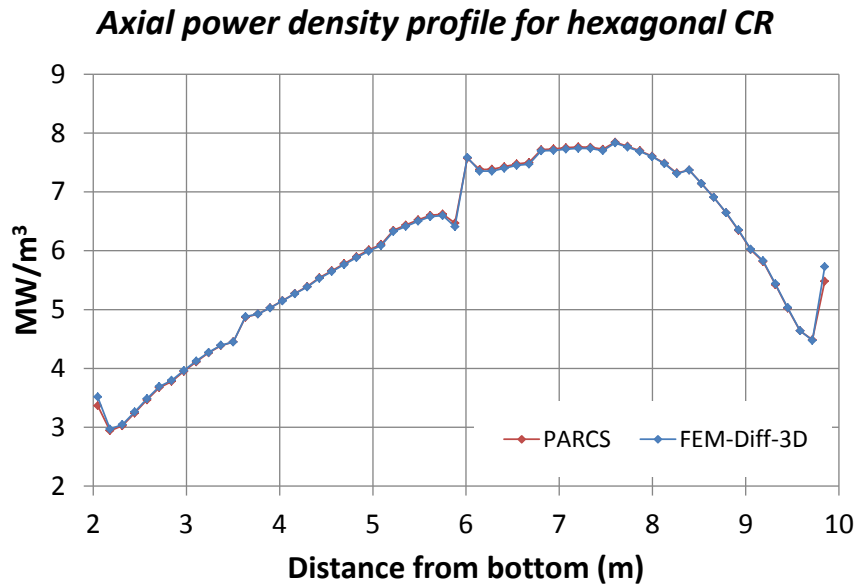
Die 3D-Kernberechnungen wurden mit vier Codes DYN3D-MG /GRU00, RHO12/, PARCS /JOO98/, TRIVAC /HEB87/ und FEM-Diff-3D /SEU13/ durchgeführt, die erzielten Ergebnisse für globale Kernparameter sind in Tab. 5.3 zusammengefasst. Die ersten vier Zeilen dieser Tabelle enthalten Ergebnisse für die hexagonale Darstellung und die letzte Zeile für die triangulare Darstellung des kontrollierten Blocks. Die Multiplikationsfaktoren liegen nahe beieinander. Unterschiede gibt es bei der Steuerstabwirksamkeit und der maximalen Leistungsdichte. Die Ursache für die größere Steuerstabwirksamkeit für das triangulare Modell liegt in den unterschiedlichen Wirkungsquerschnitten. Die unterschiedlichen Werte für die maximale Leistungsdichte hängen mit Feinheit der räumlichen Diskretisierung zusammen, insbesondere in radialer Richtung. Je feiner die Diskretisierung innerhalb eines Hexagons ist, desto deutlicher unterscheidet sich bei starken Flussvariationen innerhalb eines hexagonalen Nodes der Fluss-Mittelwert vom Fluss-Maximalwert. Die in TRIVAC angewandte gemischt-duale Finite-Elemente-Diskretisierung nach Thomas-Raviart-Schneider /HEB08/ mit quadratischen Basisfunktionen resultiert daher in einem höheren Maximalwert. Die Lösung mit FEM-Diff-3D ergibt den höchsten Maximalwert, da durch eine Unterteilung jedes der sechs Dreiecksprismen eines Hexagons in neun gleich große Dreiecksprismen lokale Flussvariationen besonders gut wiedergegeben werden können. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass der Maximalwert für die (nodale) Leistungsdichte hier begrenzte Aussagekraft hat, da nur nodeweise und nicht stabweise homogenisierte Wirkungsquerschnitte verwendet werden.

Code	Steuerelement-Modell	$k_{eff}$	Steuerstab-Wirksamkeit (pcm)	Axiale Leistungsverschiebung	Mittlere Leistungsdichte (W/cm <sup>3</sup> )	Maximale Leistungsdichte (W/cm <sup>3</sup> )
PARCS	hexagonal	1,06698	823,4	0,16478	5,9582	10,11
DYN3D	hexagonal	1,06597	766,8	n./a.	5,9500	9,90
TRIVAC	hexagonal	1,06689	818,5	n./a.	5,9583	14,10
FEM-Diff-3D	hexagonal	1,06725	820,1	0,16371	5,9500	19,18
FEM-Diff-3D	triangular	1,06696	1112,1	0,14732	5,9499	19,05

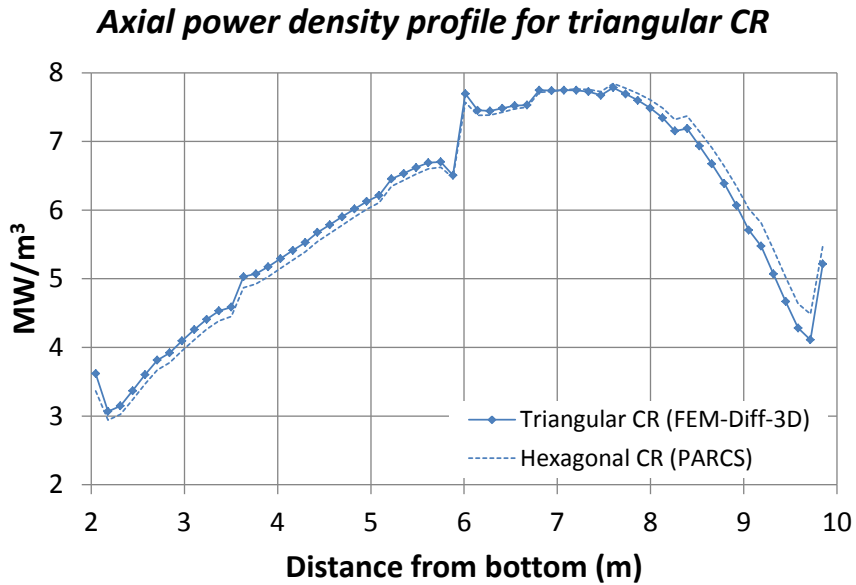
**Tab. 5.3** Ergebnisse für globale Parameter.

Radial integrierte axiale Leistungsdichteprofile sind in Abb. 5.16 und Abb. 5.17 dargestellt. Während Abb. 5.18 Ergebnisse des hexagonalen Steuerelement-Modells zeigt, vergleicht Abb. 5.17 das Leistungsprofile des triangularen Modells mit dem hexagonalen Modell. Größere Differenzen sind vor allem an der Kernoberkante zu erkennen, wo

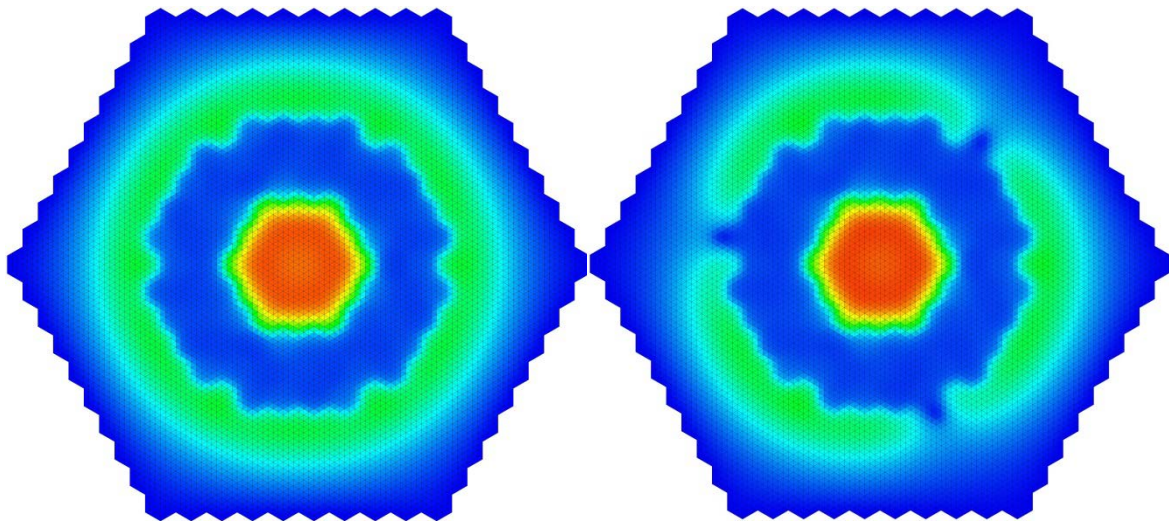
das triangulare Modell niedrigere Leistungsdichten liefert. Dies erklärt auch die geringere axiale Leistungsverschiebung des triangularen Modells. Der Einfluss der Steuerelemente ist anhand der radialen Neutronenflussverteilungen zu erkennen, siehe Abb. 5-18. Die lokale Absenkung des thermischen Neutronenflusses (Gruppe 26) an den Steuerelementpositionen ist deutlich sichtbar.



**Abb. 5.16** Radial integrierte axiale Leistungsdichteprofile für das hexagonale Steuerelement-Modell in PARCS (rot) und FEM-Diff-3D (blau).



**Abb. 5.17** Radial integrierte axiale Leistungsdichteprofile für das triangulare Steuerelement-Modell (durchgezogene Linie) im Vergleich zum hexagonalen Modell (gestrichelte Linie).

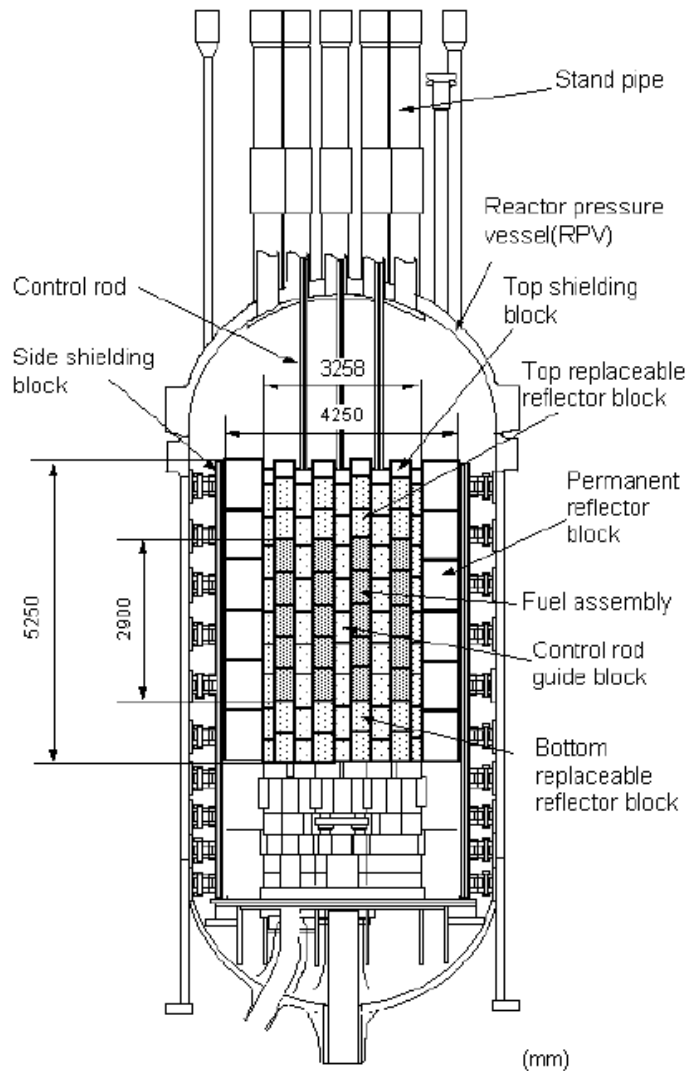


**Abb. 5.18** Radiale Neutronenflussverteilung in Energiegruppe 26 für das triangulare Modell in Höhe 1039,42 cm für ausgefahrene (links) und eingefahrene (rechts) Steuerelemente. (Rechnung mit FEM-Diff-3D.)

### 5.3.2 Modell eines HTTR-Kerns

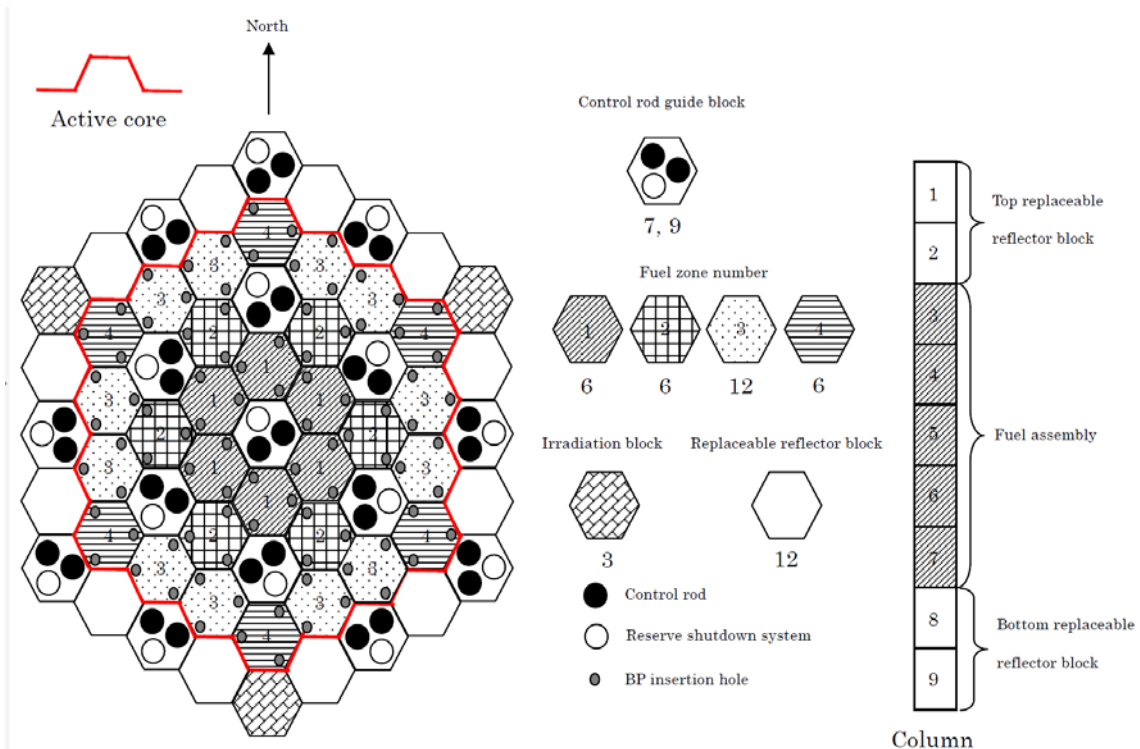
Auf Basis von Informationen zum HTTR im Rahmen des LOFC-Projekts /HTT11/ wurden Serpent-Modelle zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten für den HTTR erstellt.

Abb. 5.19 zeigt die vertikale Ansicht des HTTR und Abb. 5.20 die radiale Kernanordnung. Der aktive Kern mit einer Höhe von 290 cm und einem effektiven Durchmesser von 230 cm besteht aus 30 Brennstoffsäulen und 7 Steuerelement-Führungssäulen. Die Brennstoffsäulen sind 4 konzentrische Brennstoff-Ringzonen gruppiert, siehe Abb. 5.20. Zusätzliche 9 Steuerelement-Führungssäulen sind im austauschbaren Reflektor integriert. Die Brennstoffblöcke gibt es in Ausführungen mit 31 und 33 Bohrungen für Brennstoff-Compacts. Die Anreicherung variiert zwischen 3,30 % und 9,81 %.



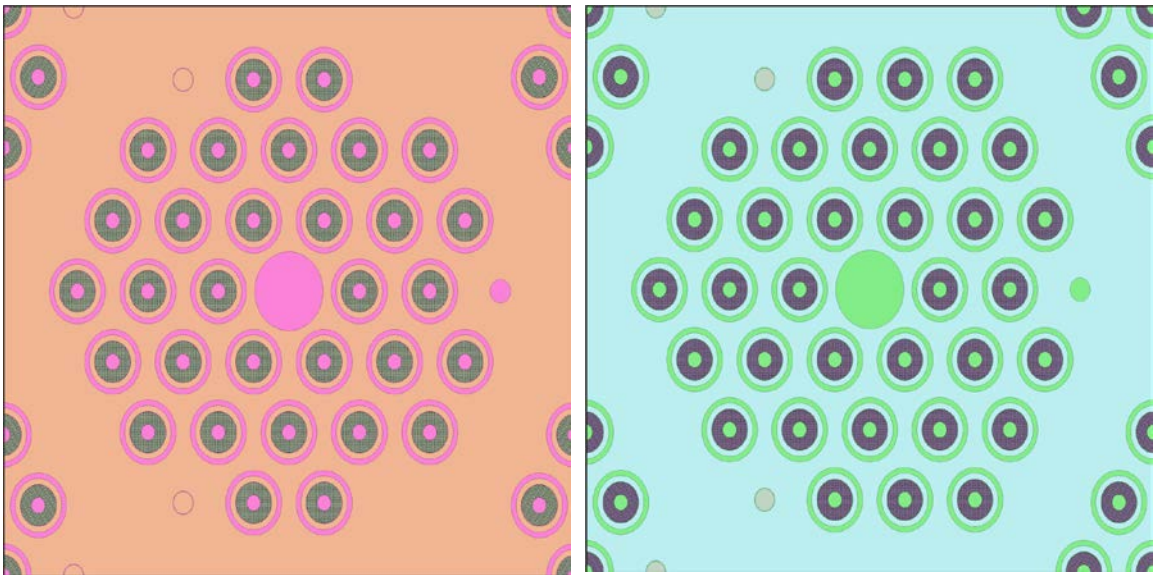
**Abb. 5.19** Vertikale Ansicht des HTTR /HTT11/.



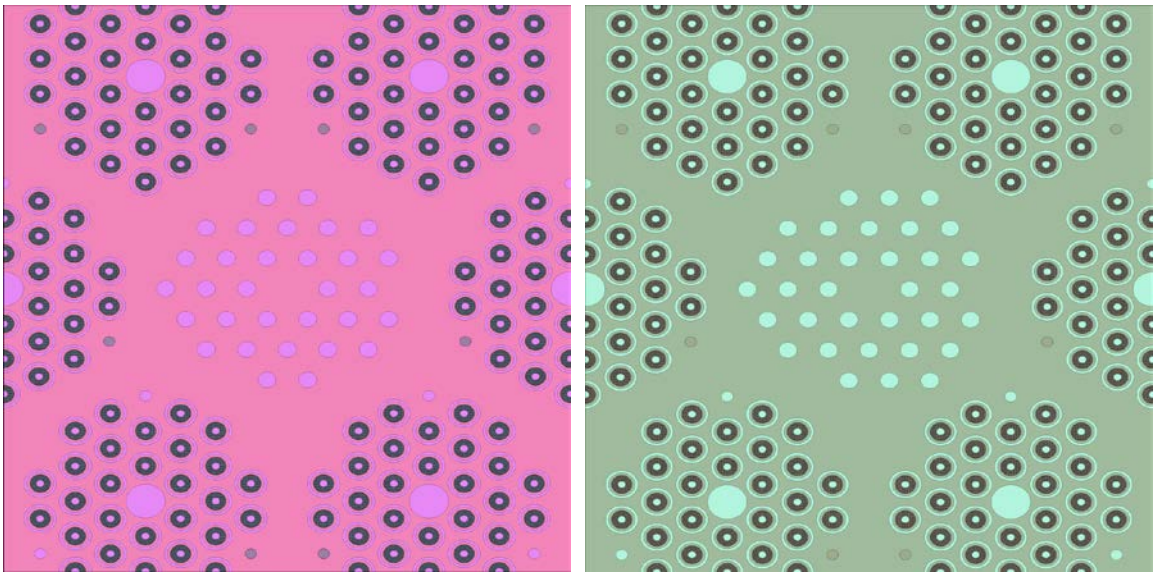


**Abb. 5.20** Radiale Kernanordnung des HTTR mit Darstellung einer Graphitsäule mit Brennstoffblöcken /HTT11/.

Gemäß den verfügbaren Informationen wurde ein Serpent-Modell des HTTR als Prototyp für eine einheitliche Temperatur von 20 °C erstellt. Abb. 5.21 zeigt die Brennstoffblöcke mit 31 und 33 Bohrungen für Brennstoff-Compacts. Die TRISO-Partikel im Brennstoff-Compact sind explizit als kubisches Gitter (lattice type 6) modelliert. Die Modelle für die austauschbaren Reflektortypen sind in Abb. 5.22 wiedergegeben.



**Abb. 5.21** Serpent-Modelle der Brennstoff-Blöcke mit 31 (links) und 33 (rechts) Bohrungen für Brennstoff-Compacts. In zwei der drei kleinen Bohrungen sind Absorberstäbe (Burnable Poison rods, BP) eingesetzt.



**Abb. 5.22** Serpent-Modelle des austauschbaren Reflektors mit 31 (links) und 33 (rechts) Bohrungen und umgebenden Brennstoffblöcken.

Gruppen-Index	Untere Grenze (MeV)	Gruppen-Index	Untere Grenze (MeV)
1	7,41E+03	14	8,32E-03
2	3,68E+03	15	5,04E-03
3	6,72E+02	16	2,38E-03
4	1,11E+02	17	1,29E-03
5	1,93E+01	18	6,50E-04
6	3,36E+00	19	3,50E-04
7	1,59E+00	20	2,00E-04
8	7,49E-01	21	1,20E-04
9	2,75E-01	22	8,00E-05
10	1,30E-01	23	5,00E-05
11	6,14E-02	24	2,00E-05
12	2,90E-02	25	1,00E-05
13	1,37E-02	26	0,00E+00

**Tab. 5.4** Energiegrenzen der 26-Energiegruppen-Struktur.

Unter Verwendung der in Tab. 5.4 angegebenen 26-Energiegruppen-Struktur wurden mit Serpent Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten erstellt, die 116 verschiedene Materialkompositionen in aktivem Kern und Reflektor sowie Steuerelement-Blöcke mit ein- und ausgefahrenen Steuerstäben darstellen. Die Serpent-Ganzzkernrechnung wurde mit ENDF/B-VII.0-Punktdateien und 550 Zyklen mit je 10000 Neutronenschicksalen durchgeführt, wobei die ersten 50 Zyklen verworfen wurden, und liefert einen Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 1,01920 \pm 0,00056$ . Das deterministische 3D-Kernmodell mit DYN3D besteht aus 76 axialen Maschen und berechnet mit den Wirkungsquerschnitten in 26 Energiegruppen einen Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 1,02154$ . Zum Vergleich wurde ein entsprechendes PARCS-Modell erstellt, welches einen Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 1,02115$  liefert.

## **6 AP 4: Thermohydraulik flüssigmetallgekühlter Systeme**

### **6.1 AP 4.1: Weitere Ertüchtigung des Codes ATHLET für die Simulation von Transienten in flüssigmetallgekühlten Reaktoren**

In ATHLET können bisher die Kühlmittel Natrium, Blei und Blei-Wismut-eutektisch (LBE) als flüssige Metalle (LM) ohne Dampfpartialdruck modelliert werden. Da flüssiges Natrium bei Umgebungsdruck bereits bei einer vergleichsweise niedrigen Temperatur von etwa 880 °C verdampft, kann Sieden im natriumgekühlten Reaktorkern nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden. Das Simulationsprogramm ATHLET wurde deshalb erweitert, um das Verdampfen und Kondensieren von Natrium simulieren zu können.

Dazu wurden Sättigungstoffwerte für Natrium implementiert sowie Stoffwerte für Natriumdampf. Es wird das gleiche Verdampfungs- und Kondensationsmodell wie bei Wasser verwendet, wobei Natriumstoffgrößen zum Einsatz kommen. Gleiches gilt für die Berechnung der Reibungsdruckverluste für ein- und zweiphasige Natriumströmung. Für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten an flüssiges Natrium werden wie bisher spezielle Korrelationen für Rohr- bzw. Bündelgeometrien verwendet. Die Bestimmung des Wärmeübergangs an Natriumdampf erfolgt weiterhin mit den Korrelationen für Wasserdampf unter Verwendung von Natriumdampfstoffwerten. Die Modellierung des unterkühltes bzw. gesättigtes Blasensiedens basiert in ATHLET auf der modifizierten Chen Korrelation; da diese für Flüssigmetalle nicht eingesetzt werden kann, können diese Prozesse gegenwärtig nicht dargestellt werden. Ebenso werden die Siedekrise sowie Filmsieden nicht modelliert.

Alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase können innerhalb eines Thermofluid-Systems auch als zweiphasige Mehrkomponentenströmung (LM-Dampf-Gas) modelliert werden. Um die Ablauffähigkeit der Programmerweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse nachzuweisen, wurden erste Testrechnungen durchgeführt, jedoch keine Vergleichsrechnungen mit Experimenten.

Anders als Blei oder LBE siedet flüssiges Natrium bei Umgebungsdruck bereits bei 880 °C, so dass Sieden im natriumgekühlten Reaktorkern nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden kann. Bisher mussten Simulationen mit ATHLET abgebrochen werden, wenn irgendwo im Simulationsgebiet diese Sättigungstemperatur überschritten wurde. Aus diesen Gründen wurde ATHLET dahingehend erweitert, mit einfachen Mo-

dellen das Verdampfen und Kondensieren von Natrium darzustellen. Dazu mussten in ATHLET für das Arbeitsmedium Natrium weitgehend die Programmpfade für zweiphasige Strömung geöffnet werden, wie sie auch für Wasser durchlaufen werden. Zunächst werden weitgehend die für Wasser entwickelten Modelle eingesetzt. In späteren Entwicklungsschritten sollen diese Modelle – soweit erforderlich – sukzessive durch speziell für Natrium geeignete Modelle ersetzt werden.

### 6.1.1 Stoffwerte für flüssiges und dampfförmiges Natrium

Der kritische Punkt von Natrium liegt nach /ARG95/ bei etwa 25.6 MPa und 2504 K. Der in natriumgekühlten Reaktoren zu erwartende Zustandsbereich liegt auch unter Störfallbedingungen bei  $p < 1$  MPa und  $T < 1000$  K und somit weit entfernt vom kritischen Punkt. Dies erleichtert die Bestimmung der Stoffwerte insofern, als die Druckabhängigkeit der Flüssigkeitsstoffwerte vernachlässigt werden kann. Nichtsdestotrotz wird – um den Anforderungen des ATHLET-Gleichungssystems Rechnung zu tragen – die Kompressibilität der flüssigen Phase grob berücksichtigt.

Wenn nicht anders erwähnt, wurden die Natriumstoffwerte dem Bericht /ARG95/ entnommen.

#### 6.1.1.1 Sättigungstoffwerte

In /ARG95/ wird der Sättigungsdruck (Dampfdruck) von Natrium als Funktion der Flüssigkeitstemperatur angegeben:

$$\ln p = 11.9463 - \frac{12633.73}{T} - 0.4672 \ln T$$

p	Druck	[Mpa]
T	Temperatur	[K]

Da diese logarithmische Funktion nicht nach T aufgelöst werden kann, wird diese zur effizienten, stetigen und stetig differenzierbaren Bestimmung der Sättigungstemperatur als Funktion des Drucks mit Hilfe des Fortran77 Programmpakets SPLINE /SPLINE/ im Bereich zwischen 600 K und 2475 K und somit für Drücke zwischen ca. 5 Pa und 24 MPa durch kubische Splines approximiert. Das Programmpaket wird auch zur Laufzeit

von ATHLET für die Bestimmung der Sättigungstemperatur sowie der partiellen Ableitung  $\frac{\partial T'}{\partial p}$  eingesetzt

Die Stoffgrößen Dichte und spezifische Enthalpie für Flüssigkeit und Dampf an der Sättigungslinie werden anschließend mit Polynomen für p und T' berechnet.

### 6.1.1.2 Thermodynamische Stoffwerte für flüssiges und dampfförmiges Natrium

#### Spezifische Enthalpie (flüssig)

$$h_l(T) - h_s(298.15) = -365.77 + 1.6582 T - 4.2395 \cdot 10^{-4} T^2 + 1.4847 \cdot 10^{-7} T^3 + 2992.6 T^{-1}$$

spezifische Enthalpie [kJ/kg]

Temperatur [K]

$h_s(298.15)$  spezifische Enthalpie bei 25 °C = 280.99 kJ/kg /COD89/

Spezifische Sättigungsenthalpie

$h' = h_l(T')$

Spezifische Wärmekapazität

$$c_{p,l}(T) = 1.6582 - 8.479 \cdot 10^{-4} T + 4.4541 \cdot 10^{-7} T^2 - 2992.6 T^{-2}$$

#### Verdampfungswärme

$$\Delta h_g(T') = 393.37 \left(1 - \frac{T'}{T_C}\right) + 4398.6 \left(1 - \frac{T'}{T_C}\right)^{0.29302}$$

$\Delta h_g$  Spez. Verdampfungswärme [kJ/kg]

T' Sättigungstemperatur [K]

T<sub>C</sub> kritische Temperatur [K]

### Spezifische Enthalpie (Dampf)

Spezifische Sättigungsenthalpie

$$h'' = h' + \Delta h_g(T')$$

Spezifische Wärmekapazität

Dem Bericht /GIE80/ wurde das Polynom zur Bestimmung der spezifischen Wärmekapazität für Natriumdampf entnommen:

$$c_{p,g}(T) = 2141. - 22.40 T + 7.979 \cdot 10^{-2} T^2 - 1.062 \cdot 10^{-4} T^3 + 6.787 \cdot 10^{-8} T^4 - 2.113 \cdot 10^{-11} T^5 + 2.583 \cdot 10^{-15} T^6$$

Integriert man  $c_p$  über  $T$ , so erhält man die spezifische Enthalpie von Natriumdampf:

$$h_g(T) = 2141.0 T - 11.2 T^2 + 2.65967 \cdot 10^{-2} T^3 - 2.655 \cdot 10^{-5} T^4 + 1.3574 \cdot 10^{-8} T^5 - 3.52167 \cdot 10^{-12} T^6 + 3.690 \cdot 10^{-16} T^7 + C$$

Die Integrationskonstante  $C$  wird so bestimmt, dass  $h_g(T') = h''$ :

$$C = h'' - h_g(T') \text{ mit } h'' = h' + \Delta h_g(T')$$

$$c_p \quad \text{in} \quad [\text{J/kg/K}]$$

$$h \quad \text{in} \quad [\text{J/kg}]$$

### Dichte (flüssig)

Aus /GIE80/:

Kompressibilität

$$\kappa|_T = 1.25 \cdot 10^{-10} + 1.7 \cdot 10^{-13} T + 1.8 \cdot 10^{-16} (T - 400.0)^2$$

Dichte bei 1 bar:

$$\rho_l|_{1 \text{ bar}} = 1004.0 - 0.2139 T - 1.105 \cdot 10^{-5} T^2$$

Dichte:

$$\rho_l = \rho_l|_{1 \text{ bar}} + \rho_l|_{1 \text{ bar}} \cdot (p - 1.0 \cdot 10^5) \cdot \kappa|_T$$

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial T} = -0.2139 - 2.21 \cdot 10^{-5} T$$

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial p} = \rho_l \kappa|_T$$

$\rho_l$  in [kg/m<sup>3</sup>]

T in [K]

### Dichte (Dampf)

Aus /GIE80/:

$$\rho_g = p \left( -7.446 + \frac{4144.}{T} + 0.01377 T - 1.083 \cdot 10^{-5} T^2 + 3.89 \cdot 10^{-9} T^3 - 4.922 \cdot 10^{-13} T^4 \right)$$

p in [MPa]; die in /GIE80/ angegebene Einheit [Pa] ist offensichtlich nicht korrekt.

Aus der idealen Gasgleichung:

$$\rho_g = \frac{p}{R_g T}$$

werden die partiellen Ableitungen hergeleitet:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial p} = \frac{1}{R_g T}$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial T} = -\frac{p}{R_g T^2}$$

$R_g$  spezifische Gaskonstante = 361.65 J/kg/K

### **6.1.1.3 Transportgrößen für flüssiges und dampfförmiges Natrium**

#### Spezifische Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität als Transportgröße wird wie die thermodynamische Grundgröße in Kap. 6.1.1.2 beschrieben berechnet.



### Dynamische Viskosität

Die dynamische Viskosität von flüssigem Natrium wird nach /GIE80/ berechnet:

$$\eta_l = 3.24 \cdot 10^{-3} e^{\frac{508.0}{T}} \cdot T^{-0.4925}$$

Die dynamische Viskosität von Natriumdampf wird mangels geeigneter Korrelation als mittlerer Wert aus /VAN14/ konstant vorgegeben:

$$\eta_g = 6.0 \cdot 10^{-6}$$

### Wärmeleitfähigkeit

Flüssiges Natrium /ARG95/:

$$\lambda_l = 124.67 - 0.11381 T + 5.5226 \cdot 10^{-5} T^2 - 1.1842 \cdot 10^{-8} T^3$$

Die Wärmeleitfähigkeit von Natriumdampf wird mangels geeigneter Korrelation als mittlerer Wert aus /ARG95/ konstant vorgegeben:

$$\lambda_g = 0.04$$

### Oberflächenspannung

Nach /ARG95/:

$$\sigma = 240.5 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1.126}$$

Die Formelzeichen bedeuten:

$c$	Schallgeschwindigkeit	[m/s]
$c_p$	spez. Wärmekapazität	[J/kg/K]
$h$	spez. Enthalpie	[J/kg]
$p$	Druck	[Pa]
$r$	Verdampfungswärme	[J/kg]
$T$	Temperatur	[K]
$v$	spez. Volumen	[m <sup>3</sup> /kg]
$\eta$	dynamische Viskosität	[kg/s m]
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	[W/m K]
$\kappa _T$	isotherme Kompressibilität	[1/Pa]
$\rho$	Dichte	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma$	Oberflächenspannung	[N/m]

#### 6.1.1.4 Grafische Darstellung der Stoffwerte

Die folgenden Bilder zeigen die Stoffwerte für flüssiges und dampfförmiges Natrium, wie sie in ATHLET implementiert worden sind. Dargestellt werden die thermodynamischen Stoffwerte, die Transportgrößen sowie einige der erforderlichen partiellen Ableitungen.

### 6.1.1.4.1 Sättigungststoffwerte

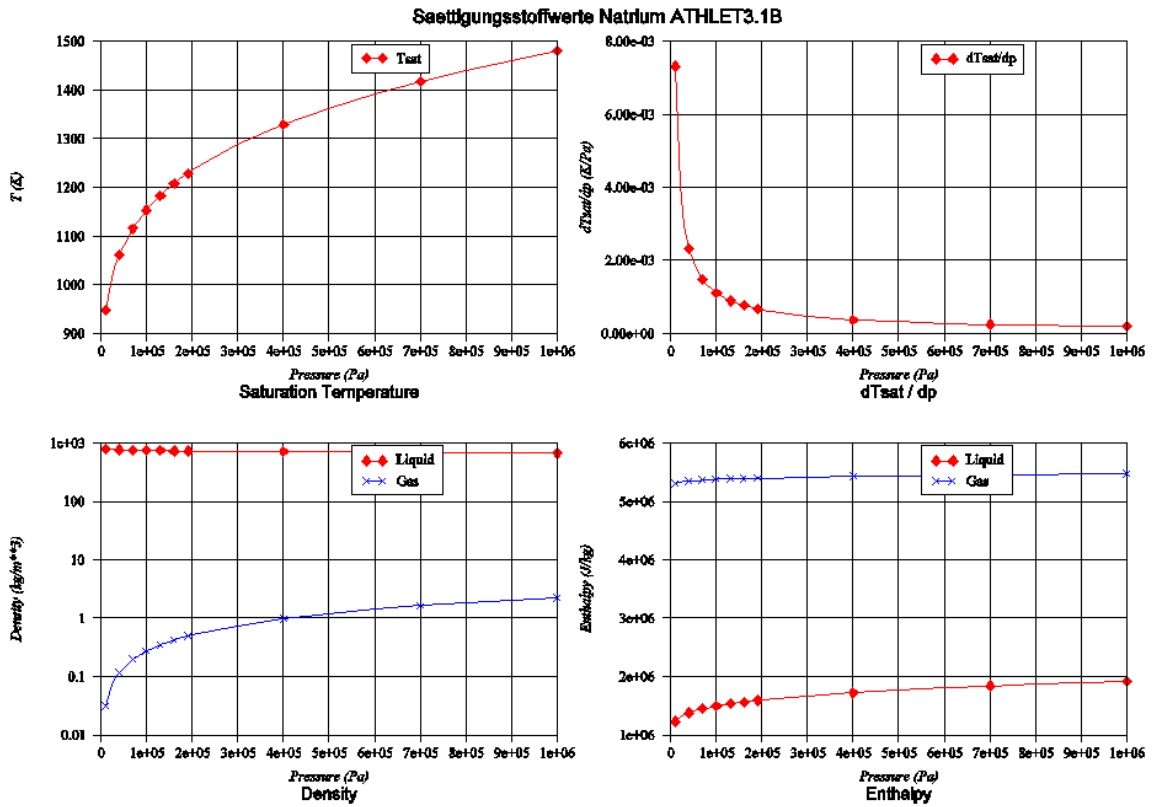


Abb. 6.1 Sättigungststoffwerte als Funktion des Drucks (1).

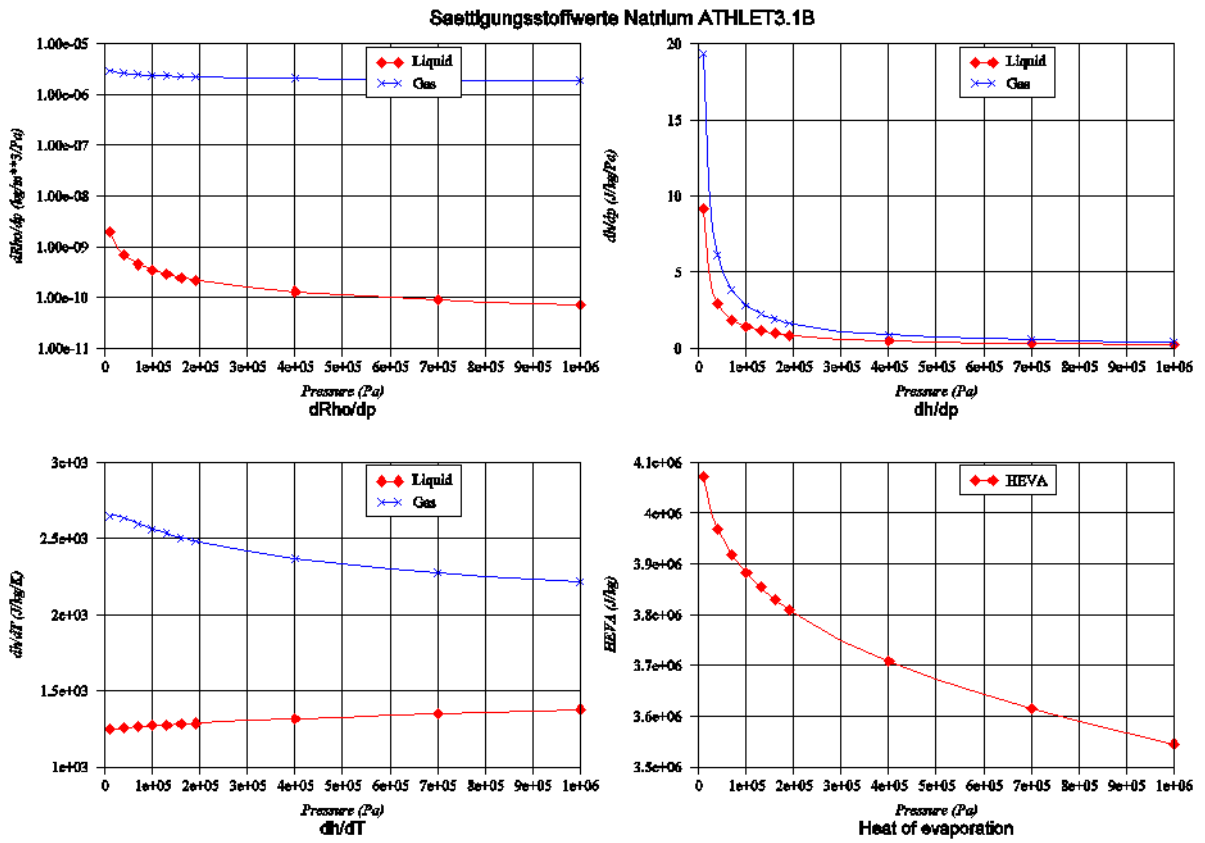


Abb. 6.2 Sättigungswerte als Funktion des Drucks (2).

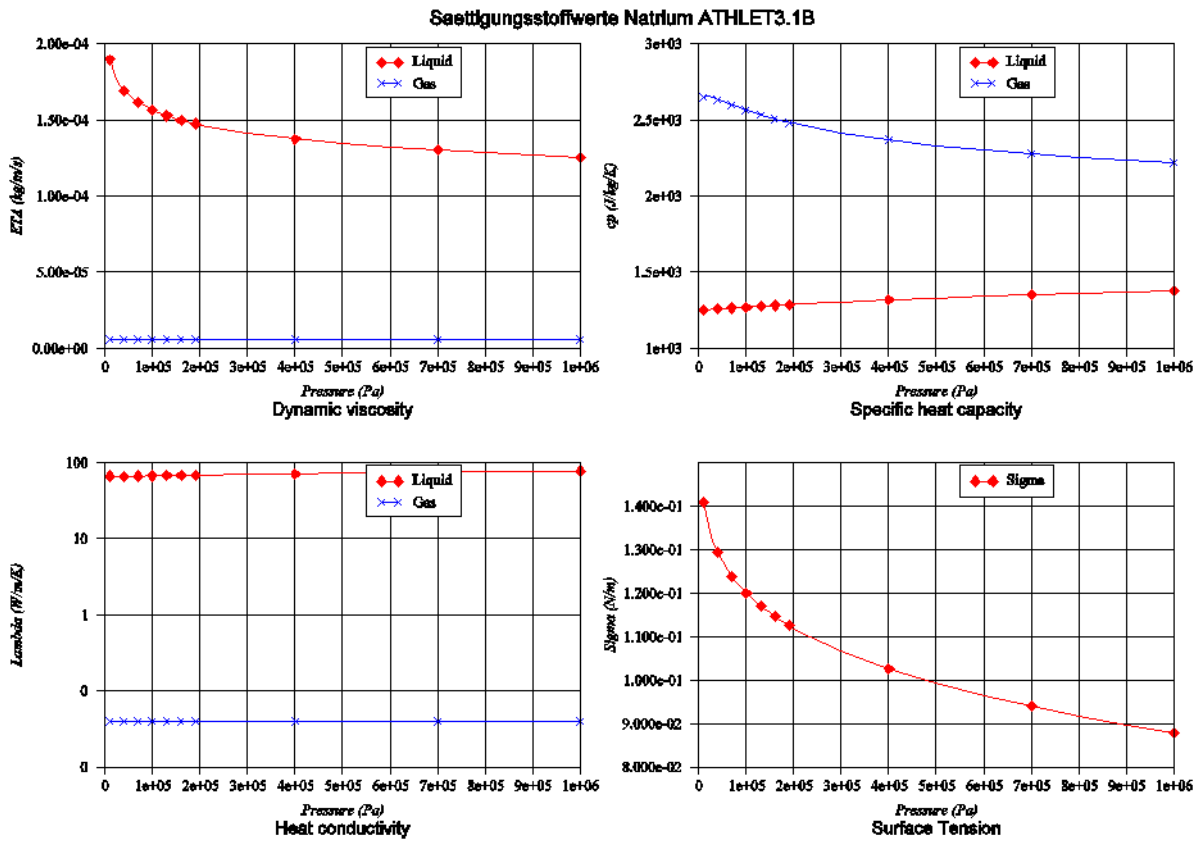


Abb. 6.3 Sättigungsstoffwerte als Funktion des Drucks (3).

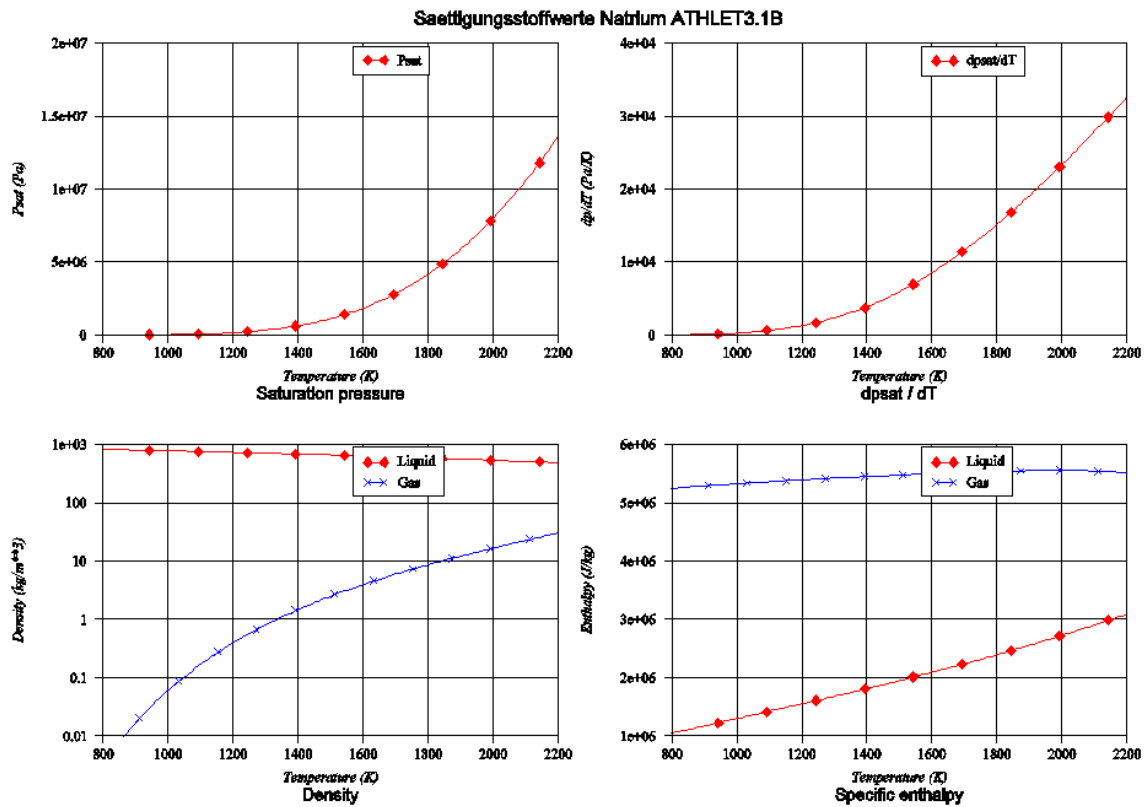
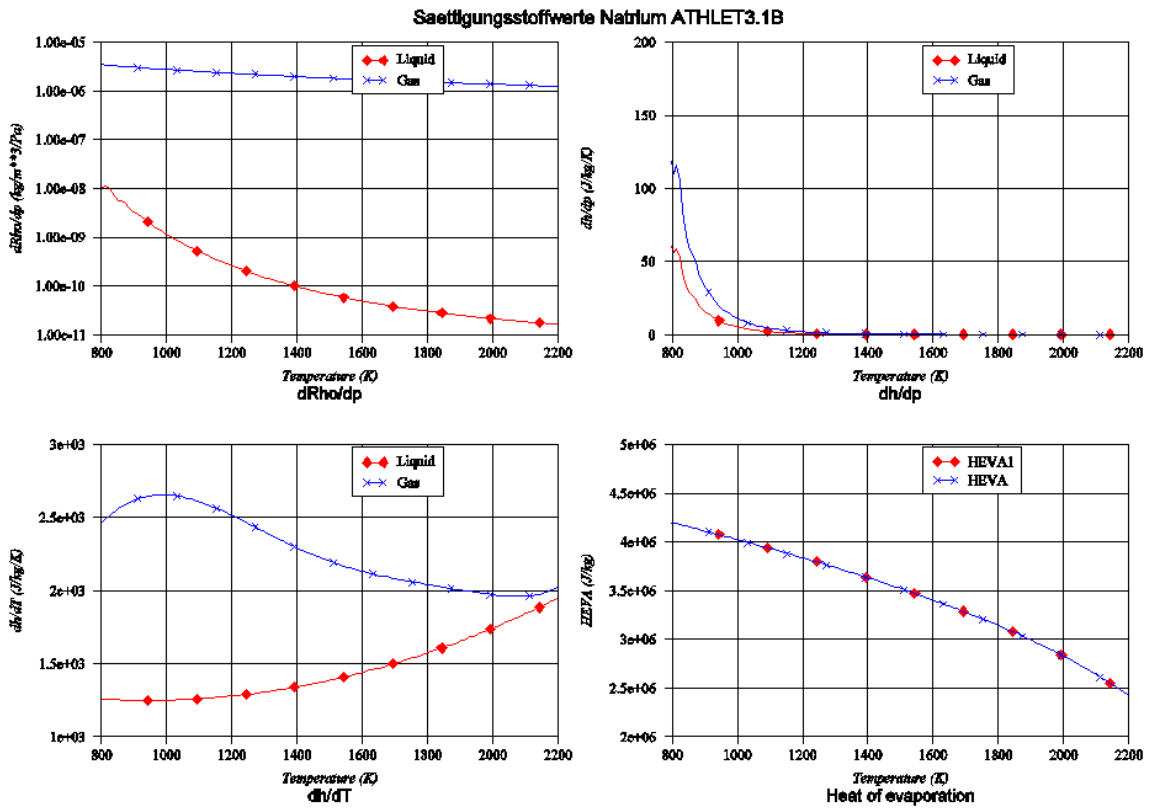
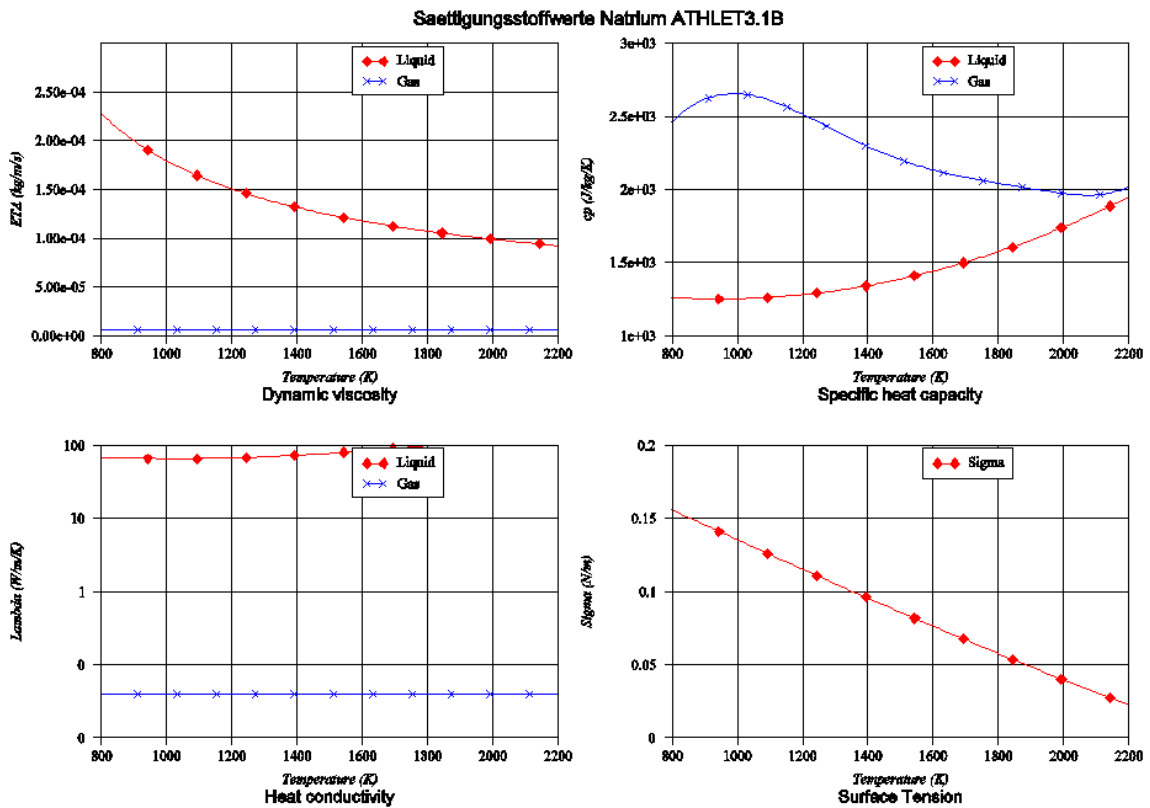


Abb. 6.4 Sättigungsstoffwerte als Funktion der Temperatur (1).



**Abb. 6.5** Sättigungswerte als Funktion der Temperatur (2).



**Abb. 6.6** Sättigungswerte als Funktion der Temperatur (3).

### 6.1.1.4.2 Thermodynamische Stoffwerte für flüssiges und dampfförmiges Natrium

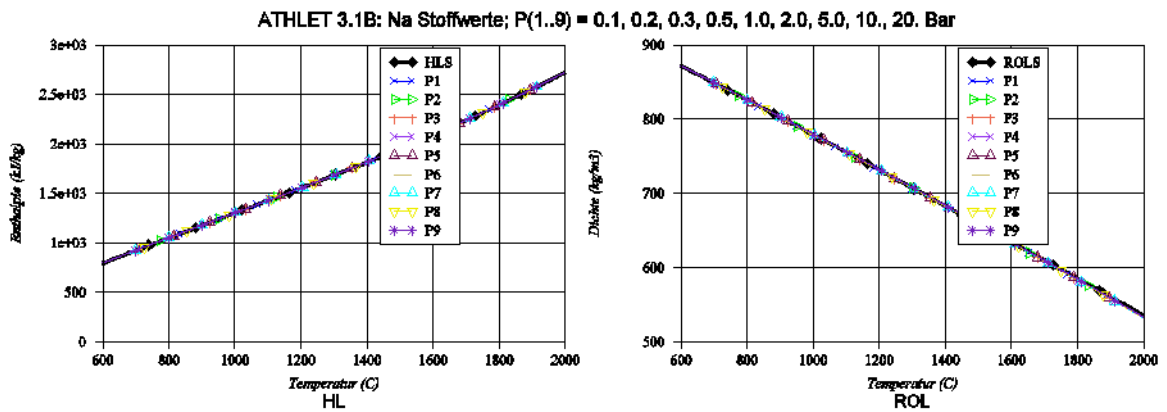


Abb. 6.7 Thermodynamische Flüssigkeitsstoffwerte als Funktion der Temperatur.

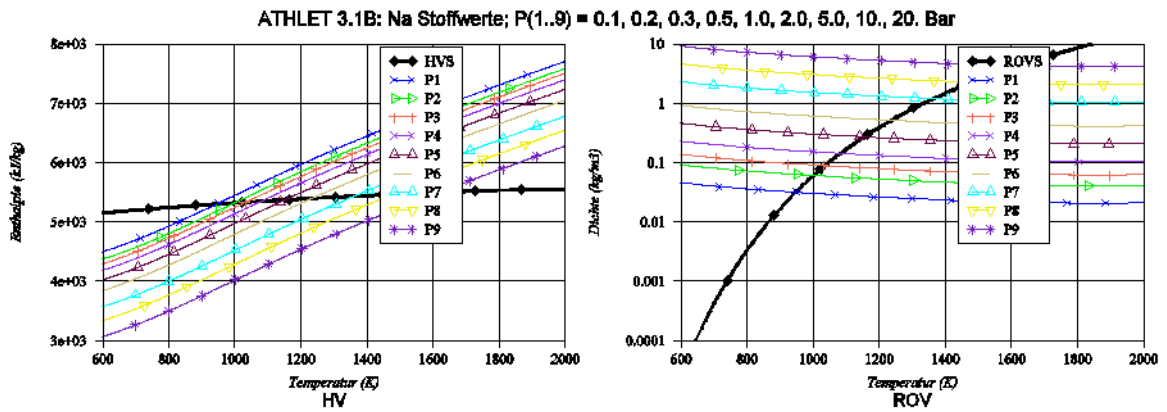


Abb. 6.8 Thermodynamische Dampfstoffwerte als Funktion der Temperatur.

### 6.1.1.4.3 Transportgrößen für flüssige und dampfförmiges Natrium

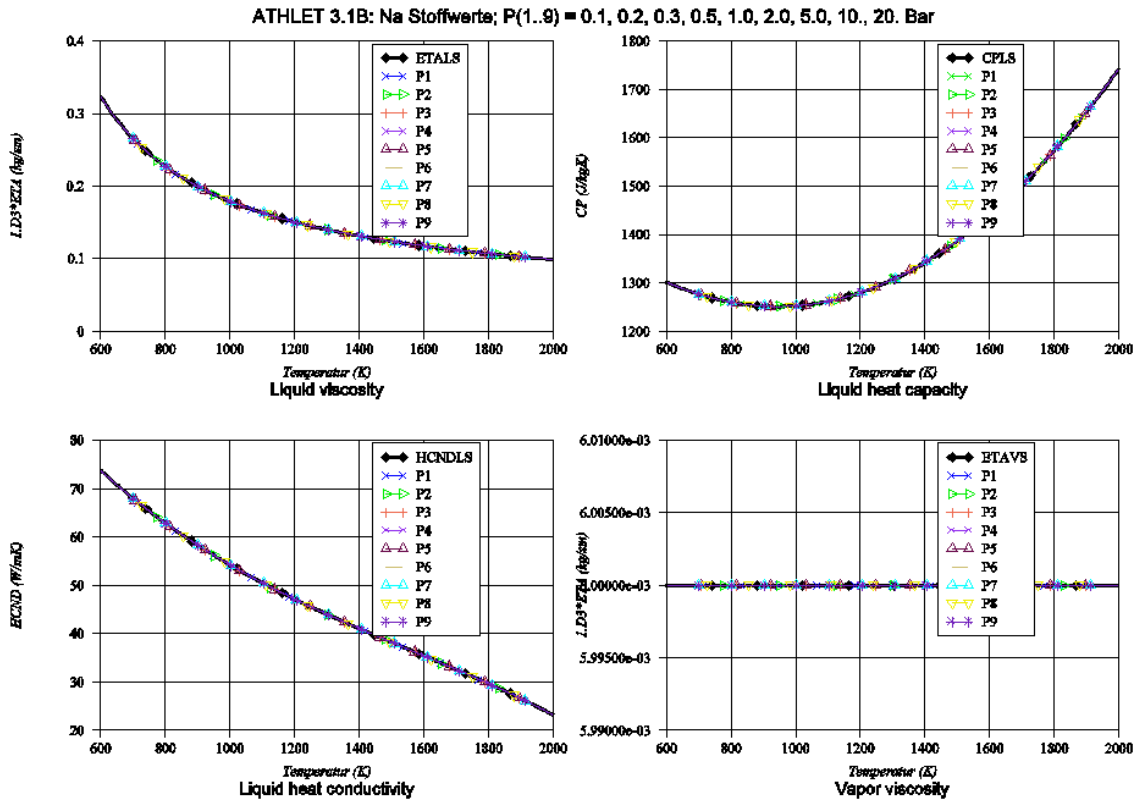


Abb. 6.9 Natrium-Transportgrößen (1).



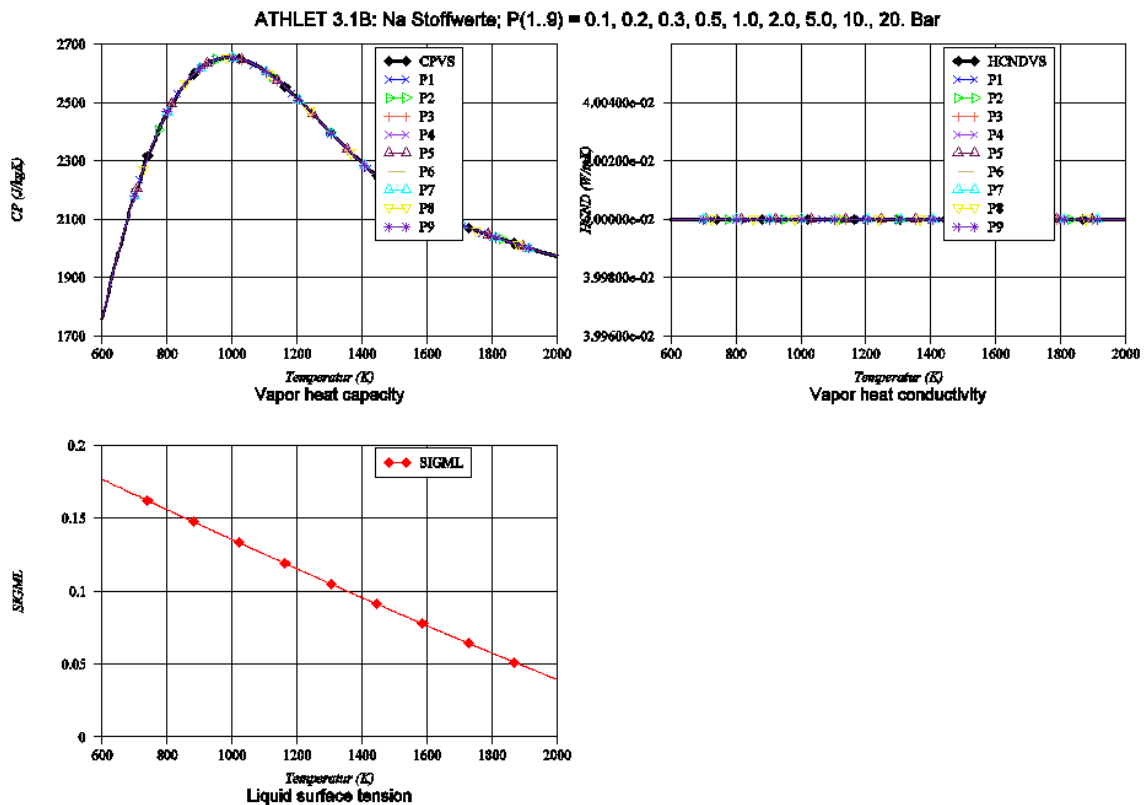


Abb. 6.10 Natrium-Transportgrößen (2).

### 6.1.2 Modellierung nichtkondensierender Gase

Auch Flüssigmetall-gekühlte Reaktoren brauchen eine Vorrichtung, die dem Kühlsystem einen erhöhten Druck aufprägt. Anders als im wassergekühlten Reaktor, wo hierzu Kühlmittel zum Sieden gebracht wird, wird hier über ein Polstergas die Druckhaltung geregelt. Deshalb wurde ATHLET so modifiziert, dass auch für die Flüssigmetalle das Mehrkomponentenmodell (MC-Modell) eingesetzt werden kann. Ebenso steht das Gemischspiegelmodell zur Verfügung. Damit kann man einen Druckhalter (Ausgleichsbehälter) modellieren, der teilweise mit Blei, LBE oder Natrium gefüllt ist und darüber eines der in ATHLET verfügbaren nichtkondensierende Gase enthält. Entleert sich der Druckhalter infolge eines Druckverlustes (z. B. beim Kühlmittelverluststörfall), so kann das Polstergas in den Kühlkreislauf gelangen und sich dort verteilen. Der Transport und die Konzentration des Gases in hochliegenden Anlagenteilen kann mit ATHLET berechnet werden.

Das Modell unterscheidet sich in folgenden Punkten vom MC-Modell mit Wasser:

- Der Dampfpartialdruck der Flüssigmetalle ist Null.

- Zwischen Flüssigmetall und Gas wird kein Massenaustausch berechnet (auch nicht an einem Gemischspiegel).
- In homogenen Kontrollvolumen mit Flüssigmetall und Gas wird mit Hilfe eines vereinfachten Modells ein Wärmestrom zwischen den beiden Komponenten berechnet:

$$Q = A_{IP} HTC_{IP} (TL_i - TV_i)$$

$$A_{IP} = 6.0 \frac{V_i}{d_B} \alpha_i (1 - \alpha_i)$$

$$HTC_{IP} = 0.023 \frac{\lambda_V}{d_{hyd}} Re^{0.8} Pr^{0.4}$$

mit

Q	Wärmestrom vom Flüssigmetall zum Gas	[W]
A <sub>IP</sub>	Zwischenphasenfläche	[m <sup>2</sup> ]
HTC <sub>IP</sub>	Wärmeübergangskoeffizient an der Zwischenphasenfläche	[W/m <sup>2</sup> K]
TL <sub>i</sub>	Flüssigkeitstemperatur im Kontrollvolumen	[°C]
TV <sub>i</sub>	Dampf(Gas)temperatur im Kontrollvolumen	[°C]
V <sub>i</sub>	Volumen des Kontrollvolumens	[m <sup>3</sup> ]
d <sub>B</sub>	Blasen- / Tropfendurchmesser	[m]
	(Vorläufig festgelegter Wert: 0.01m)	
d <sub>hyd</sub>	Hydraulischer Durchmesser	[m]
Re	Reynolds-Zahl	[-]
Pr	Prandtl-Zahl	[-]
α <sub>i</sub>	Volumendampfgehalt im Kontrollvolumen	[-]
λ <sub>V</sub>	Wärmeleitfähigkeit des Dampfes	[W/m K]

- Am Gemischspiegel (ML) wird ein Wärmestrom zwischen Flüssigmetall und Gaspolster berechnet:

$$Q_{ML} = A_{ML} HTC_{ML} (TL_i - TV_{io})$$

mit

Q <sub>ML</sub>	Wärmestrom vom unteren zum oberen ML-Teilvolumen	[W]
-----------------	--	-----

$A_{ML}$	ML-Oberfläche	[m <sup>2</sup> ]
$HTC_{ML}$	Wärmeübergangskoeffizient am ML (gegenwärtig festgelegter Wert: 20 W/m <sup>2</sup> K)	[W/m <sup>2</sup> K]
$TL_i$	Flüssigkeitstemperatur im unteren ML-Teilvolumen	[°C]
$TV_{io}$	Dampf(Gas)temperatur im oberen ML-Teilvolumen	[°C]

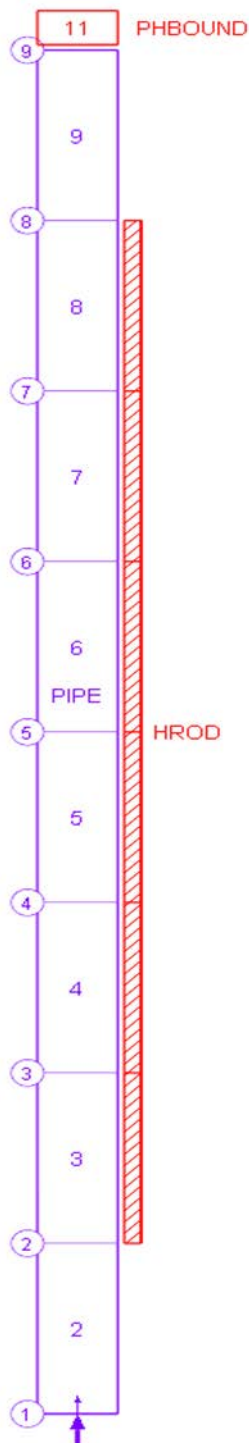
Diese sehr einfachen Wärmeaustauschmodelle sollen lediglich gewährleisten, dass sich Temperaturunterschiede zwischen Flüssigmetall und Gas abbauen. Insgesamt ist das MC-Modell in Verbindung mit Flüssigmetall gegenwärtig nicht als ausgereiftes und validiertes Modell zu verstehen. Bei Bedarf – falls diese Strömungsvorgänge realistisch simuliert werden sollen – müssen auch noch das Driftmodell sowie die Modelle für Wand- und Zwischenphasenreibung ertüchtigt werden.

### 6.1.3 Wärmeübergangsmodell

Die hier betrachteten Flüssigmetalle unterscheiden sich von Wasser vor Allem durch die erheblich höhere Wärmeleitfähigkeit und Dichte (nicht Natrium) sowie die wesentlich geringere spezifische Wärmekapazität und kinematische Viskosität. Daraus resultiert eine Prandtl-Zahl, die deutlich unter eins liegt (Wasser:  $\sim 10 \dots 1$ ). Die Prandtl-Zahl ist eine wichtige dimensionslose Kennzahl zur Beschreibung des konvektiven Wärmetransportes. Sie beschreibt das Verhältnis des Impulstransports zum Wärmetransport. Wasser und Flüssigmetalle unterscheiden sich deutlich hinsichtlich des konvektiven Wärmetransports, so dass die für Wasser entwickelten Wärmeübergangskorrelationen nicht eingesetzt werden können.

#### Siedekrise

Um zu verhindern, dass ATHLET DNB oder Dryout berechnet, wurde für die Flüssigmetalle die minimale Filmsiedetemperatur auf 10000 °C hoch- und die maximale Wiederbenetzungstemperatur auf 0 °C herabgesetzt.



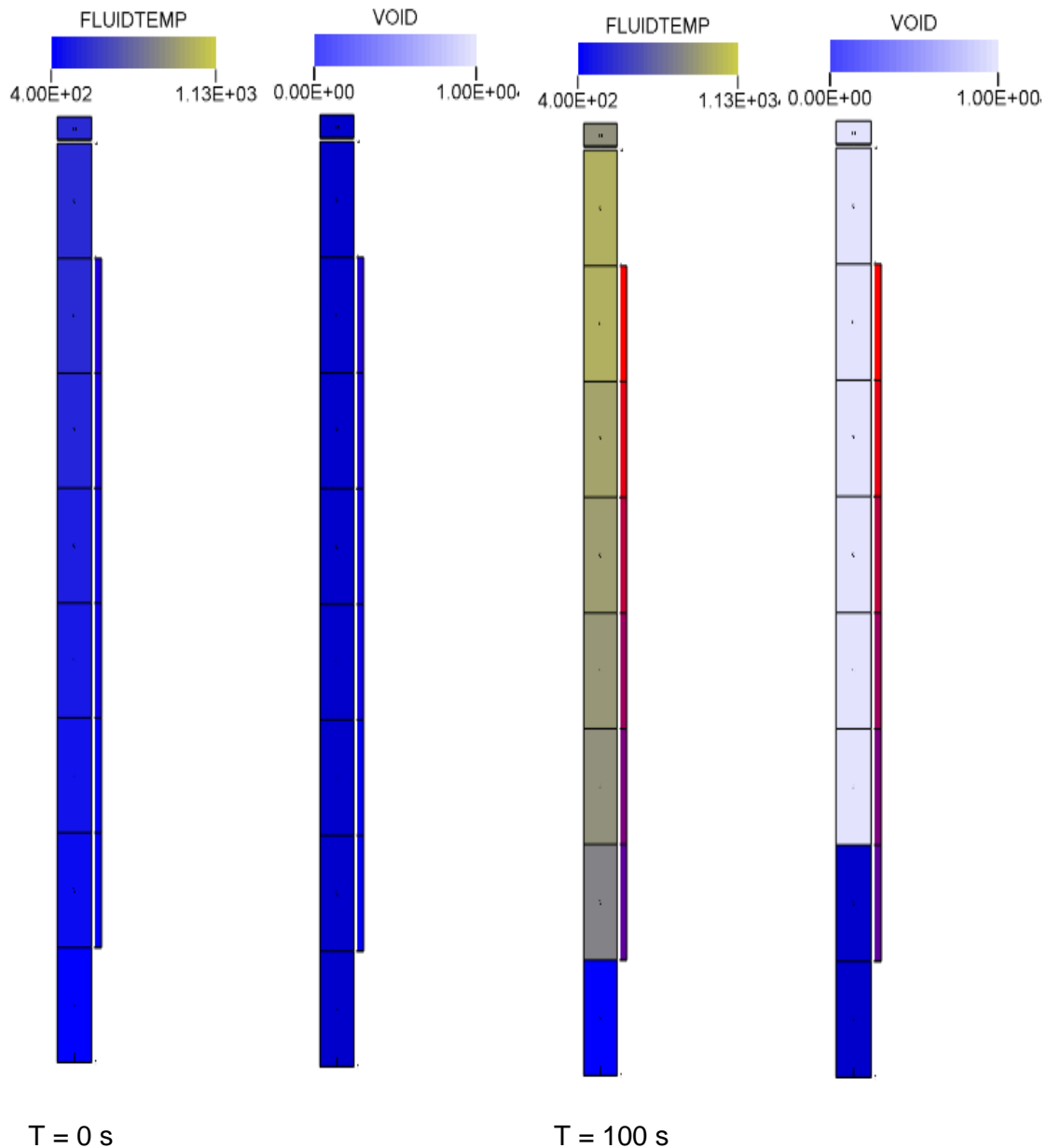
### 6.1.4 Erste Testrechnungen

Die im Folgenden beschriebenen Testrechnungen dienen lediglich zur Überprüfung der Programmerweiterungen hinsichtlich der Ablauffähigkeit und der Plausibilität der Ergebnisse. Die Validierung muss noch anhand von Versuchsnachrechnungen erfolgen.

**Abb. 6.11:** Nodalisierung des Testfalls PIPE.

Als erster Testfall PIPE (Abb. 6-11) wurde ein beheiztes Pipe simuliert, dessen geometrische Eckdaten etwa einem Brennelement entsprechen. Am unteren Ende des Pipes wird mittels einer Fill-Komponente flüssiges Natrium mit konstant 400 °C eingespeist, am oberen Ende sorgt das ‚time-dependent-volume‘ PHBOUND für einen konstanten Druck von ca. 1.5 bar. Die über die Brennstäbe HROD zugeführte Leistung heizt das Kühlmittel im stationären Zustand auf 550°C auf. Mit Beginn der Transiente wird der Durchsatz linear reduziert, so dass bei konstanter Heizleistung die Aufheizspanne des Natriums zunimmt und bei etwa 75 s die Sättigungstemperatur erreicht wird. Da der Durchsatz weiterhin abnimmt, beginnt nun das Kühlmittel zu siedeln.

Abb. 6.11 zeigt die Natriumtemperatur und den Volumendampfgehalt sowie die Brennstabtemperatur (Temperaturskala nicht im Bild) zu Beginn der Simulation (links) und bei  $T = 100$  s.



**Abb. 6.12** Kühlmitteltemperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE

Als zweiter Testfall wurden Simulationen zum natriumgekühlten Reaktorkonzept ASTRID durchgeführt (Text und Graphiken folgen).

### 6.1.5 Zusammenfassung und weiteres Vorgehen

ATHLET enthält Modelle und Verfahren, um das thermohydraulische Verhalten der Flüssigmetalle Blei, LBE und Natrium im typischen Anwendungsbereich entsprechender Reaktoren zu simulieren. Bisher konnte nur einphasiges Flüssigmetall modelliert werden, so dass die Rechnungen immer dann abgebrochen werden mussten, wenn

das Kühlmittel irgendwo im Simulationsgebiet die Sättigungstemperatur erreicht hatte. Da Natrium bei Umgebungsdruck bereit bei einer vergleichsweise niedrigen Temperatur von ca. 880 °C siedet, kann nicht sichergestellt werden, dass das Kühlmittel in einem Reaktorkern auch unter Störfallbedingungen einphasig und unterkühlt bleibt.

ATHLET wurde deshalb so erweitert, dass Natrium beim Überschreiten der nun druckabhängigen Sättigungstemperatur verdampfen kann. Dazu wurden Korrelationen zur Berechnung der erforderlichen Stoffwerte implementiert. Des Weiteren wurden die entsprechenden Programmteile dahingehend modifiziert, dass Natrium hinsichtlich der Zweiphasenströmung nicht mehr wie Flüssigmetall sondern weitgehend wie Wasser behandelt wird.

Für die Modellierung der *Zweiphasenströmung* werden ausnahmslos die in ATHLET vorhandenen Modelle für Wasser verwendet, lediglich die dabei eingesetzten Stoffgrößen stammen von Natrium. (Für den Wärmeübergang an einphasiges flüssiges Natrium stehen spezielle Korrelationen zu Verfügung.)

Die Ablauffähigkeit der Programmerweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse wurden an Hand einfacher Testfälle überprüft. Die eigentliche Validierung der neuen Modelle muss noch anhand einschlägiger Versuche bzw. durch Vergleichsrechnungen mit anderen Rechenprogrammen erfolgen.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die hier durchgeführten Entwicklungsarbeiten nur einen ersten Schritt darstellen, um das Sieden von Natrium im Grundsatz in ATHLET modellieren zu können. Der Bedarf an weiteren Modellverbesserungen – insbesondere bei den Wärmeübergangs- und Druckverlustmodellen - ist bereits jetzt absehbar.

## **6.2 AP 4.2: Anwendung des CFD-Codes OpenFOAM zur Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in flüssigmetallgekühlten Anlagen**

In den letzten Jahren hat die GRS bereits OpenFOAM eingesetzt, um Strömungsvorgänge im Primärkreis von Druckwasserreaktoren zu simulieren. Dabei wurden verschiedene Experimente der ROCOM-Versuchsanlage im Rahmen des ATHLET-Validierungsprojekts RS1195 nachgerechnet. Die Simulationsergebnisse wurden mit den Ergebnissen der Versuche sowie mit Simulationsergebnissen von ANSYS CFX

verglichen /AUS13/, /HEJ13/. Die damaligen Ergebnisse haben gezeigt, dass OpenFOAM die zu simulierenden physikalischen Phänomene qualitativ gut wiedergeben konnte. Allerdings war es mit der damals verfügbaren Version von OpenFOAM nicht möglich, das gleiche Rechengitter zu verwenden wie für die Simulationen mit CFX, da es zu Abbrüchen der Rechnung kam. Deshalb wurde in diesem Projekt ein weiterer Versuch der ROCOM Versuchsanlage nachgerechnet. Mit der aktuellen Version konnte dabei auch dasselbe Rechengitter verwendet werden, das in RS1195 für die Simulationen mit Hilfe von ANSYS CFX verwendet wurde.

Als nächster Schritt zur Validierung von OpenFOAM für Simulation von Strömungen in Gen IV-Reaktoren wurden Simulationen durchgeführt, wobei für das Fluid die Stoffwerte von Blei/Wismut-Legierungen (LBE) vorgegeben wurden. Es wurden dabei die gleichen Rechenvorschriften verwendet wie sie auch in ATHLET zum Einsatz kommen /WEN13/.

Weiterhin wurde eine Kopplungsschnittstelle für einphasige Strömungen zwischen OpenFOAM und ATHLET geschaffen, die zunächst an einfachen Beispielen validiert wurde. Abschließend wurde ein Experiment, das an der TALL-Versuchsanlage durchgeführt worden war /GR115/, mit Hilfe einer gekoppelten ATHLET-OpenFOAM-Simulationen nachgerechnet.

Im Rahmen dieses Projekts entstand auch eine Diplomarbeit für den Studiengang Energie- und Umwelttechnik der Hochschule Zittau/Görlitz /WEN13/ und eine Masterarbeit, betreut durch den Lehrstuhl für Nukleartechnik der TU München /RIV14/. Im Rahmen dieser Arbeiten wurden Teile der notwendigen Programmierarbeiten und Verifikations- sowie Validierungsrechnungen durchgeführt.

### **6.2.1 Ausbau der OpenFOAM-Kompetenz**

In diesem Arbeitspunkt sollen die Grundlagen für die Kopplung des CFD-Codes OpenFOAM mit dem Systemcode ATHLET geschaffen werden. Zum Ausbau der Kompetenz in der Anwendung von OpenFOAM wurde zusätzlich zu der bereits durchgeführten Simulation eines Versuchs an der ROCOM-Versuchsanlage /AUS13/ eine weitere Nachrechnung eines Experimentes mit OpenFOAM geplant.

Im Rahmen des PKL III Projekts /KLI15/ wurde vor Abbau der ROCOM-Versuchsanlage noch ein Experiment durchgeführt. Dieser Versuch 2.3 wurde mit Hilfe von OpenFOAM nachgerechnet. Im Gegensatz zu den Simulationen mit Hilfe von OpenFOAM aus /AUS13/ wurde die hier beschriebene Simulation mit einem Rechengitter durchgeführt, das nicht nur die kalten Stränge des Primärkreises und den Downcomer des Reaktordruckbehälters beinhaltet, sondern auch das untere Plenum inklusive der Siebtonne und (vereinfachte) Kernkanäle.

Mit der OpenFOAM Version 2.0.x, die in /AUS13/ verwendet wurde, war es nicht möglich, Simulationen auf diesem Gitter durchzuführen, da es zu einem Abbruch der Rechnungen wegen numerischer Instabilitäten kam. Der Grund für die Probleme lag sehr wahrscheinlich in der schlechten Qualität der Gitterzellen des Rechengitters im Bereich der Siebtonne. Aufgrund der komplexen Geometrie im Bereich des unteren Plenums und insbesondere der Siebtonne konnte das Rechengitter in diesem Teil der Geometrie nur mit Hilfe von automatisch generierten Tetraedern erstellt werden. Dieser Teil des Rechengitters besitzt aber eine schlechtere Qualität als die manuell erstellten Bereiche, die aus Hexaedern bestehen.

Mit der aktuellen Version 3.0.1 von OpenFOAM lassen sich nun Simulationen auf dem gesamten Rechengbiet durchführen, ohne dass es zu numerischen Instabilitäten kommt.

#### **6.2.1.1 Beschreibung der ROCOM-Versuchsanlage**

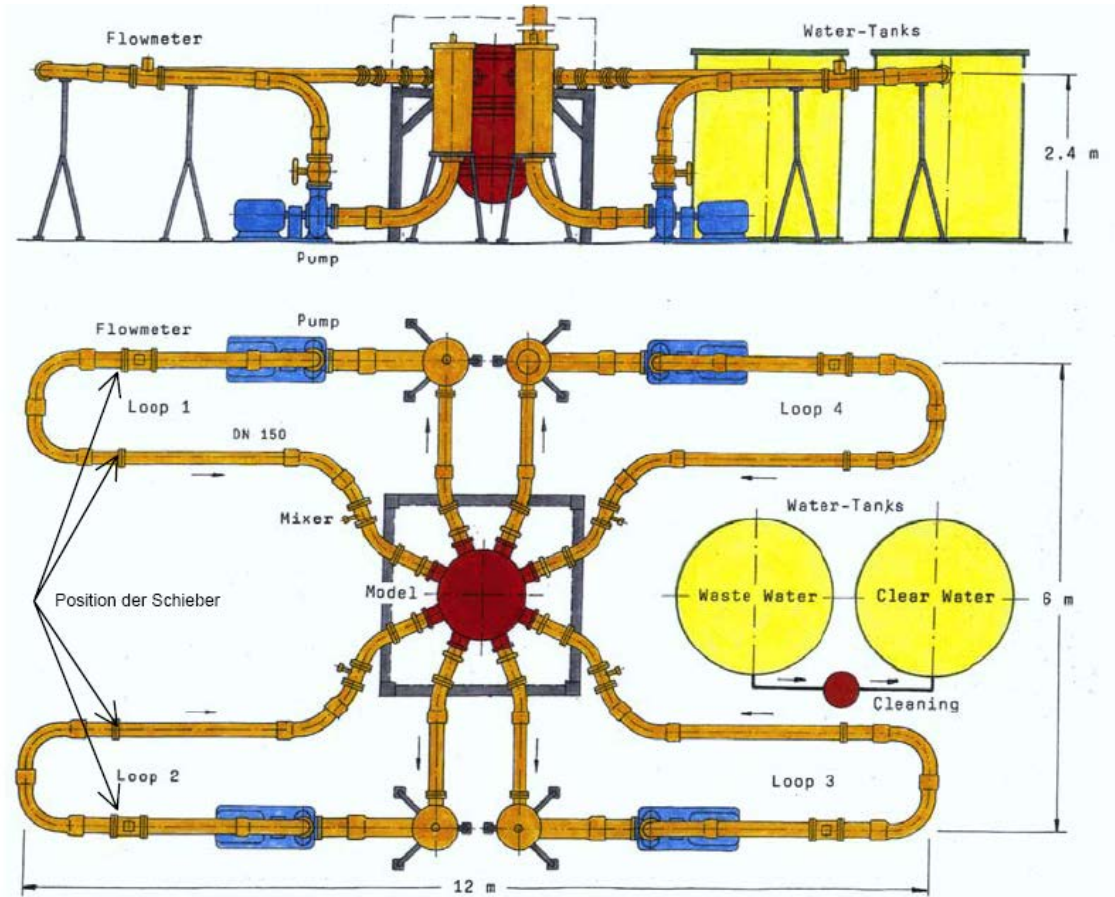
Die Geometrie der ROCOM-Versuchsanlage und das Vorgehen beim aktuell zu simulierenden Experiment haben sich nicht gegenüber denen verändert, die in /AUS13/ beschrieben wurden. Diese werden im Folgenden nochmals vorgestellt.

In der ROCOM-Versuchsanlage (siehe Abb. 6.13) wurde der Primärkreis eines 1300 MW-Druckwasser-Reaktor KONVOI der Fa. Siemens/KWU nachgebildet. Bis zum Kerneintritt waren alle wesentlichen Komponenten geometrisch ähnlich ausgeführt /FZR03/. Die ROCOM-Versuchsanlage war gegenüber dem Originalreaktor im linearen Maßstab 1:5 verkleinert. Der Volumenmaßstab betrug 1:125.

Um die Mischung von Wasser mit unterschiedlicher Dichte zu untersuchen, wurde die Dichte von Wasser durch die Zugabe von Zuckerlösung verändert. Gleichzeitig wurde



durch den Zusatz von Salz die Leitfähigkeit des Wassers verändert. Unterschiedlich Dichten wurden durch unterschiedliche Salzkonzentrationen und damit Leitfähigkeiten gekennzeichnet. Aus den gemessenen Leitfähigkeiten ließ sich so die Durchmischung der unterschiedlich dichten Medien bestimmen.



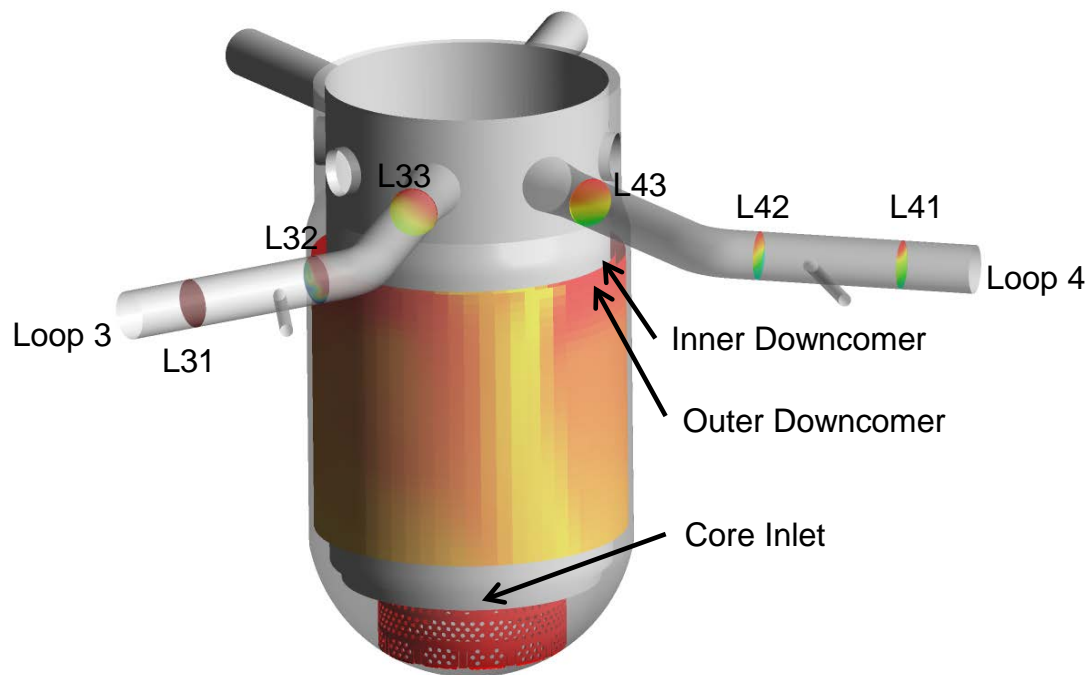
**Abb. 6.13** Schemazeichnung der ROCOM-Versuchsanlage /FZR03/

In der Versuchsanlage befinden sich Messsensoren in den kalten Strängen, auf zwei konzentrischen Rotationsflächen im Downcomer und beim Kerneintritt in Höhe des unteren Rosts (siehe Abb. 6.14). Dort wird die Leitfähigkeit des Wassers bestimmt. Aus den Verhältnissen der Leitfähigkeitsdifferenz kann der so genannte Mixing-Skalar (1) bestimmt werden.

$$\Theta_{x,y,z}(t) = \frac{\sigma_{x,y,z}(t) - \sigma_0}{\sigma_1 - \sigma_0} \quad (1)$$

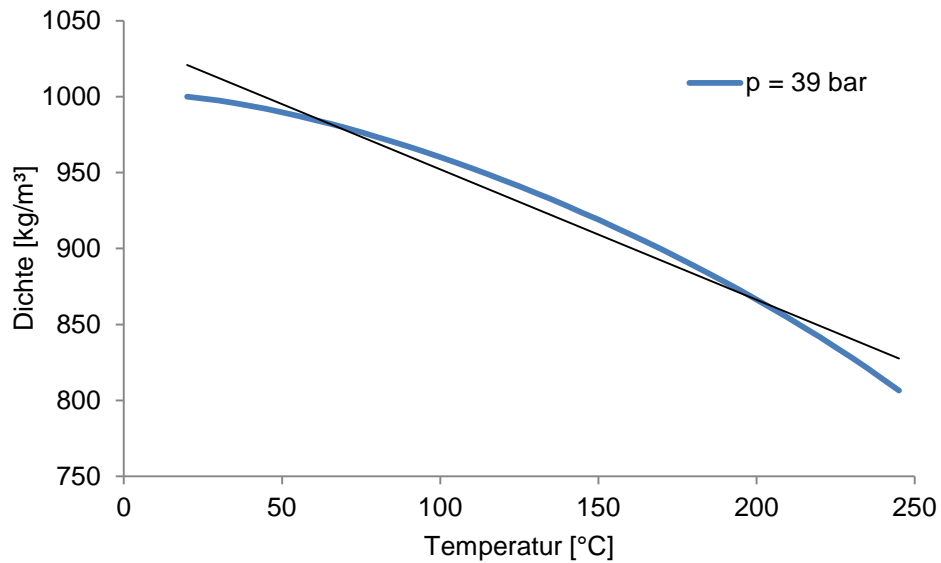
Dabei ist  $\sigma_1$  die Leitfähigkeit des Wassers mit der variierten Dichte an einem Einlass und  $\sigma_0$  die Leitfähigkeit des Wassers mit „Standarddichte“ (ohne Zuckerlösung). Aus dem Mixing-Skalar kann dann das lokale Mischungsverhältnis berechnet werden. Je

nach Versuch kann daraus dann auf die lokale Temperatur, Borsäurekonzentration oder andere Einflussfaktoren auf die Dichte zurückgeschlossen werden.



**Abb. 6.14** Position der Messflächen in der ROCOM-Versuchsanlage.

In den hier betrachteten Versuchen war die Dichte näherungsweise eine lineare Funktion der Temperatur (siehe Abb. 6.15). Die maximale Abweichung beträgt innerhalb des relevanten Temperaturbereichs (20 °C bis 230 °C) weniger als 2 % für den gegebenen Druck von 39 bar.



**Abb. 6.15** Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur für Wasser bei 39 bar (Die blaue Kurve wurde nach /IAP97/ berechnet, die schwarze Gerade ist die lineare Näherung).

Wie weiter unten beschrieben, wurden aus einem PKL-Versuch Temperaturen für die Einlassrandbedingungen der ROCOM-Versuche ermittelt. Es wurden daraus die entsprechenden Dichten für die PKL-Versuchsanlage berechnet und daraus relative Dichteunterschiede bestimmt.

An der ROCOM-Versuchsanlage wurden je Versuch zwei verschieden dichte Fluide eingespeist. Eine Temperatur  $T$  in der PKL-Versuchsanlage entspricht also einer bestimmten Dichte  $\rho$  in der ROCOM-Versuchsanlage, die wiederum über eine gemessene Leitfähigkeit  $\sigma$  bestimmt wird. Wird zwischen den Größen  $\sigma$ ,  $\rho$ ,  $T$  jeweils ein linearer Zusammenhang angenommen, so können diese gemäß Gleichung (2) ineinander umgerechnet werden.

$$\Theta_{x,y,z}(t) = \frac{\sigma_{x,y,z}(t) - \sigma_0}{\sigma_1 - \sigma_0} \approx \frac{\rho_{x,y,z}(t) - \rho_0}{\rho_1 - \rho_0} \approx \frac{T_{x,y,z}(t) - T_0}{T_1 - T_0} \quad (2)$$

Ein Mixing-Skalar von 0 entspricht einem vollständig „ungestörten“ Medium, d.h. die lokale Temperatur beträgt  $T_0$  und die lokale Dichte  $\rho_0$ . Ist der Mixing-Skalar 1, so beträgt die lokale Temperatur  $T_1$  und die lokale Dichte  $\rho_1$ .

Messfläche	Anzahl der Messstellen
Kalte Stränge	6*216
Downcomer innen	1856
Downcomer außen	1856
Kerneinlass	193

**Tab. 6.1** Anzahl der Messstellen in den verschiedenen Messfläche.

In Tab. 6.1 ist die Anzahl der Messstellen in den verschiedenen Messflächen aufgelistet, mit denen die lokale Leitfähigkeit bestimmt wird.

### 6.2.1.2 Skalierung zwischen den ROCOM-Versuchen und der Realanlage

Wie in Abschnitt 6.2.1.1 beschrieben, beträgt die Skalierung der Längen in der ROCOM-Versuchsanlage gegenüber einer Realanlage (KONVOI) 1:5. Um dennoch die Ergebnisse zwischen der Realanlage, den verschieden skalierten Versuchsanlagen und den Simulationen vergleichen zu können, sollten die in Gleichung (3) aufgeführten dimensionslosen Kennzahlen Reynolds-Zahl, Strouhal-Zahl und Froude-Zahl im Idealfall identisch sein.

$$Re = \frac{L \cdot v}{\nu}, \quad Sr = \frac{L}{v \cdot \tau}, \quad Fr = \sqrt{\frac{\rho \cdot v^2}{\Delta\rho \cdot g \cdot L}} \quad (3)$$

Da im vorliegenden Fall der Einfluss der Dichteunterschiede auf die Durchmischung untersucht werden sollte, wurde die Froude-Zahl konstant gehalten. Da die Länge um den Faktor 5 reduziert ist, muss der Quotient aus relativem Dichteunterschied und Quadrat der Geschwindigkeit um den Faktor fünf gegenüber der Realanlage erhöht sein. Wird für die Geschwindigkeit eine andere Skalierung als der Faktor 1/5 gewählt, so kann die Strouhal-Zahl nicht konstant gehalten werden. Außerdem verändern sich die Transportzeiten gegenüber der Realanlage. Die Reynolds-Zahl in der ROCOM-Versuchsanlage besitzt auf jeden Fall einen niedrigeren Wert als in der Realanlage.

Der Versuchsstand wird mit Wasser bei einer Temperatur von ca. 20 °C betrieben. Somit beträgt das Verhältnis der Reynolds-Zahlen zwischen Modell und Original ca. 1:190 bei einer Skalierung der Geschwindigkeit mit einem Faktor 1/5. Die Reynolds-

Zahlen selbst erreichen bei Vierstrangbetrieb Werte von  $Re = 4,4 \cdot 10^5$  im Eintrittsstutzen und  $Re = 1,4 \cdot 10^5$  im Downcomer. Bei Betrieb eines einzelnen Stranges beträgt die Reynolds-Zahl am Kerneintritt  $Re = 3,4 \cdot 10^4$ . Damit ist in den Versuchen eine hochturbulente Strömung gewährleistet, die auch in der Realanlage vorliegt. Skalierungsexperimente haben gezeigt, dass auch für die Bedingungen des Naturumlaufs (niedrigere Geschwindigkeit und daher niedrigere Reynolds-Zahl) die Versuchsergebnisse mithilfe von hochturbulenten Bedingungen beschrieben werden können /FZR03/.

### **6.2.1.3 ROCOM-Versuch**

Zusätzlich zu den in /AUS13/ aufgeführten Tests, für die dort bereits Nachrechnungen durchgeführt wurden, wurde noch ein weiterer Test 2.3 durchgeführt. Für den Test 2.3 der Versuchsserie im Rahmen des PKL III-Projekts wurden die Einlässe der kalten Stränge sowie aller Notkühlstränge bis auf einen abgesperrt. Im nicht abgesperrten Strang (entspricht Strang 3 in Abb. 6.13) erfolgte eine variable Einspeisung. Der Versuch wurde fünfmal durchgeführt. Der Mittelwert des Volumenstroms der Einspeisung sowie die in der CFD-Simulation verwendeten Werte sind in /KLI15/ dokumentiert.

#### **6.2.1.3.1 Simulationssetup**

Die Simulationen wurden mit der Version 3.0.1 von OpenFOAM durchgeführt /OPE15/. Aufgrund der zeitlich variierenden Randbedingungen wurden transiente Simulationen durchgeführt. Die Zeitschrittweiten der Simulationen wurden dabei automatisch für jeden Zeitschritt so bestimmt, dass die maximale Courant-Zahl im Rechengebiet unter dem vorgegebenen Maximalwert von 120 bleibt. Die Courant-Zahl gibt jeweils für eine Gitterzelle das Verhältnis zwischen der durch die Strömung während eines Zeitschritts zurückgelegten Wegstrecke und der Ausdehnung der Zelle an. Liegt der Wert der Courant-Zahl über 1, so müssen die Strömungsgleichungen mit Hilfe von sogenannten Unterrelaxationsverfahren gelöst werden, um die numerische Stabilität sicherzustellen.

Der Versuch wurde sowohl mit numerischen Verfahren erster Ordnung sowie einmal mit Verfahren zweiter Ordnung simuliert.

Für die Simulationen wurde das  $k-\omega$ -Shear-Stress-Transport-Turbulenzmodell (kOmegaSST) verwendet. Dabei handelt es sich um eine standardmäßig von OpenFOAM zur Verfügung gestellte Option. Das kOmegaSST-Modell ist eine Kombination des  $k-\epsilon$ - und

des  $k$ - $\omega$ -Modells. Das  $k$ - $\omega$ -Modell wird in Wandnähe, das  $k$ - $\epsilon$ -Modell in der Kernströmung verwendet, wobei durch OpenFOAM ein automatischer Übergang zwischen den Modellen gewährleistet wird. Dadurch werden die Vorteile beider Modelle kombiniert.

Der Anleitung in /GUE15/ folgenden, wurden die folgenden Wandfunktionen für  $k$ ,  $\omega$  und die turbulente Viskosität verwendet: `kqRWallFunction`, `omegaWallFunction`, `nutkWallFunction`.

Die unterschiedlichen Dichten wurden in den Simulationen über die Einspeisung von Fluid simuliert, das eine unterschiedliche Temperatur und damit eine unterschiedliche Dichte besaß als das Fluid, das sich zu Beginn der Simulation im Rechenggebiet befand. Die Temperatur der Einspeisung war so gewählt, dass die Dichte den 1,038-fachen Wert der Dichte des Fluids zum Beginn der Simulation aufwies.

Die molekulare Diffusion wurde nicht berücksichtigt.

### 6.2.1.3.2 Geometrie und Rechengitter des Strömungsgebiets

Abb. 6-13 zeigt die Geometrie, die für die OpenFOAM-Simulationen verwendet wurde. Die Geometrien des Rechengebiets besteht aus Teilen der kalten Stränge, dem Downcomer, dem unteren Plenum mit einem Modell der Siebtonne (deren Löcher im Rechengebiet aufgelöst wurden), der Stauplatte und Kernkanälen ( $L/D \approx 30$ ). Für die Stränge 1 und 2 wurde nur ein kleiner Teil der Rohre simuliert ( $L/D \approx 5$ ), während die Stränge 3 und 4 Teile der Kalteinspeisung beinhalten.

Das Rechengebiet bestand aus Hexaederelementen in den kalten Strängen, dem Downcomer, Teilen des unteren Plenums und den Kernkanälen. Um die komplexe Geometrie der Siebtonne aufzulösen wurden Tetraederelemente verwendet. Den Best-Practice-Guidelines /MAH07/ folgend wurden die Übergänge zwischen den verschiedenen Gitterarten mit Knoten-zu-Knoten-Verbindungen ausgeführt.

Die OpenFOAM Simulationen konvergierte auf diesem Rechengebiet für die in /AUS13/ berichteten Simulationen auf Grund von Problemen mit stark verformten Tetraederelementen in der Nähe der Siebtonne weder bei Verwendung numerischer Verfahren von erster noch zweiter Ordnung.

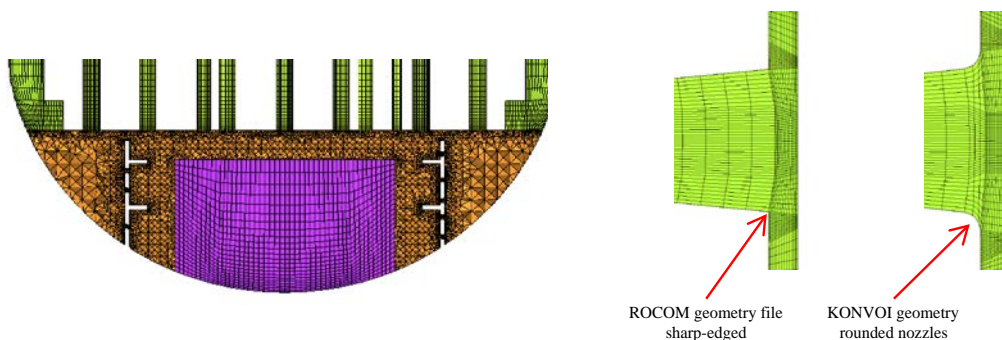
In /AUS13/ wurden die Simulationen den Best-Practice-Guidelines /MAH07/ Untersuchungen bezüglich der Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von der Gitterauflösung folgend, auf vier verschieden stark aufgelösten Gittern durchgeführt. Es zeigte sich damals, dass keine signifikanten Unterschiede zwischen den einzelnen Gittern festgestellt werden konnten. Deshalb wurde für die hier berichteten Simulationen das Gitter mit der mittlere Auflösung aus /AUS13/ verwendet.

	<b>Mittel (runde Stutzen)</b>
<b>Knoten</b>	2.244.246
<b>Elemente</b>	4.298.067
<b>y<sup>+</sup></b>	0 – 1623

**Tab. 6.2** Verwendetes Rechengitter (mit runden Stutzen).

In den Best-Practice-Guidelines /MAH07/ wird eine obere Grenze für den  $y^+$ -Wert von 500 empfohlen. Dieser ergibt sich aus der Verwendung des SST-Turbulenzmodells und der automatischen Wandfunktionen. Für einen kleinen Teil des Rechengebiets im Bereich des kalten Strangs wurde dieser Wert nicht eingehalten. Da dort im Wesentlichen eine homogene Strömung vorliegt und keine Durchmischungsvorgänge stattfinden, wurde von einer weiteren Gitterverfeinerung in diesem Bereich abgesehen.

Für das mittlere Gitter wurden auch die Empfehlungen der Best-Practice-Guidelines /MAH07/ bezüglich der Gitterqualität überprüft: Es zeigte sich dabei, dass nur 0,6 % der Gitterelemente Winkel besitzen, die unter dem empfohlen Minimum von  $20^\circ$  liegen, sowie nur 0,001 % der Elemente besitzen Winkel, die größer sind als der empfohlene Maximalwert von  $160^\circ$ . Für 90,7 % der Elemente lag der Volumenwachstumsfaktor unter dem empfohlen Grenzwert von 2. Nur 0,8 % der Elemente hatten einen Wachstumsfaktor größer als 4. Die Best-Practice-Guidelines /MAH07/ empfehlen einen Grenzwert von 10 bis 20 für das Seitenverhältnis der Elemente. 8,5 % der Elemente hatten ein Seitenverhältnis größer als 10 und nur 1,2 % eines größer als 20.



**Abb. 6.16** Unteres Plenum und Teile des Downcomers sowie der Kernkanäle für das mittlere Rechengitter (links); unterschiedliche Geometrien an den RDB-Eintrittsstützen (rechts).

Die von HZDR zu Beginn des Projekts /AUS13/ zur Verfügung gestellte Geometrie hatte scharfkantige Ecken an den Einlassstutzen des RDBs. Die tatsächliche Geometrie der Versuchsanlage besitzt aber abgerundete Ecken, die aufgrund von Ablöseeffekten zu einem unterschiedlichen Strömungsverhalten führen kann. Um die Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von diesen geometrischen Unterschieden zu ermitteln, wurde vom „mittleren“ Rechengitter eine Variante mit abgerundeten Ecken erstellt (siehe Abb. 6.16).



#### **6.2.1.4 Randbedingungen**

##### **6.2.1.4.1.1 Wände**

Für die Wände des Rechengebiets wurde für alle Simulationen die Randbedingung „no slip“ gewählt. Dies bedeutet, dass die Strömungsgeschwindigkeiten an der Wand 0 beträgt. Die Geschwindigkeit in Wandnähe wurde von OpenFOAM auf Basis von Wandfunktionen berechnet /GUE15/.

##### **6.2.1.4.1.2 Einlass**

Alle Einlässe bis auf die Notkühlleitung in Strang 1 wurden im Experiment abgesperrt. In den Simulationen wurden diese Flächen (siehe Abb. 6.14) wie Wände behandelt. Die Temperatur am Einlass der Notkühlleitung auf 298,15 °K (25 °C) gesetzt. Im Vergleich zur Temperatur im Rechengebiet zu Beginn der Simulation von 368,75 K (95,6 °C) ergibt sich daraus beim vorgegebenen Ausdehnungskoeffizienten von  $0,695 \cdot 10^{-3} \text{ 1/K}$  eine um den Faktor 1,048 erhöhte Dichte. Die zeitabhängige Geschwindigkeit am Einlass durch die Notkühlleitung wird aus dem vorgegebenen Verlauf des Volumenstroms (Daten siehe /KLI15/) berechnet. Als Randbedingung für die Turbulenz wurde eine Turbulenzintensität von 5 % gewählt. Dieser Wert gibt an, wie hoch die Turbulenzenergie  $k$  im Verhältnis zur kinetischen Energie des Fluids am Einlass ist.

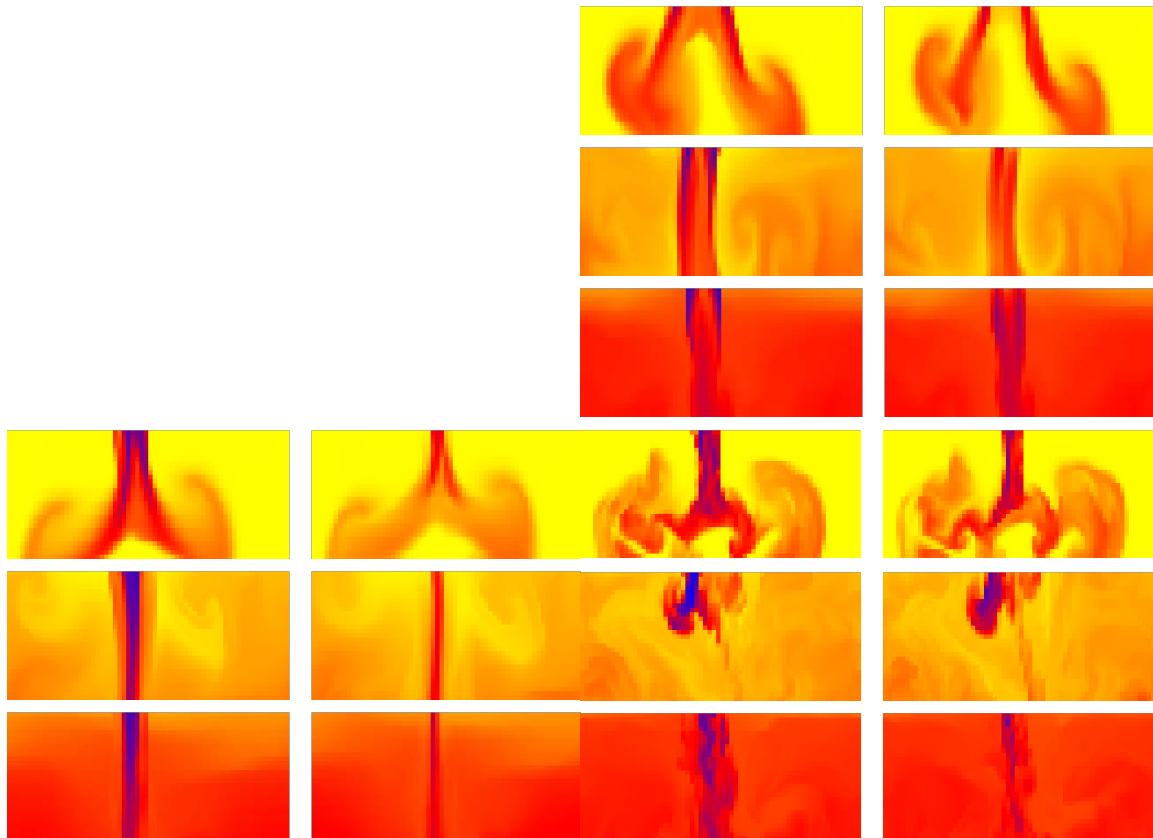
#### **6.2.1.5 Simulationsergebnisse und Vergleich mit den Experimenten**

Es konnten die wesentlichen physikalischen Effekte durch die Simulationen nachvollzogen werden: Das Fallen des kalten Fluids direkt nach unten hinter im Bereich des Downcomers unterhalb des RDB-Stützens, die Schichtung im Downcomer, die zunehmende Höhe der Schichtung im Verlaufe des Experiments und die homogene Durchmischung im unteren Teil des Downcomers und im unteren Plenum bis zum Kerneinlass (siehe Tab. 6.3 und Abb. 6.17).

	ROCOM	1. Ordnung eckig	1. Ordnung rund	2. Ordnung rund
Downcomer max		95,6	95,6	95,6
Downcomer min		31,8	34,5	26,7
Kerneinlass max		95,6	95,6	95,6
Kerneinlass min		57,2	56,6	57,3
Kalter Strang L31 max		95,6	95,6	95,6
Kalter Strang L31 min		26,2	26,3	25,8
Kalter Strang L32 max		95,6	95,6	95,6
Kalter Strang L32 min		25,2	25,3	25,1
Kalter Strang L33 max		95,6	95,6	95,6
Kalter Strang L33 min		25,3	25,4	25,1

**Tab. 6.3** Minima und Maxima der Temperatur im Experiment bzw. in den Simulationen im quasistationären Zustand (in °C) im Zeitintervall 0 bis 75 s.

Wie Abb. 6.17 zeigt, geben die Simulationen für die Zeiten 15 s, 30 s und 70 s die Höhe der Schichtstruktur im Downcomer im Vergleich zum Experiment gut wieder. Die Durchmischung wird überschätzt, damit ist die Temperatur der „kalten“ Schicht höher als im Experiment. Das Gitter mit eckigen RDB-Stützen (mittlere zwei Spalten) zeigt, vom Experiment abweichend, im oberen Bereich des Downcomers zwei kalte Strähnen, die sich im unteren Bereich des Downcomers durchmischen. Die Simulation mit den runden RDB-Stützen zeigt dagegen das richtige Verhalten, nämlich eine kalte Strähne, die fast zum unteren Ende des Downcomers reicht. Aber auch diese Simulation überschätzt die Durchmischung. Außerdem scheint im Versuch insgesamt mehr kaltes Wasser in den Downcomer zu strömen, als in den Simulationen dieses Verhalten wurde schon in /AUS13/ für den Test 1.3 beobachtet. Eine Erklärung dafür liegt immer noch nicht vor.



**Abb. 6.17** Vergleich der Temperatur zwischen Experiment und CFD Simulationen zu unterschiedlichen Zeiten im Downcomer (jeweils oben 15 s, Mitte 30 s, unten 70 s; jeweils innere/äußere Messebene: links oben Versuch, rechts oben OpenFOAM 1. Ordnung mit eckigen RDB Stützen, links unten OpenFOAM 1. Ordnung mit runden RDB Stützen, rechts unten OpenFOAM 2. Ordnung mit runden RDB Stützen).

#### 6.2.1.6 Zusammenfassung der Arbeiten zum Ausbau der OpenFOAM Kompetenz

Mit der aktuellen Version 3.0.1 von OpenFOAM war es möglich, den Verlauf eines Experiments an der ROCOM Versuchsanlage nachzurechnen. Dabei konnte dasselbe Rechengitter eingesetzt werden, dass schon für die Simulationen mit ANSYS CFX in /AUS13/ eingesetzt wurde. Die in /AUS13/ verwendete Version von OpenFOAM führte bei Simulationen auf Basis dieses Gitters regelmäßig zu Programmabstürzen. Die Anwendbarkeit von OpenFOAM hat sich also deutlich verbessert.

Insbesondere die Ergebnisse bei Verwendungen von numerischen Verfahren zweiter Ordnung zeigen eine sehr qualitativ gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die Art der quantitativen Abweichungen hat sich gegenüber den Ergebnissen in /AUS13/ nicht verändert. Es scheint immer noch zu sein, dass die experimentellen Daten eine weniger starke Durchmischung des Fluids zeigen, als alle CFD-Simulationen. Wie in /AUS13/ gezeigt wurde, gab es möglicherweise Probleme bei den Messungen, da es scheinbar zu einer Massenzunahme des Fluids mit unterschiedlicher Dichte kam, die durch die Randbedingungen des Experiments nicht erklärt werden konnte. Da die ROCOM-Versuchsanlage mittlerweile abgebaut wurde, kann dies nicht abschließend geklärt werden.

Auf Basis der aktuellen Erfahrungen der GRS mit OpenFOAM spricht nichts gegen einen Einsatz von OpenFOAM zu Fragen der Reaktorsicherheit im Bereich von einphasigen Strömungen, die auch mit kommerziellen CFD-Codes bearbeitet werden könnten.

## **6.2.2 Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in Flüssigmetall-gekühlten Anlagen mit OpenFOAM**

### **6.2.2.1 Stoffwerte**

Um OpenFOAM für Simulationen von Flüssigmetall-gekühlten System zu ertüchtigen, ist es notwendig, die Stoffwerte dieser Flüssigmetalle für OpenFOAM aufzubereiten. Die Art, wie die Stoffwerte in OpenFOAM berücksichtigt werden, hängt wiederum vom verwendeten Solver ab. Prinzipiell kommen für transiente Simulationen von einphasigen Phänomenen unter Berücksichtigung von Auftriebseffekten aufgrund einer temperaturabhängigen Dichte zwei Solver in Frage: buoyantBoussinesqPimpleFoam und buoyantPimpleFoam /OPE15/.

Beim Solver buoyantBoussinesqPimpleFoam wird von einem inkompressiblen Fluid ausgegangen, für das angenommen wird, dass Stoffwerte, die die Energiegleichung beeinflussen (dynamische Viskosität, spezifische Wärmekapazität, Temperaturleitfähigkeit), unabhängig von der Temperatur sind. Dichteunterschiede werden als lineare Funktion der Temperaturdifferenz modelliert. Als Proportionalitätskonstante für diese lineare Beziehung dient der Ausdehnungskoeffizient. Dichtefluktuationen durch Temperaturunterschiede werden dann in der Impulsgleichung berücksichtigt /WEN13/.

Der Solver `buoyantPimpleFoam` hingegen berücksichtigt direkt temperaturabhängige Stoffgrößen. Diese können als Polynome bis zur siebten Ordnung vorgegeben werden. Damit ist es möglich, direkt die in /OEC07/ veröffentlichten Polynome für die Dichte, die spezifische Wärmekapazität und die Wärmeleitfähigkeit zu übernehmen. Da die dynamische Viskosität in /OEC07/ als Exponentialfunktion in Abhängigkeit von der Temperatur gegeben ist, muss diese durch ein Polynom im relevanten Temperaturbereich angenähert werden. Diese Näherung wurde in /WEN13/ mit Hilfe eines Polynoms zweiter Ordnung um eine Temperatur von 600 K am Beispiel von flüssigem Blei-Wismut (LBE) durchgeführt.

Insgesamt werden somit die Stoffwerte von Flüssigmetall in OpenFOAM durch die gleichen Korrelationen bzw. eine sehr gute Näherung davon dargestellt, wie in ATHLET /LER11/. Die Anforderung einer konsistenten Implementierung zwischen ATHLET und OpenFOAM ist somit gegeben.

Die Versuchsanlage TALL wird mit flüssigem Blei-Wismut (LBE) betrieben. Sie wird im Kapitel 6.3.3 auch für die gekoppelten Simulationen mit OpenFOAM-ATHLET verwendet und dort näher beschrieben.

Die im Rahmen der Diplomarbeit /WEN13/ wurden bei der GRS verschiedene Simulationen auf Basis der Geometrie der TALL Versuchsanlage mit Hilfe der beiden Solver durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass es zwischen Ergebnissen der beiden Solver signifikante Unterschiede, insbesondere in den simulierten Temperaturfeldern, gab.

Für die Kopplung mit ATHLET wurde deshalb der Solver `buoyantPimpleFoam` ausgewählt, da dieser die physikalischen Effekte realitätsnäher simuliert.

Durch die aufwendigere Modellierung der Stoffeigenschaften in `buoyantPimpleFoam` verglichen mit `buoyantBoussinesqPimpleFoam` ist das Konvergenzverhalten allerdings schlechter. Dies drückt sich zum einen in einer größeren Empfindlichkeit gegenüber den gewählten Randbedingungen aus. Sind diese nicht optimal gewählt, so kann dies die Konvergenz des Solvers `buoyantPimpleFoam` verhindern. Außerdem werden deutlich mehr Iterationen pro Zeitschritt benötigt, bis die Residuen der zu lösenden Gleichungen die vorgegebenen Grenzen unterschreiten, verglichen mit Simulationen mit Hilfe des Solvers `buoyantBoussinesqPimpleFoam`.

Da sich die Simulationen für unterschiedliche Flüssigmetalle nur durch die Koeffizienten der Polynome der Stoffwerte unterscheiden würden und da insbesondere noch keine Versuchsergebnisse von der Simulationsanlage KASOLA für Versuche mit flüssigem Natrium vorlagen, wurde auf Simulationen von flüssigem Natrium verzichtet.

### **6.2.2.2 Spezielle Randbedingungen für beheizte Wände mit zeitabhängigem Wärmestrom**

Um die zeitabhängige Heizleistung in den Experimenten nachzubilden, wurde für OpenFOAM eine entsprechende Randbedingung implementiert, die in der Standardversion nicht vorhanden war /WEN13/.

OpenFOAM stellt in der Standardinstallation eine Randbedingung namens `turbulentHeatFluxTemperature` zur Verfügung, mit der ein Wärmeeintrag mit konstantem Wärmestrom an einer Oberfläche des Strömungsgebiets simuliert werden kann. Dabei wird die Temperatur des Fluids an der Wand aus dem Wärmestrom und der mit Hilfe des Turbulenzmodells berechneten Wärmeleitfähigkeit berechnet. Bei dieser Randbedingung kann aber auch für transiente Simulationen nur ein über die Zeit konstanter Wert vorgegeben werden.

Im Rahmen der Diplomarbeit /WEN13/ wurde die zusätzliche Randbedingung `turbulentHeatFluxTemperatureTimeVarying` implementiert, die auch zeitabhängige Angaben des Wärmestroms ermöglicht. Dabei können die Werte als Tabelle mit Werten für verschiedene Zeitpunkte vorgegeben werden, wobei dann zwischen diesen Stützstellen linear interpoliert wird. Die Randbedingung steht in zwei Versionen zur Verfügung, einmal für Solver inkompressibler Fluide (z. B. `buoyantBoussinesqPimpleFoam`) und einmal für Solver kompressibler Fluide (z. B. `buoyantPimpleFoam`).

Die Randbedingung wurde im Rahmen der Diplomarbeit /WEN13/ für Voraussrechnungen für die Versuchsanlage TALL verifiziert.

### **6.2.2.3 Turbulenzmodelle für Fluide mit niedrigen Prandtl-Zahlen**

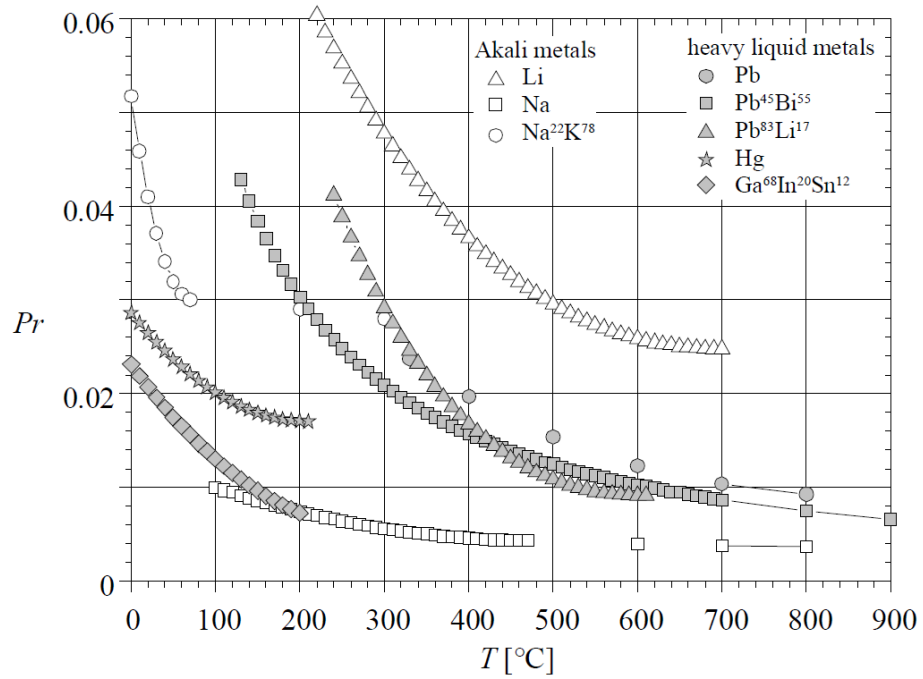
Flüssige Metalle zeichnen sich durch eine, verglichen mit anderen Fluiden wie z. B. Wasser, sehr hohe thermische Leitfähigkeit aus. Strömt ein solches Fluid an einer Wand mit unterschiedlicher Temperatur vorbei, so hat die hohe thermische Leitfähig-

keit zur Folge, dass sich die thermische Grenzschicht weiter in den Bereich des Fluids senkrecht zur Wand ausdehnt als bei einem Fluid mit niedriger thermischen Leitfähigkeit.

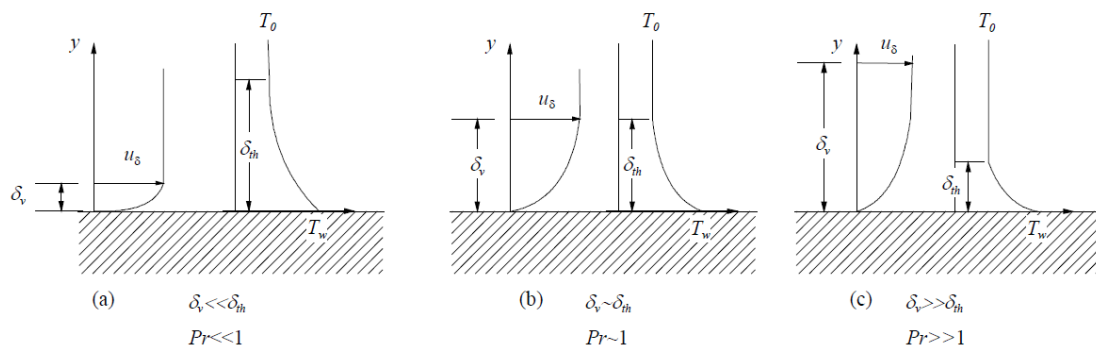
Die Prandtl-Zahl (4) beschreibt das Verhältnis der Transporteigenschaften des Fluids bezüglich des Impulses (kinematische Viskosität  $\nu$ ) und der Temperatur (Temperaturleitfähigkeit  $\kappa$ ).

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} = \frac{\nu}{\kappa} \quad (4)$$

In Gleichung (4) werden dabei die molekularen Größen verwendet, die unabhängig von der Strömung eines Fluids sind. In Abb. 6.18 ist diese Größe für verschiedene Flüssigmetalle dargestellt. Die sich daraus einstellenden Verläufe der Geschwindigkeits- und Temperaturgrenzschicht sind in Abb. 6.19 dargestellt.

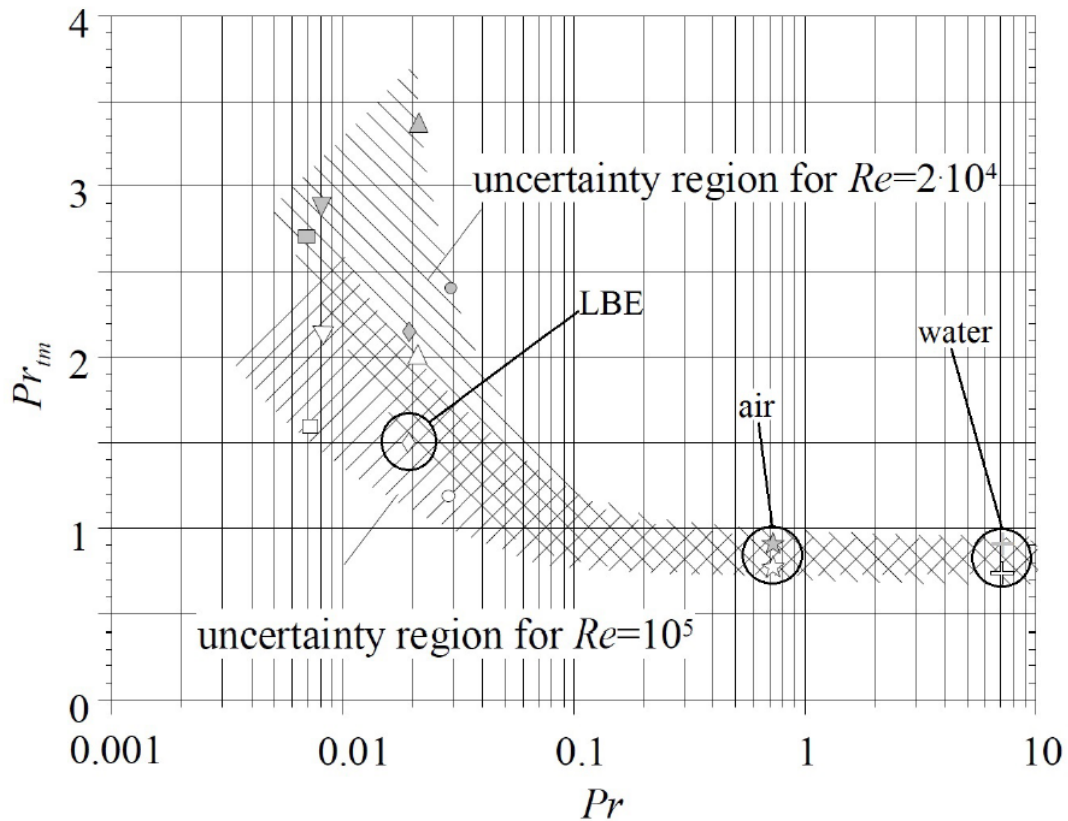


**Abb. 6.18** Molekulare Prandtl-Zahl für verschiedene Flüssigmetalle als Funktion der Temperatur /OEC15/.



**Abb. 6.19** Grenzschichtdicken (der Geschwindigkeit und der Temperatur) für verschiedene Prandtl-Zahlen /OEC15/.





**Abb. 6.20** Zusammenhang der mittleren turbulenten Prandtl-Zahl  $Pr_{tm}$  mit der molekularen Prandtl-Zahl  $Pr$  für verschiedene Stoffe /WEN13/, /OEC07/.

In Abb. 6.20 ist der Zusammenhang der molekularen und der turbulenten Prandtl-Zahl für verschiedene Fluide dargestellt. Während Fluide wie Wasser und Luft gut durch eine turbulente Prandtl-Zahl von ungefähr 0,9 beschrieben werden können, ist der Unsicherheitsbereich für Flüssigmetalle sehr groß.

Ist die turbulente Prandtl-Zahl bekannt, so kann die turbulente Wärmeleitfähigkeit direkt aus der turbulenten Viskosität bestimmt werden. Ansonsten sind komplizierte Modelle notwendig.

Deshalb gab es in den vergangenen Jahren verschiedene Versuche, insbesondere im Rahmen des THINS Projekts, den Wärmeübergang zwischen Wänden und Flüssigmetallströmung zu modellieren /DUP14/, /MAN15/, /ROE15/.

In /DUP14/ wurde für eine einfache Kanalströmung verschiedene Ansätze, wie Standard-RANS-Modelle mit fester turbulenter Prandtl-Zahl, mit variabler turbulenter Prandtl-Zahl und modifizierte Wandfunktionen für die Temperatur. In dieser Veröffentli-

chung schneiden Turbulenzmodelle mit fester turbulenter Prandtl-Zahl am schlechtesten im Vergleich mit LES- und DNS-Simulationen ab.

In /MAN15/ wurde ein 4-Gleichungs-Turbulenzmodell eingeführt, das zusätzlich zu den Größen eines k-epsilon-Modells noch zwei Turbulenzgrößen für den Wärmeübergang enthält. Es verwendet keine Wandfunktionen und setzt somit voraus, dass das Gitter bis in die laminare Grenzschicht an der Wand reicht. Das 4-Gleichungs-Turbulenzmodell ist laut den Ergebnissen dieser Veröffentlichung einem 2-Gleichungs-Turbulenzmodell bei Verwendung einer konstanten turbulenten Prandtl-Zahl überlegen.

In /ROE15/ wurden verschiedene Ansätze zur Modellierung des Wärmeübergangs in Naturumlauf, gemischter sowie erzwungener Strömung von Flüssigmetallen verglichen. Als bestes Modell wurde ein 5-Gleichungs-Modell /KEN05/ identifiziert.

Allen Ansätzen ist aber gemein, dass sie entweder einen deutlich erhöhten Rechenaufwand erfordern, da mehr Gleichungssysteme gelöst werden müssen, bzw. dass sie noch nur für einfache Geometrien validiert wurden.

In /PAP15a/ und /PAP15b/ wurden gekoppelte Rechnungen mit Hilfe von ATHLET und ANSYS CFX durchgeführt, um einen Versuch an der TALL Anlage nachzurechnen. Dabei kamen das in ANSYS CFX standardmäßige Turbulenzmodell SST zum Einsatz sowie eine feste turbulente Prandtl-Zahl. Es zeigte sich, dass die Rechnungen eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment lieferten. Dieses Ergebnis relativiert die in den anderen Veröffentlichungen publizierten schlechteren Ergebnisse bei Verwendung des Ansatzes einer konstanten turbulenten Prandtl-Zahl.

Aufgrund der Erfahrungen der gekoppelten Simulationen mit ATHLET-ANSYS CFX wurde deshalb darauf verzichtet, in diesem Projekt ein spezielles Turbulenzmodell für Flüssigmetalle in OpenFOAM zu implementieren. Stattdessen wird im Folgenden, wie in den gekoppelten Simulationen mit ATHLET und ANSYS CFX, das SST Modell unter Verwendung einer konstanten turbulenten Prandtl-Zahl eingesetzt.

### **6.3 AP 4.3: Bereitstellung einer gekoppelten Version ATHLET OpenFOAM für Sicherheitsanalysen vollständiger Reaktorsysteme**

Ziel dieses Arbeitspunktes war es, eine Kopplung zwischen ATHLET und OpenFOAM zu entwickeln. Eine wesentliche Voraussetzung für diese Kopplung bildete die für

ANSYS CFX entwickelte Schnittstelle in ATHLET /GLA12/. Diese gestattet eine numerische stabile Kopplung des ANSYS CFX-Solvers mit dem Extrapolationsverfahren der Zeitintegration in ATHLET. Der gewählte Kopplungsalgorithmus und die im ATHLET-Code erstellte Schnittstelle sollten in gleicher Form auch für die Kopplung von OpenFOAM eingesetzt werden.

Des Weiteren sollte die Kopplung verifiziert und anhand einer Experimentnachrechnung validiert werden.

### **6.3.1 Architektur der Kopplung**

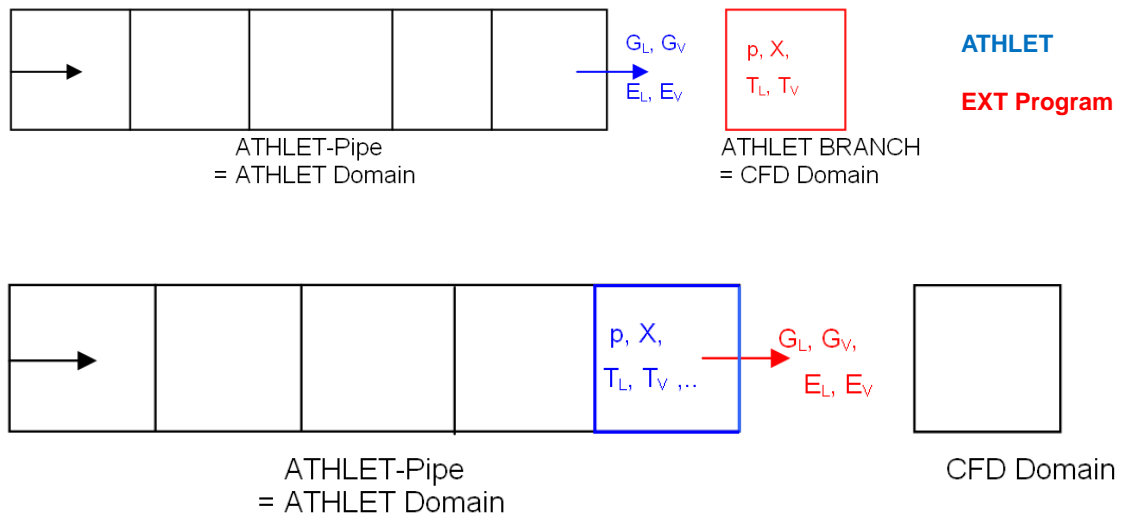
Da die Solver von ANSYS CFX und OpenFOAM Ähnlichkeiten hinsichtlich der Vorgehensweise zum Lösen der Gleichungssysteme, die die Strömung charakterisieren, haben, wurde die Architektur der Kopplung von OpenFOAM mit ATHLET sehr stark an die der Kopplung zwischen ANSYS CFX und ATHLET angelehnt.

Aufgrund der Erfahrungen mit der Kopplung zwischen ANSYS CFX und ATHLET wurde nur die so genannte semi-implizite Kopplungsart implementiert. Dabei tauschen die beiden gekoppelten Solver mehrmals für jeden Zeitschritt ihre Daten an den Kopplungsschnittstellen aus, was zu einem stabileren Verhalten führt.

Ziel der Kopplung ist es, Daten zwischen den beiden Solvern an vorgegebenen Schnittstellen auszutauschen, so dass beide Solver in ihren jeweiligen Rechengebieten für den gegebenen Zeitschritt zu einer stabilen und zwischen den Solvern konsistenten Lösung des Strömungsfeldes kommen.

Die Wahl einer sehr ähnlichen Architektur der Kopplung zwischen OpenFOAM und ATHLET, wie sie die Kopplung zwischen ATHLET und ANSYS CFX besitzt, hat zur Folge, dass in ATHLET selber keine Änderungen in der Kopplungsarchitektur vorgenommen werden mussten. Die Implementierung in ATHLET ist in /GLA12/ beschrieben. Weiterhin gültig ist die dortige Beschreibung für die Steuerung von ATHLET durch den gekoppelten Solver über Modulvariablen, das Vorgehen bei der (Neu-)Berechnung der Jakobimatrix und dem Zwischenspeichern von Ergebnissen für das semi-implizite Lösungsverfahren. Auch der Austausch der Größen an den Kopplungsschnittstellen über Modulvariablen ist weiterhin gültig.

Aufgrund der Architektur des Lösungsalgorithmus von ATHLET werden zwei verschiedene Arten von Kopplungsschnittstellen zur Verfügung gestellt (siehe Abb. 6.21). Bei der ersten Kopplungsart stellt ATHLET die Geschwindigkeit (berechnet aus dem Massenstrom) und die Temperatur (berechnet aus dem Enthalpiestrom) an der Kopplungsschnittstelle zur Verfügung. Der CFD-Solver bestimmt den Druck. Bei der zweiten Kopplungsart liefert umgekehrt ATHLET den Druck und der CFD Solver die Geschwindigkeit bzw. den Massenstrom und die Temperatur bzw. den Enthalpiestrom.



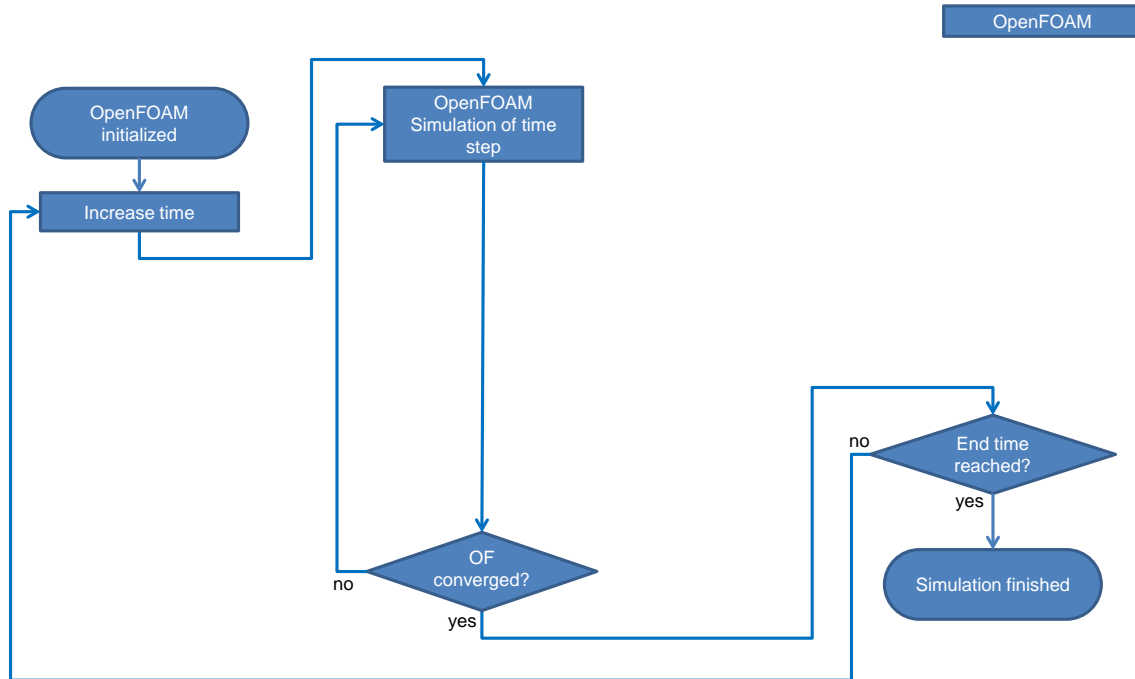
**Abb. 6.21** Kopplungsoptionen und die Austauschgrößen für einphasige Simulationen bei der Kopplung zwischen ATHLET und einem externen Solver (oben: erste Kopplungsart, unten: zweite Kopplungsart).

An der Kopplungsschnittstelle ist darauf zu achten, dass bei der Umrechnung von Geschwindigkeiten und Temperaturen in Massen- und Enthalpieströme konsistente Zustandsgleichungen und Flächen von beiden Solvoren an der Kopplungsschnittstelle verwendet werden. ATHLET wurde deshalb um eine Modulvariable erweitert, die für jede Kopplungsschnittstelle die Fläche zu Verfügung stellt.

### 6.3.1.1 Ablaufsteuerung gekoppelter Simulationen

Der prinzipielle Aufbau von transienten Solvoren in OpenFOAM ist in Abb. 6.22 dargestellt. Diese verwenden meistens den so genannten PIMPLE Algorithmus, der eine den stationären SIMPLE ("Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations") Algorithmus mit dem transienten PISO ("Pressure implicit with splitting of operator") Algorithmus

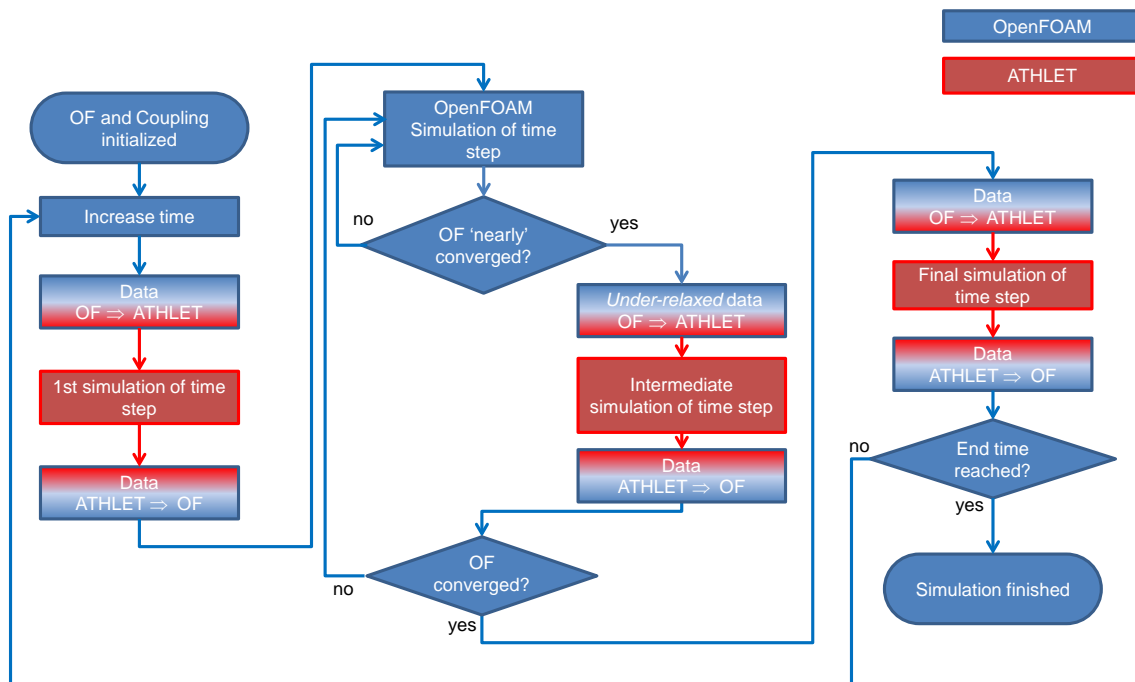
mus vereinigt /VER07/. Damit ist es möglich, transiente Simulationen mit einer Zeitschrittweite durchzuführen, die eine Courant-Zahl größer als eins liefern (siehe auch Kapitel 6.2.1.3.1). Die Stabilität des Gleichungssystems wird dabei durch eine sogenannte Unterrelaxation sichergestellt.



**Abb. 6.22** Typische Solverstruktur eines transienten OpenFOAM Solvers auf Basis des PIMPLE Algorithmus.

Wie bei der Kopplung ATHLET-ANSYS CFX wird auch bei der Kopplung ATHLET-OpenFOAM der Simulationsablauf von CFD Solver bestimmt (siehe Abb. 6.23). Zunächst werden die Simulation von OpenFOAM und die Kopplungsschnittstelle initialisiert. Handelt es sich um einen Restart-Lauf, so werden die Ergebnisse für den aktuellen Zeitschritt in OpenFOAM und in ATHLET aus den jeweiligen Datensätzen geladen. Bei einer neu gestarteten Simulation wird eine Steady-State-Rechnung von ATHLET durchgeführt.

Anschließend wird die Simulationszeit um die von OpenFOAM bestimmte Zeitschrittweite erhöht. Es erfolgt eine Übergabe der Daten von OpenFOAM zu ATHLET an den Kopplungsschnittstellen, eine Simulation des Zeitschritts durch ATHLET und anschließend eine Übertragung der Daten an OpenFOAM. Der Datenaustausch auf ATHLET-Seite findet dabei über die Modulvariablen der Kopplungsschnittstellen statt, während auf OpenFOAM Seite spezielle Randbedingungen für den Datenaustausch verwendet werden.



**Abb. 6.23** Architektur der semi-impliziten Kopplung zwischen OpenFOAM und ATHLET.

Nach der ersten Simulation des aktuellen Zeitschritts durch ATHLET werden iteriert OpenFOAM sooft über seine Gleichungssysteme für den aktuellen Zeitschritt, bis eine fast konvergierte Lösung erreicht wird. Steht diese „fast fertige“ Lösung zur Verfügung, so erfolgt eine erneute Übertragung der Daten der Kopplungsschnittstellen an ATHLET, eine erneute Simulation des aktuellen Zeitschritts mit ATHLET und eine Rückübertragung der von ATHLET aktualisierten Daten an den Kopplungsschnittstelle. Die Werte von OpenFOAM, die an ATHLET übertragen werden, werden dabei durch einen Relaxationsalgorithmus so modifiziert, dass keine zu großen Änderungen zwischen den einzelnen Simulationen mit ATHLET auftreten. Dies ist notwendig, um die Stabilität der gekoppelten Rechnungen sicher zu stellen.

Es wird nun überprüft, ob die Lösung von OpenFOAM auch mit den aktualisierten Randbedingungen den durch die zu unterschreitenden Maximalwerte der Residuen vorgegebenen Bedingungen für eine Konvergenz entspricht. Ist dies nicht der Fall so wird werden die Gleichungssysteme von OpenFOAM erneut (jetzt mit den aktualisierten Kopplungsrandbedingungen) gelöst. Wurde wieder eine fast konvergierte Lösung erreicht, so werden wieder ein Datenaustausch und eine Simulation mit ATHLET durchgeführt. Wurde schließlich eine konvergierte Lösung erreicht, so werden die Daten nochmals an ATHLET übertragen. Bei dieser letzten Übertragung während eines

Zeitschritts werden diese allerdings nicht mehr unterrelaxiert. Es wird eine letzte Simulation mit ATHLET durchgeführt und die aktualisierten Werte der Kopplungsschnittstelle wieder an OpenFOAM übertragen.

Wurde das für OpenFOAM vorgegebene Ende der Simulation noch nicht erreicht, so wird die Simulationszeit um ein von OpenFOAM zu definierendes Zeitintervall erhöht und die gekoppelte Simulation wird für diesen nächsten Zeitschritt durchgeführt.

Die objektorientierte Programmierung von OpenFOAM erlaubte es, die notwendigen Routinen für die Steuerung des modifizierten, gekoppelten OpenFOAM Solvers so zu abstrahieren, dass im Quelltext des Solvers selbst nur minimale Änderungen notwendig sind, um aus einem ungekoppelten einen gekoppelten Solver zu erstellen. Abb. 6.24 zeigt alle Änderungen, die notwendig sind, um den Solver `buoyantPimpleFoam` um die Kopplungsschnittstelle zu ATHLET zu erweitern. Die Änderungen beschränken sich auf die Initialisierung der Kopplungsschnittstelle, der Initialisierung des gekoppelten Solvers, einer Modifikation des Schleifenabbruchkriteriums für die Iterationen der Zeitschritte, den Aufrufen des externen Solvers während der Iterationen und zum Abschluss jedes Zeitschritts und dem Stopp des externen Solvers am Programmende. Durch analoge Änderungen können auch andere OpenFOAM-Solver auf Basis des PIMPLE-Algorithmus um eine Kopplung zu ATHLET erweitert werden.

```

[...]
```

```

#include "fixedFluxPressureFvPatchScalarField.H"
+ #include "couplingSolver.H"

int main(int argc, char *argv[]) {
    #include "setRootCase.H"
    [...]
    #include "readGravitationalAcceleration.H"
+   #include "createCoupling.H"
    #include "createFields.H"
    [...]
    #include "setInitialDeltaT.H"
    pimpleControl pimple(mesh);
+   cA.startupExternalSolver(runTime);
    Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;

-   while (runTime.run())
+   while (runTime.run() && cA.run())
    {
    [...]
        runTime++;
        Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
+       cA.prepareNextTimeStep(runTime);
        #include "rhoEqn.H"

        // --- Pressure-velocity PIMPLE corrector loop
-       while (pimple.loop())
+       while (cA.loop(pimple) // at least one of both solvers has not
+           // converged yet
        {
            #include "UEqn.H"
            #include "EEqn.H"
            // --- Pressure corrector loop
            while (pimple.correct())
            {
                #include "pEqn.H"
            }
            if (pimple.turbCorr())
            {
                turbulence->correct();
            }
+           cA.callExternalSolver(pimple, runTime);
        }
        rho = thermo.rho();
        runTime.write();

+       cA.finalStep(runTime);
        Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
            << " ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
            << nl << endl;
    }
+   cA.stop(false);
    Info<< "End\n" << endl;
    return 0;
}

```

**Abb. 6.24** Änderungen, um buoyantPimpleFoam um die Kopplung mit ATHLET zu erweitern



### 6.3.1.2 Kopplungsschnittstellen

Der Austausch der Kopplungsdaten erfolgt auf der Seite von OpenFOAM über die Randbedingungen der Flächen, die als Kopplungsschnittstellen definiert wurden, für die gekoppelten Felder.

ATHLET liefert für jede Kopplungsgröße pro Kopplungsschnittstelle eine Größe. In OpenFOAM hingegen besteht eine Kopplungsschnittstelle aus einer zwei-dimensionalen Fläche, die aus Flächenelementen zusammengesetzt ist. Die Aufgabe der Kopplungsimplementierung ist es entsprechend, an jeder Kopplungsschnittstelle und für jedes gekoppelte Feld die von OpenFOAM berechneten Werte zu einem Wert für ATHLET zusammenzufassen sowie umgekehrt aus einem von ATHLET zur Verfügung gestellten Wert die Werte für alle Flächenelemente von OpenFOAM an dieser Kopplungsschnittstelle zu berechnen.

Die Umwandlung der Werte von OpenFOAM für ATHLET erfolgt dabei durch eine Mittelung über die Fläche der Randbedingung. Für Werte, die auf Seiten von ATHLET als Flussgrößen behandelt werden (Geschwindigkeiten und Temperaturen) erfolgt dabei eine Gewichtung mit dem Massenfluss jedes Flächenelements. Der Druck wird jeweils mit der Fläche der einzelnen Elemente gewichtet.

In umgekehrter Richtung (von ATHLET zu OpenFOAM) werden zwei Möglichkeiten unterstützt. Bei der ersten wird auf allen Flächenelementen der OpenFOAM Randbedingung der gleiche, von ATHLET zur Verfügung gestellte Wert, verwendet. Die zweite Art von Randbedingungen basiert auf der von OpenFOAM bereitgestellten Randbedingung `fixedMean`. Dabei werden die von OpenFOAM für die Zellmittelpunkte der Randzellen berechneten Werte des Felds um einen für alle Zellen konstanten Betrag verändert, so dass dann die flächengemittelten Werte an Randflächenelementen dem Wert entsprechen, den ATHLET vorgibt. Es hat sich gezeigt, dass diese zweite mögliche Art die Stabilität der OpenFOAM Simulation erhöhen kann.

Je nach Kopplungsart stellt ATHLET entweder die Geschwindigkeit oder den Druck an der Kopplungsschnittstelle zur Verfügung. Deshalb wird in der Implementierung aller Kopplungsschnittstellen auf OpenFOAM-Seite überprüft, um welche Kopplungsart es sich handelt. Stellt OpenFOAM aufgrund der Kopplungsart das jeweilige Feld an einer Kopplungsschnittstelle nicht zur Verfügung, so wird in OpenFOAM kein fester Wert für diese Fläche vorgegeben. Stattdessen wird als Randbedingung vorgegeben, dass der

Gradient des Feldes senkrecht zu jedem Flächenelement 0 ist<sup>2</sup>. OpenFOAM berechnet dann die Werte des Feldes auf den Randflächen auf Basis der Werte in den Zellmittelpunkten der Randzellen. Diese Randwerte dienen dann als Grundlage für die oben beschriebene Mittelung, um den Wert für ATHLET zu berechnen.

In Tab. 6.4 sind die zum momentanen Zeitpunkt für OpenFOAM implementierten Kopplungsschnittstellentypen für die unterstützten Felder aufgeführt.

OpenFOAM Feld	Kopplungsschnittstellentyp
T, U	couplingInletOutlet
T	couplingInletOutletMean
U	couplingNormalInletOutletVelocity
p	couplingPressure
p_rgh	couplingBuoyantPressure

**Tab. 6.4** Kopplungsschnittstellentypen in OpenFOAM für die unterstützten Felder.

Die Verknüpfung von ATHLET-OpenFOAM-Seite einer Kopplungsschnittstelle erfolgt zum einen über die ATHLET Nummerierung der Kopplungsschnittstellen. Die Kopplungsschnittstellen werden beginnend von 1 in der Reihenfolge ihrer Definition im ATHLET Eingabedatensatz durchnummeriert. Am Format der Beschreibung der Kopplungsschnittstelle im ATHLET-Eingabedatensatz hat sich gegenüber /GLA 12/ nur das Controlword geändert: Es lautet jetzt EXT (und nicht mehr CFX).

---

<sup>2</sup> Für den um den Term  $\rho g h$  korrigierten Druck  $p_{rgh}$  wird der Gradient entsprechend berechnet.

```

@      CONTROL WORD *****
C----- EXT
@
----- PIPE1
@      ITCOPL      APIPE
        1          BOUND
@
----- PIPE2
@      ITCOPL      APIPE
        2          LEFT
@

```

**Abb. 6.25** Beispiel für einen ATHLET-Eingabedatensatz für zwei Kopplungsschnittstellen.

In Abb. 6.25 ist beispielhaft die Definition von zwei Kopplungsschnittstellen dargestellt. Rechts von PIPE1 und links von PIPE2 befindet sich jeweils eine Kopplungsschnittstelle. Erstere ist vom Typ 1, letztere vom Typ 2.

```

inlet
{
    type          couplingBuoyantPressure;
    couplingID    1;
    coupledField  p;
    value        uniform $initPressure; // start value
}
outlet
{
    type          couplingBuoyantPressure;
    couplingID    2;
    coupledField  p;
    value        uniform $initPressure; // start value
}

```

**Abb. 6.26** Beispiel für einen OpenFOAM-Eingabedatensatz für zwei Kopplungsschnittstellen für das Feld p\_rgh.

Die OpenFOAM Definition der Kopplungsschnittstellen für das gleiche Beispiel für eines der Felder, hier p\_rgh, der um den geostatischen Druck korrigierte Druck, ist in Abb. 6.26 dargestellt. Für das Temperatur- und das Geschwindigkeitsfeld sind äquivalente Definitionen notwendig.

Während der Initialisierung der Kopplung wird die Information über den Kopplungstyp von ATHLET and OpenFOAM übertragen und steht auch dort zur Verfügung.

### 6.3.1.3 Kommunikation zwischen den Solvern

Um Daten zwischen ATHLET und OpenFOAM auszutauschen, bestehen prinzipiell zwei Möglichkeiten: Entweder werden die beiden Programme zu einem gelinkt und laufen in einem gemeinsamen Prozess. Dann kann der Datenaustausch über den Speicherbereich des Prozess stattfinden. Die zweite Möglichkeit besteht darin, die Programme jeweils in einem eigenen Prozess laufen zu lassen und die Kommunikation über eine zusätzliche Schnittstelle abzuwickeln.

Zunächst wurde die Schnittstelle implementiert, indem ATHLET als Shared Library kompiliert wurde und direkt vom OpenFOAM Solver aufgerufen. Dies führte zu verschiedenen Schwierigkeiten, z. B. aufgrund der unterschiedlichen Indizierung von Arrays und der unterschiedlichen Benennung von Variablen. Deshalb wurde für die aktuelle Implementierung der Kopplungsschnittstelle die zweite Möglichkeit gewählt. Es kommen dabei die Programmbibliotheken zeromq /IMA14/ und msgpack /FUR13/ zum Einsatz. Zeromq ermöglicht den einfachen Datenaustausch über eine Netzwerkschnittstelle. Msgpack dient dazu, die Daten in einem Format zu verpacken, das unabhängig von der Programmiersprache des jeweiligen Solvers von beiden gelesen und geschrieben werden kann.

Da für die Programmiersprache FORTRAN, in der ATHLET programmiert ist, keine einfache Anbindung via msgpack/zeromq möglich ist, wurde ein Wrapper in Python implementiert, der für die Kommunikation verantwortlich ist. Außerdem können über diesen Python-Wrapper einzelne Routinen von ATHLET aufgerufen werden. Über diesen Weg können z. B. die Stoffwerte von ATHLET berechnet und in der Kopplungsschnittstelle für Konvertierungen verwendet werden. Damit kann die Konsistenz von ausgetauschten Daten an den Kopplungsschnittstellen sichergestellt werden.

Auf Seiten von OpenFOAM wurden die notwendigen Routinen in C++ implementiert und werden direkt vom Solver verwendet.

Es wurden weitere Testrechnungen mit der Kopplungsschnittstelle zwischen OpenFOAM und ATHLET durchgeführt. Dabei kam sowohl auf ATHLET wie auch OpenFOAM Seite jeweils die Schnittstelle auf Basis von msgpack/zeromq zum Einsatz. Dies ermöglichte parallelisierte Rechnungen auf dem GRS-Clusternsystemen, wobei ATHLET bzw. OpenFOAM auch auf verschiedenen Clusterknoten laufen konnten.

#### 6.3.1.4 Restartfähigkeit

Mit Hilfe der Kopplungsschnittstelle ist es auch möglich, eine abgebrochene bzw. beendete gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulation fortzusetzen. OpenFOAM kann für definierte Zeitschritte die Ergebnisse abspeichern. Die Zeitschritte, für die die Speicherung erfolgt, werden dabei über Einträge in der Datei controlDict gesteuert. Für jeden Zeitschritt, für den die Daten von OpenFOAM gespeichert werden, wird über die Kopplungsschnittstelle die Generierung eines ATHLET-Restart-Datensatzes im selben Verzeichnis, in dem auch die OpenFOAM-Dateien liegen, ausgelöst. Diese Restart-Datei enthält die Restart-Daten für den jeweiligen Zeitschritt.

Wird eine Simulation als Restart-Rechnung gestartet, so wird die Information, in welchem Verzeichnis die Restart-Datei für ATHLET befindet, über die Kopplungsschnittstelle von OpenFOAM an ATHLET übermittelt. Statt dem Start einer Steady-State-Rechnung werden die Daten der Restart-Rechnung geladen. Anschließend kann die transiente Rechnung fortgesetzt werden.

#### 6.3.1.5 Zusätzliche Eingabedateien

Die Kopplungsschnittstelle wird über zwei zusätzliche Eingabedateien gesteuert. Die Datei athleteCouplingSettings.ini wird vom Python-Wrapper von ATHLET verwendet und enthält Angaben über den zu verwendenden ATHLET-Inputdatensatz, die ATHLET Problem- und Run-ID und gegebenenfalls eine Restart-ID. Abb. 6-27 zeigt ein Beispiel.

```
inputFile = ./pipe-fill-tdv.in
problemID = pipe-fill-tdv
runID = OF24A31.001
# restartID = OF+1b
```

**Abb. 6.27** Beispiel für den Eingabedatensatz des Python-Wrappers der Kopplungsschnittstelle (Restart-ID ist auskommentiert, es wird deshalb kein Restartlauf durchgeführt)

Die Datei system/couplingProperties im Verzeichnis des OpenFOAM-Eingabedatensatzes enthält Angaben zur Kopplungsart (momentan wird nur eine Kopplung mit ATHLET unterstützt), zur Netzwerkverbindung und zur Kontrolle der Re-

siduen. Beim Beispiel in Abb. 6.28 wird vorgegeben, dass die Residuen der Druck- und der Geschwindigkeitsgleichungen unterhalb von 0,01 liegen müssen, damit überhaupt ein Aufruf von ATHLET in der PIMPLE-Schleife stattfindet (absoluteResiduum) (siehe Abb. 6-24). Nachdem ATHLET aufgerufen wurde, werden die aktuellen Residuen gespeichert. Ein erneuter Aufruf von ATHLET erfolgt erst, wenn die Residuen um den Faktor relativeResiduum gefallen sind. Unterschreiten die Residuen direkt nach einem Aufruf von ATHLET den Wert von startFinalResiduum, so erfolgt innerhalb der PIMPLE-Schleife kein weiterer Aufruf von ATHLET. Nachdem diese Beendet wurde, erfolgt noch ein Aufruf von ATHLET bevor der nächste Zeitschritt simuliert wird (siehe Abb. 6.23).

In Abb. 6-29 ist der Verlauf der Residuen am Anfang der Simulation dargestellt. Es ist zu erkennen, wie die Residuen abfallen, bis ein Aufruf von ATHLET erfolgt. Durch die dadurch ausgelöste Änderung der Randbedingungen erhöhen sich die Residuen wieder. Zu Beginn der Simulation unterscheiden sich die Lösungen der Solver noch zu stark. Deshalb findet OpenFOAM für dieses Beispiel keine Lösung, die dem Parameter startFinalResiduum entspricht. Es werden entsprechend alle 400 Iterationen, die in diesem Beispiel als maximale Anzahl von Iterationen innerhalb der PIMPLE-Schleife vorgegeben wurden, durchgeführt.

```

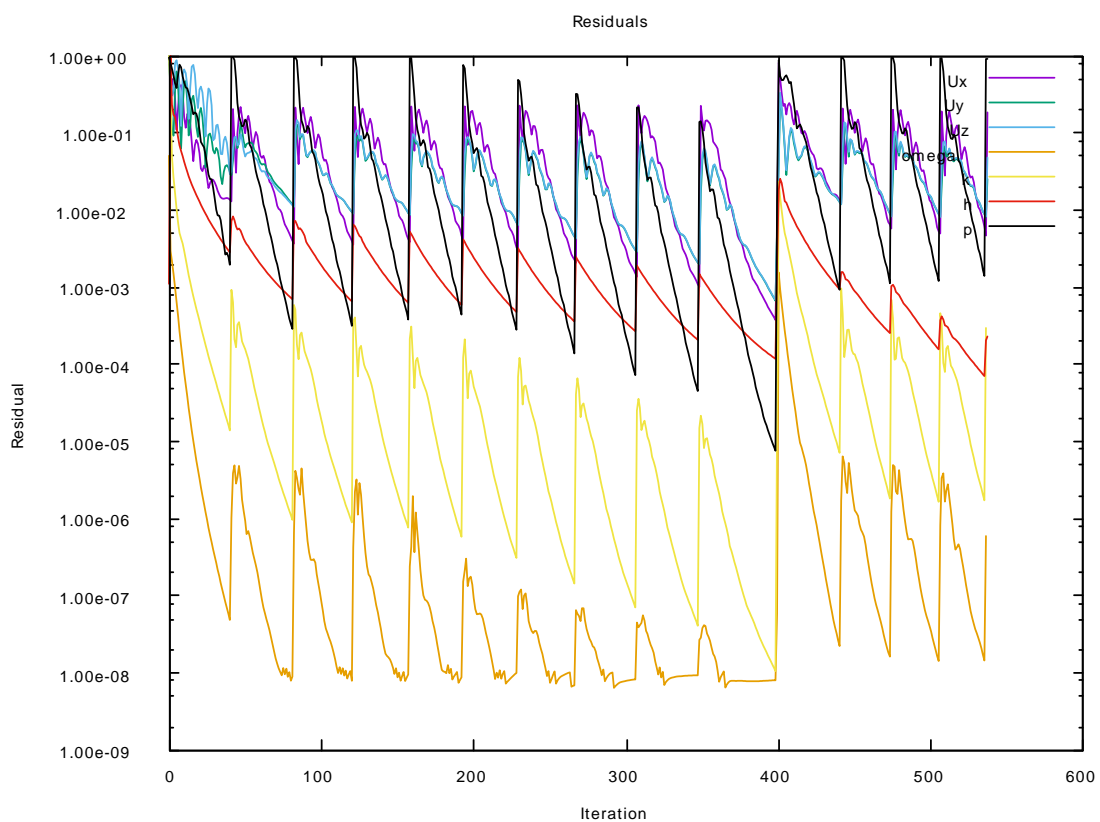
couplingType      athlet;

couplingSolver
{
    couplingSolverHost "tcp://manni:60873";

    relativeResiduum    0.01;
    absoluteResiduum    0.01;
    startFinalResiduum 0.001;
}

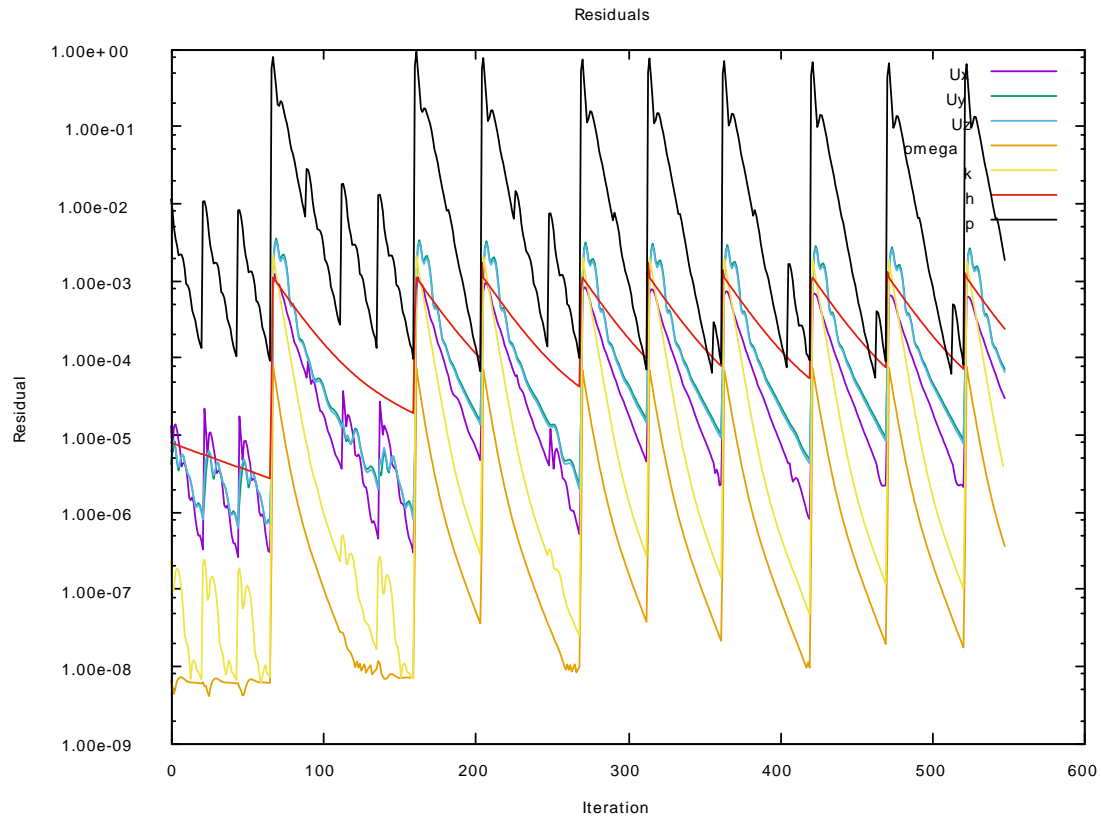
```

**Abb. 6.28** Beispiel für den Eingabedatensatz der Kopplungsschnittstelle für OpenFOAM



**Abb. 6.29** Beispiel für die Entwicklung der Residuen zu Beginn einer Simulation.

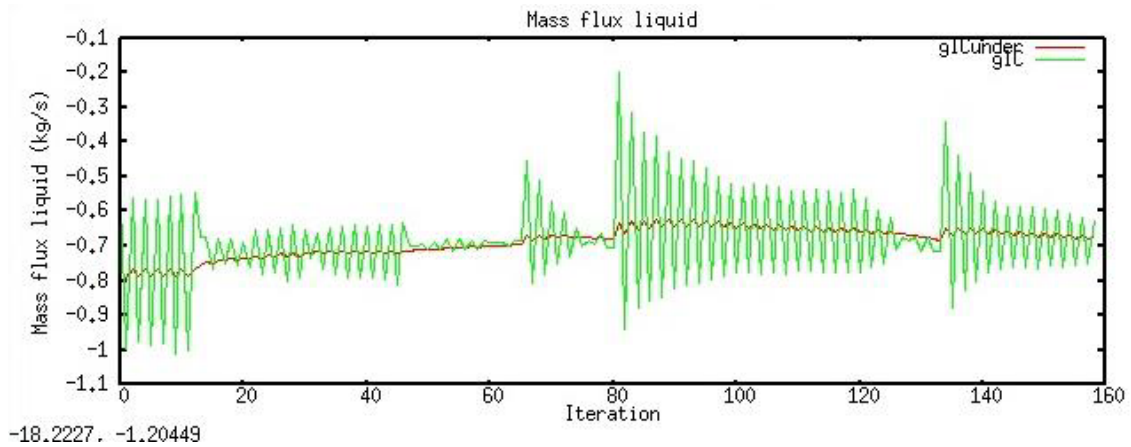
Nachdem sich beide Solver in einem annähernd stabilen Zustand befinden, konvergiert OpenFOAM trotz des Aufrufs von ATHLET in einer geringeren Anzahl von Iterationen (siehe Abb. 6.30). Teilweise erkennt man, dass der Aufruf von ATHLET (z. B. bei ca. Iteration 250 in Abb. 6.30) nur noch zu einer minimalen Erhöhung der Residuen führt.



**Abb. 6.30** Beispiel für die Entwicklung der Residuen, nachdem beide Solver einen annähernd stabilen Zustand erreicht haben.

In Abb. 6.31 ist beispielhaft die Unterrelaxation des Massenflusses an einer Kopp-  
 lungsschnittstelle der Kopplungsart zwei dargestellt /RIV 14/. Die Werte, die OpenFO-  
 AM berechnet schwanken für die ersten Iterationen eines Zeitschritts stark (z. B. ab Ite-  
 ration 65). An ATHLET wird statt des von OpenFOAM berechneten Wert nur der gemit-  
 telte Wert, der in rot dargestellt ist, übertragen. Bis zum Ende der Iterationen dieses  
 Zeitschritts (ca. Iteration 80 in Abb. 6.31) nehmen die Schwankungen deutlich ab und  
 es hat sich ein stabiler Wert an der Schnittstelle ausgeprägt, der für die letzte Iteration  
 dieses Zeitschritts verwendet wird und der für als Ergebnis der Simulation für diesen  
 Zeitschritt verwendet wird.



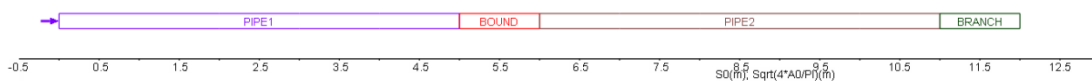


**Abb. 6.31** Beispiel für die Unterrelaxation des Massenflusses vor der Übergabe der Kopplungswerte an ATHLET /RIV14/.

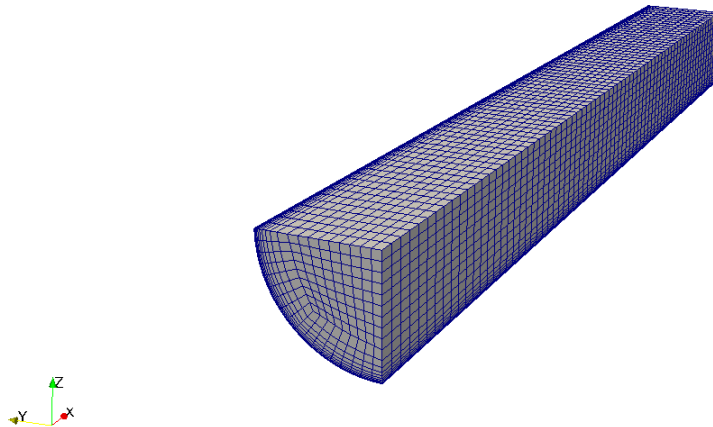
### 6.3.2 Verifikation der Kopplungsimplementierung

Um die Kopplungsschnittstelle zu verifizieren, wurden einfache gekoppelte Systeme simuliert. Im Folgenden wird beispielhaft ein System vorgestellt, das zwei Kopplungsschnittstellen enthält. Wie in Abb. 6.32 dargestellt, besteht das System aus drei Rohrabschnitten. Wird die Kopplung aktiviert, so befinden sich die Kopplungsschnittstellen rechts von PIPE1 und links von PIPE2. Der Massenfluss wird durch FILL-Element am linken Rand des Simulationsgebiets vorgegeben, der Druck durch ein TDV-Element am rechten Rand.

Das OpenFOAM-Rechengebiet bestand in diesem Beispiel aus einem einen Meter langen Rohr, von dem unter Verwendung von Symmetrierandbedingungen nur ein Viertel simuliert wurde (siehe Abb. 6.33).



**Abb. 6.32** Beispiel für die Entwicklung der Residuen, nachdem beide Solver einen annähernd stabilen Zustand erreicht haben.

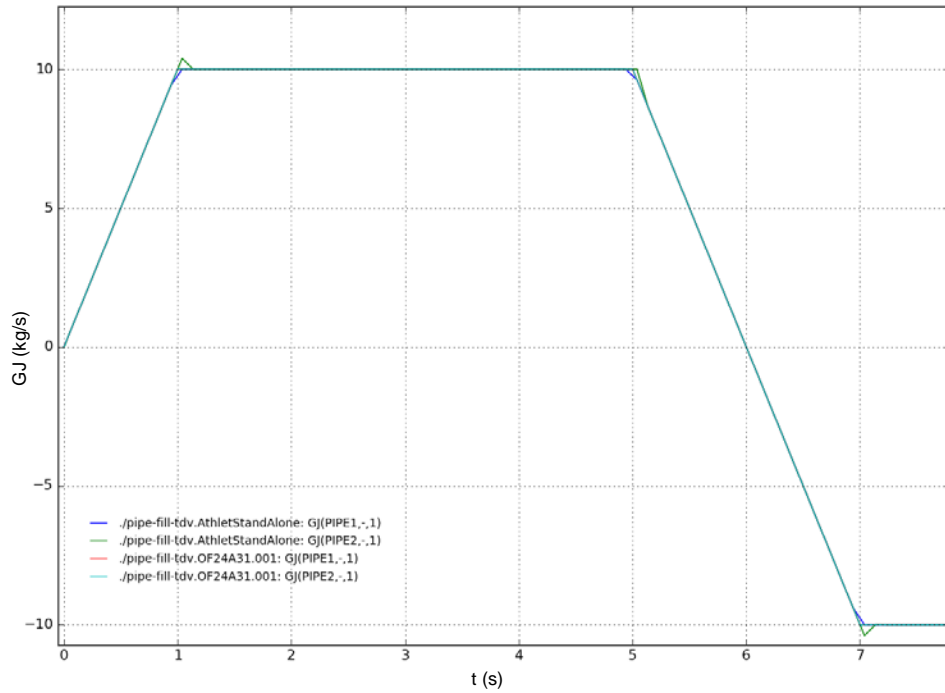


**Abb. 6.33** Rechengitter für den von OpenFOAM simulierten Teil des Strömungsgebiets.

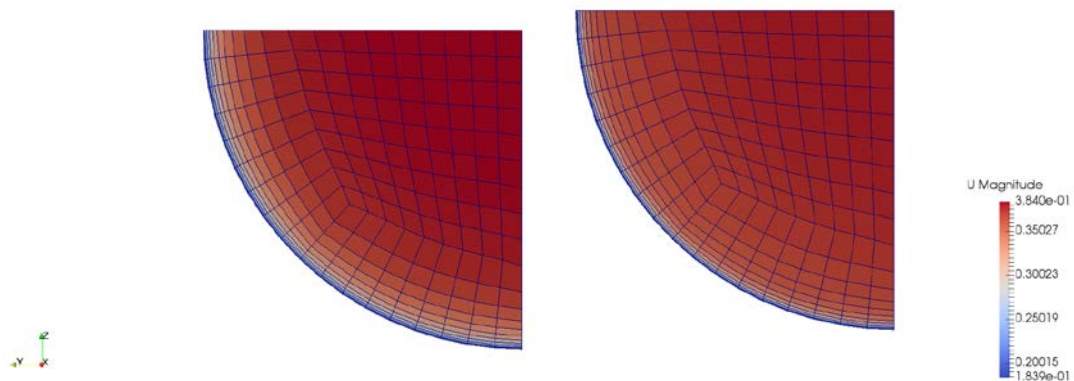
In Abb. 6.34 ist der Massenstrom durch die Rohre PIPE1 und PIPE2 dargestellt, jeweils für eine ATHLET Einzelrechnung, in der auch der Abschnitt BOUND von ATHLET simuliert wurde, und für eine gekoppelte Rechnung ATHLET-OpenFOAM.

Die in Abb. 6.34 sichtbaren „Überschwinger“ stammen von der ATHLET-Einzelrechnung. In der gekoppelten Rechnung wurden die Zeitschrittweiten von OpenFOAM vorgegeben, die kleiner waren, als in der Einzelrechnung. Dies verhinderte solche Überschwinger in der gekoppelten Rechnung. Ansonsten stimmt der Verlauf der Kurven der gekoppelten Rechnung sehr gut mit der der ATHLET-Einzelrechnung überein.

Abb. 6.35 zeigt die Geschwindigkeitsprofile an der Kopplungsschnittstelle zu den ATHLET Rohren PIPE1 und PIPE2 zum Zeitpunkt  $t = 12$  s. Da die Kopplungsrandbedingungen nur den Mittelwert des Massenflusses bzw. der Geschwindigkeit für die Schnittstelle zu PIPE1 vorgegeben und an der Schnittstelle zu PIPE2 von ATHLET keine Randbedingung für die Geschwindigkeit geliefert, simuliert OpenFOAM an beiden Schnittstellen ein physikalisch sinnvolles Profil der Geschwindigkeit über das Rohr.

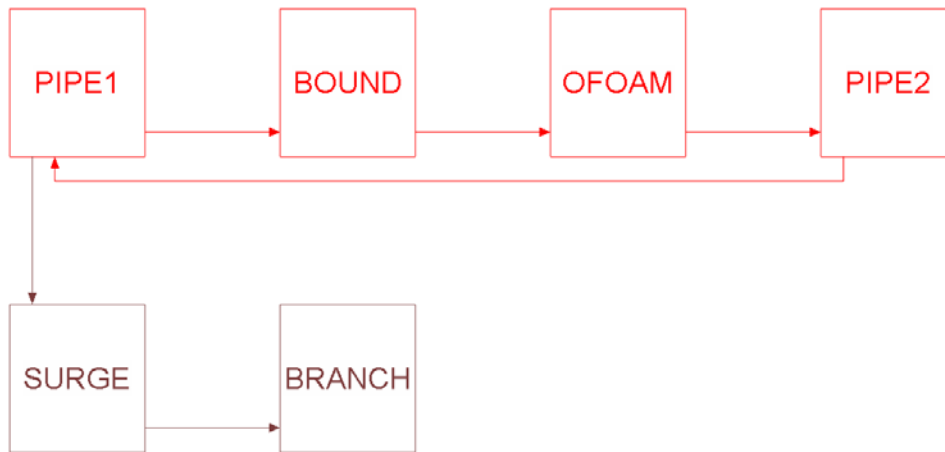


**Abb. 6.34** Massenstrom in PIPE1 und PIPE2 (ATHLET bzw. ATHLET-OpenFOAM).

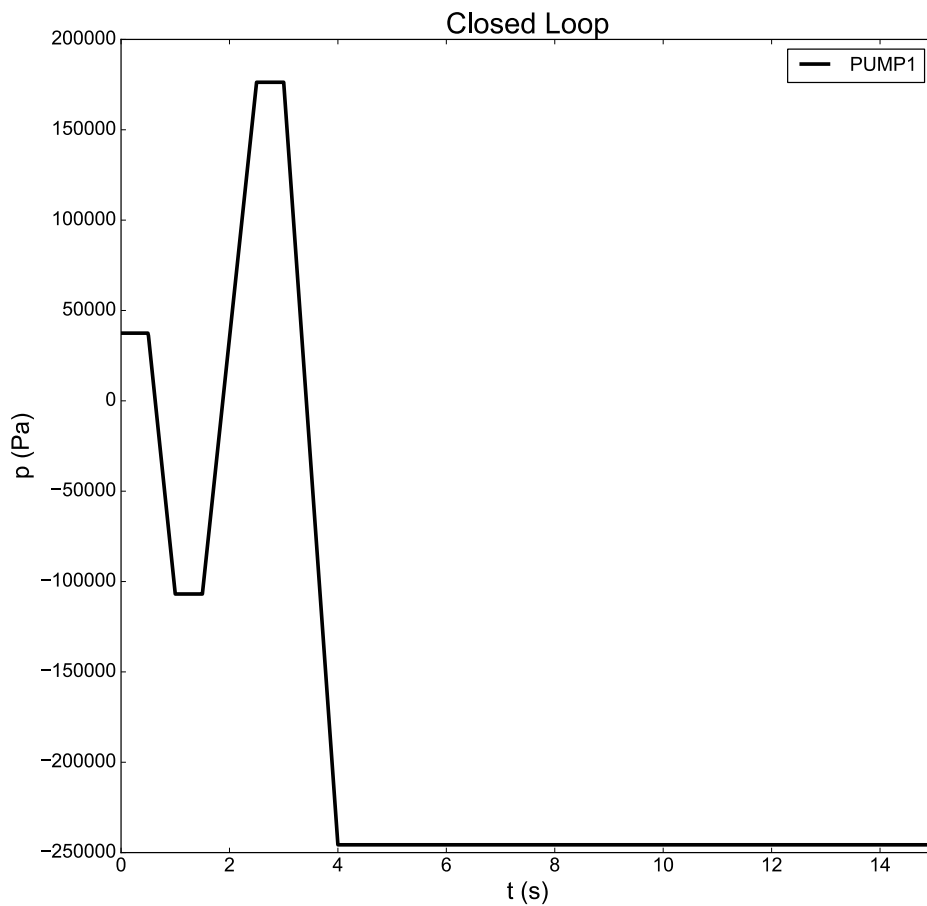


**Abb. 6.35** Geschwindigkeitsprofile an der Kopplungsschnittstelle zu PIPE1 (links) und PIPE2 (rechts).

Eine weitere Verifikation wurde mit einem geschlossenen Kreislauf durchgeführt. Dabei wurde der Teil des Kreislaufs durch eine OpenFOAM Simulation ersetzt (siehe Abb. 6.36). Der Druck im Kreislauf wurde dabei über einen Druckhalter vorgegeben, die Geschwindigkeit wurde aus der vorgegebenen, zeitlich variablen Förderhöhe einer Pumpe (in der Mitte von PIPE2) bestimmt /GLA 12/. Aufgrund der Rückkopplung zwischen den beiden Kopplungsschnittstellen ist dieses Beispiel numerisch sensibler gegenüber möglichen Fehlern an den Kopplungsstellen als offene Systeme.

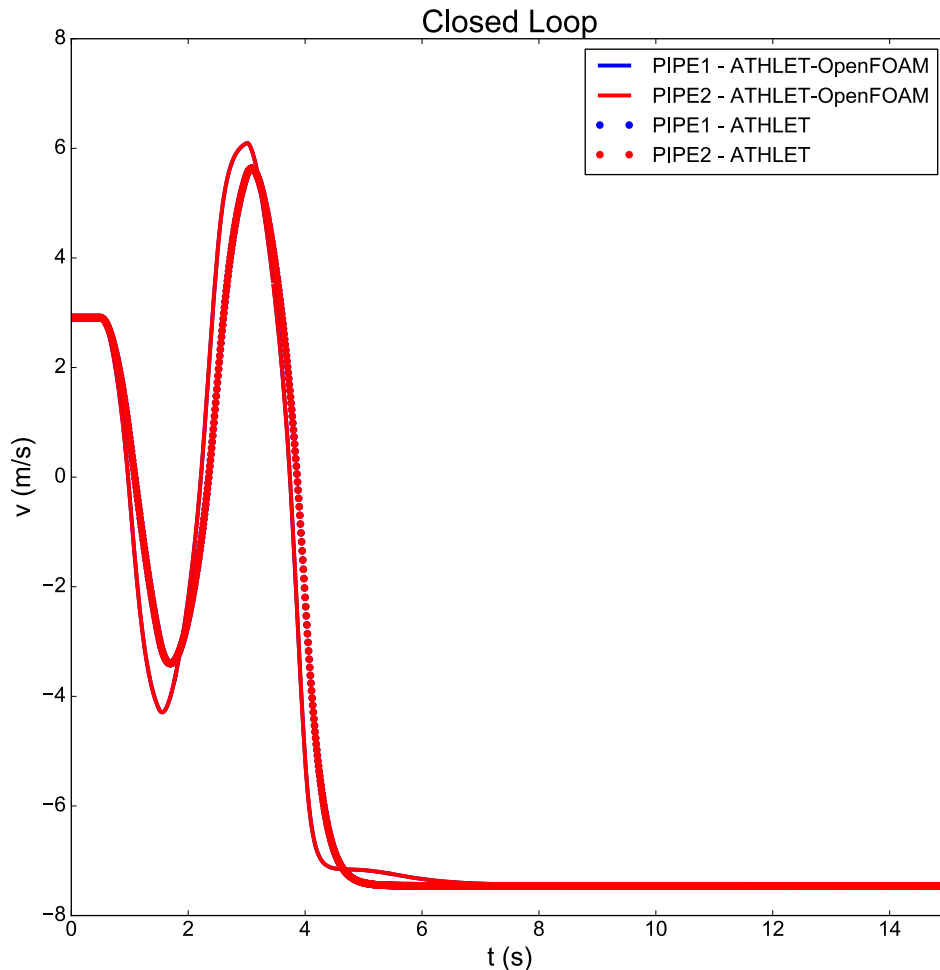


**Abb. 6.36** Schematischer Aufbau der gekoppelten Simulation mit einem geschlossenen Kreislauf.



**Abb. 6.37** Schematischer Aufbau der gekoppelten Simulation mit einem geschlossenen Kreislauf.

Die zeitabhängige Förderhöhe für die Pumpe ist in Abb. 6.37 dargestellt. Dadurch kam es im Verlauf der Simulation dreimal zu einer Änderung der Strömungsrichtung.

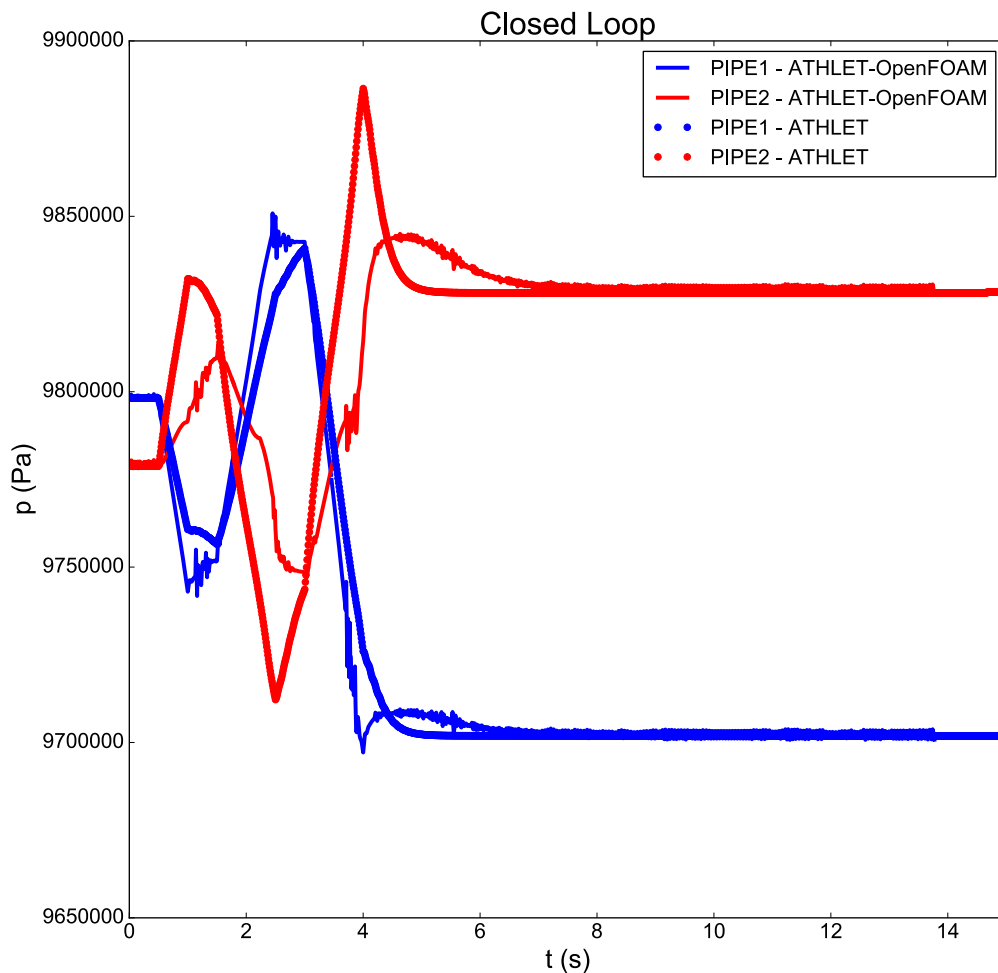


**Abb. 6.38** Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten in PIPE1 und PIPE2 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung.

In Abb. 6.38 und Abb. 6.39 sind die Strömungsgeschwindigkeiten und der Druck in jeweils der zweiten Zelle von PIPE1 und PIPE2 dargestellt. Die Simulationen zeigen qualitativ das gleiche Verhalten. Die Unterschiede in der Strömungsgeschwindigkeit können durch das physikalisch unterschiedliche Verhalten der Strömung in der ATHLET- bzw. der OpenFOAM-Simulation des jeweils unterschiedlich simulierten Abschnitts erklärt werden, insbesondere während der Zeitintervalle, in denen eine Strömungsum-

kehr stattfindet. Zu den Zeiten, für die die Randbedingungen der Simulation stationär sind (bis 0,5 s und ab 6 s), stimmen die Strömungsgeschwindigkeiten sehr gut überein.

Die Ergebnisse für die Drücke zeigen deutlicher Unterschiede für die Zeitintervalle, zu denen die Förderhöhe der Pumpe variiert. In den Zeitintervallen stationärer Randbedingungen ist wieder eine gut Übereinstimmung gegeben.

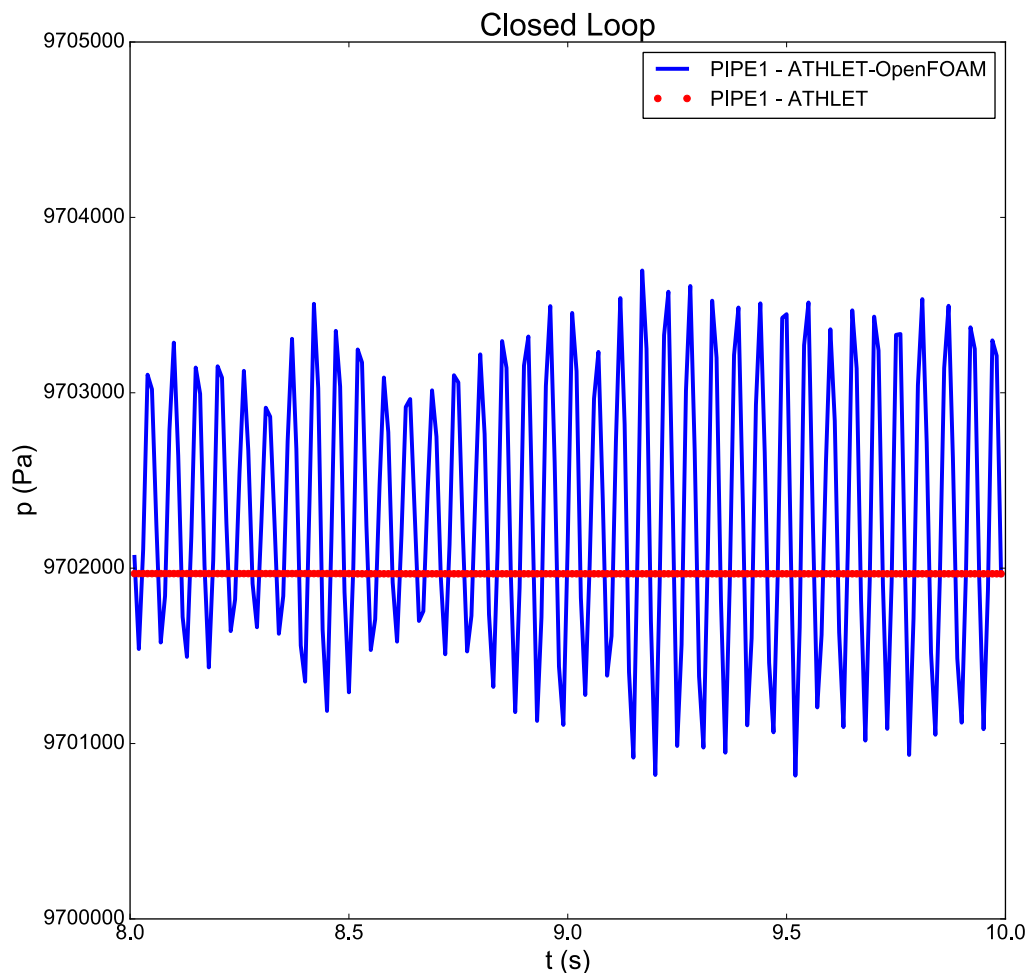


**Abb. 6.39** Vergleich der Drücke in PIPE1 und PIPE2 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung.

Abb. 6.40 zeigt die simulierten Druckwerte in einer größeren Auflösung für ein Zeitintervall stationärer Randbedingungen. Es ist zu erkennen, dass die Werte der gekoppelten Simulation um die der ATHLET-Rechnung schwingen. Dabei beträgt die Schwin-

gungsamplitude ca. 1/1000 des stationären Werts. Die Schwingungsamplitude ist ungefähr konstant für den restlichen Verlauf der Simulation.

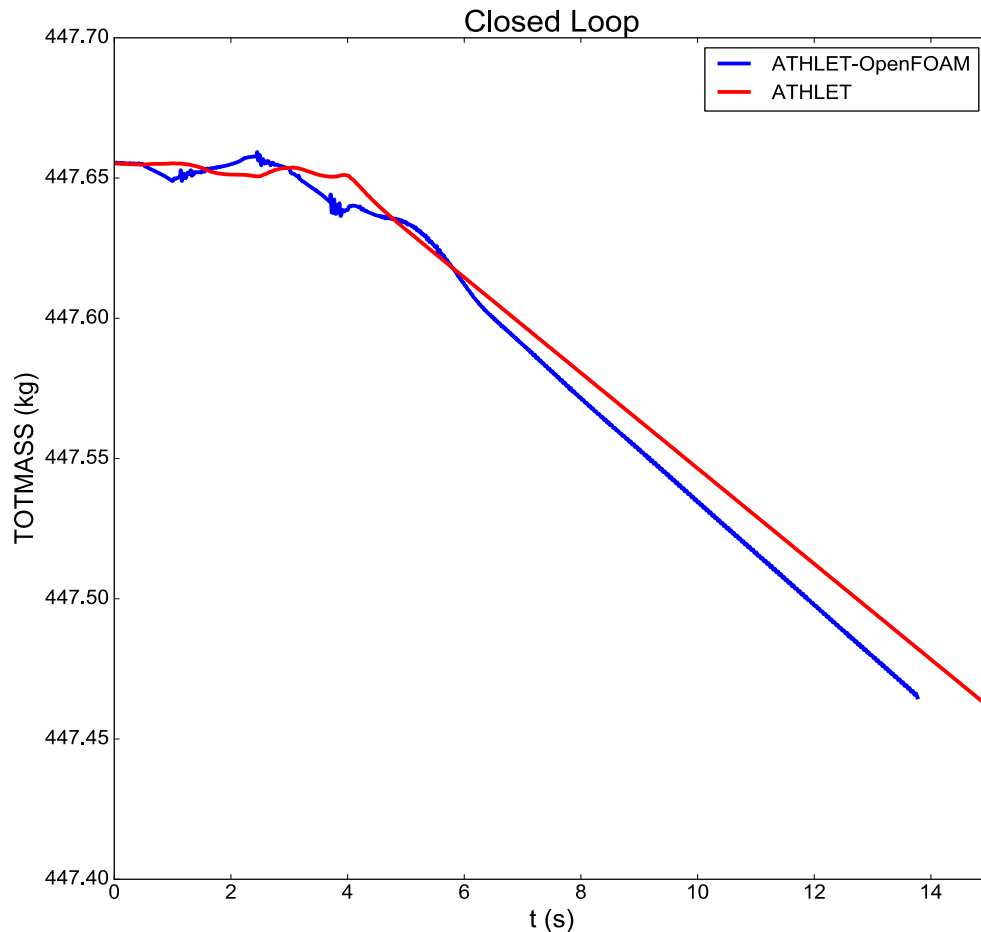
Eine Verringerung dieser Schwingungen ist wahrscheinlich durch eine Optimierung der Unterrelaxation an den Kopplungsschnittstellen möglich. Außerdem basiert die momentane Implementierung der Druckrandbedingungen an den Kopplungsschnittstellen auf der OpenFOAM-Randbedingung `buoyantPressure`, die mittlerweile durch die Randbedingung `fixedFluxPressure` ersetzt wurde, da diese eine höhere numerische Stabilität aufweist. Durch eine entsprechende Anpassung der Kopplungsrandbedingung könnte es ebenfalls zu einer Erhöhung der numerischen Stabilität kommen.



**Abb. 6.40** Vergleich der Drücke in PIPE1 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung bei stationären Randbedingungen

Abb. 6.41 zeigt die Gesamtmasse im System. Der Abfall ab  $t = 5$  s wird durch die Dichteverringering des Wassers aufgrund der durch die Pumpe ins System eingebrachten

Leistung verursacht. Die Differenz zwischen den der gekoppelten und nicht gekoppelten Simulation beträgt ca. 1/10000.



**Abb. 6.41** Vergleich der Gesamtmasse im System für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung.

Insgesamt zeigen die Verifikationsrechnungen, dass es physikalisch begründete Unterschiede zwischen den Simulationsergebnissen gibt. Unterschiede, die auf konzeptionelle oder Programmierfehler hindeuten, konnten hingegen nicht gefunden werden.

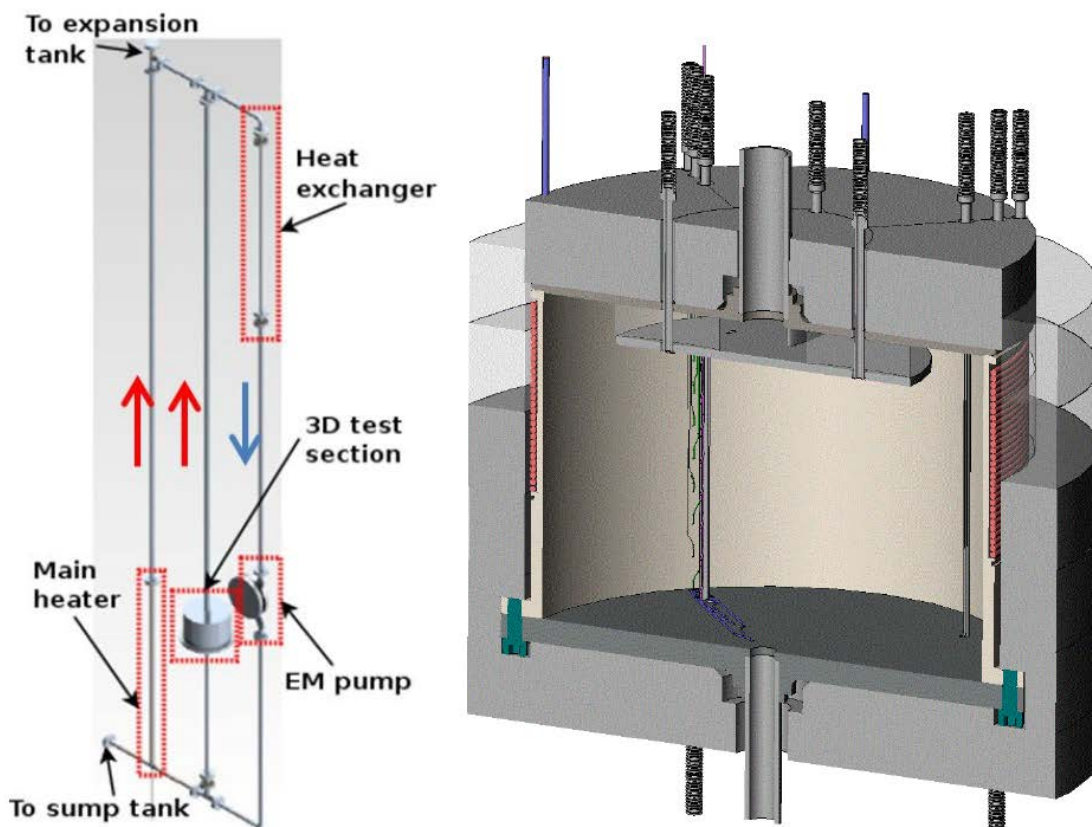
### 6.3.3 Validierung der Kopplung

Die physikalische Validierung der Kopplung zwischen OpenFOAM und ATHLET erfolgte mit Hilfe von Nachrechnungen eines Versuchs an der Versuchsanlage TALL /GRI15/. Diese Versuchsanlage verwendet als Fluid ein Blei-Bismut-Eutektikum (LBE)



und enthält eine spezielle Teststrecke, um die Simulation drei-dimensionaler Effekte mit Hilfe von CFD-Codes zu validieren. Der für die Validierung verwendete Versuch wurde im Rahmen des EU-Projekts THINS durchgeführt.

Der Primärkreis (siehe Abb. 6.42) besteht aus drei vertikalen Strängen, wobei im mittleren Strang eine spezielle Teststrecke zur Simulation komplexer, dreidimensionaler Strömungen installiert wurde. Der obere Teil der äußeren Wand dieser Teststrecke ist beheizbar.

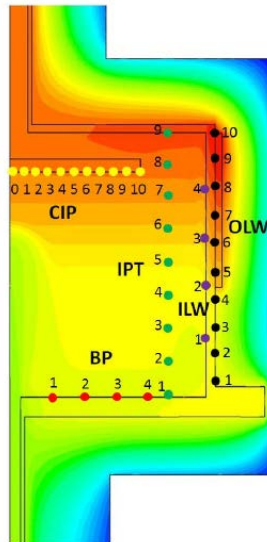


**Abb. 6.42** TALL-3D Primärkreis (links) und 3D-Teststrecke (rechts) /PAP15b/.

Um Vergleichsdaten für CFD-Simulationen zu erhalten, ist dieser Testbereich mit Temperaturmessfühlern an verschiedenen Positionen ausgestattet.

Im Versuch T01.09, der zur Validierung verwendet wurde, erfolgte eine Abschaltung der Pumpe im Primärkreis. Daraufhin stellte sich ein Naturumlauf ein, in dessen Verlauf es auch kurzzeitig zu einer Strömungsumkehr in der 3D-Teststrecke kam.

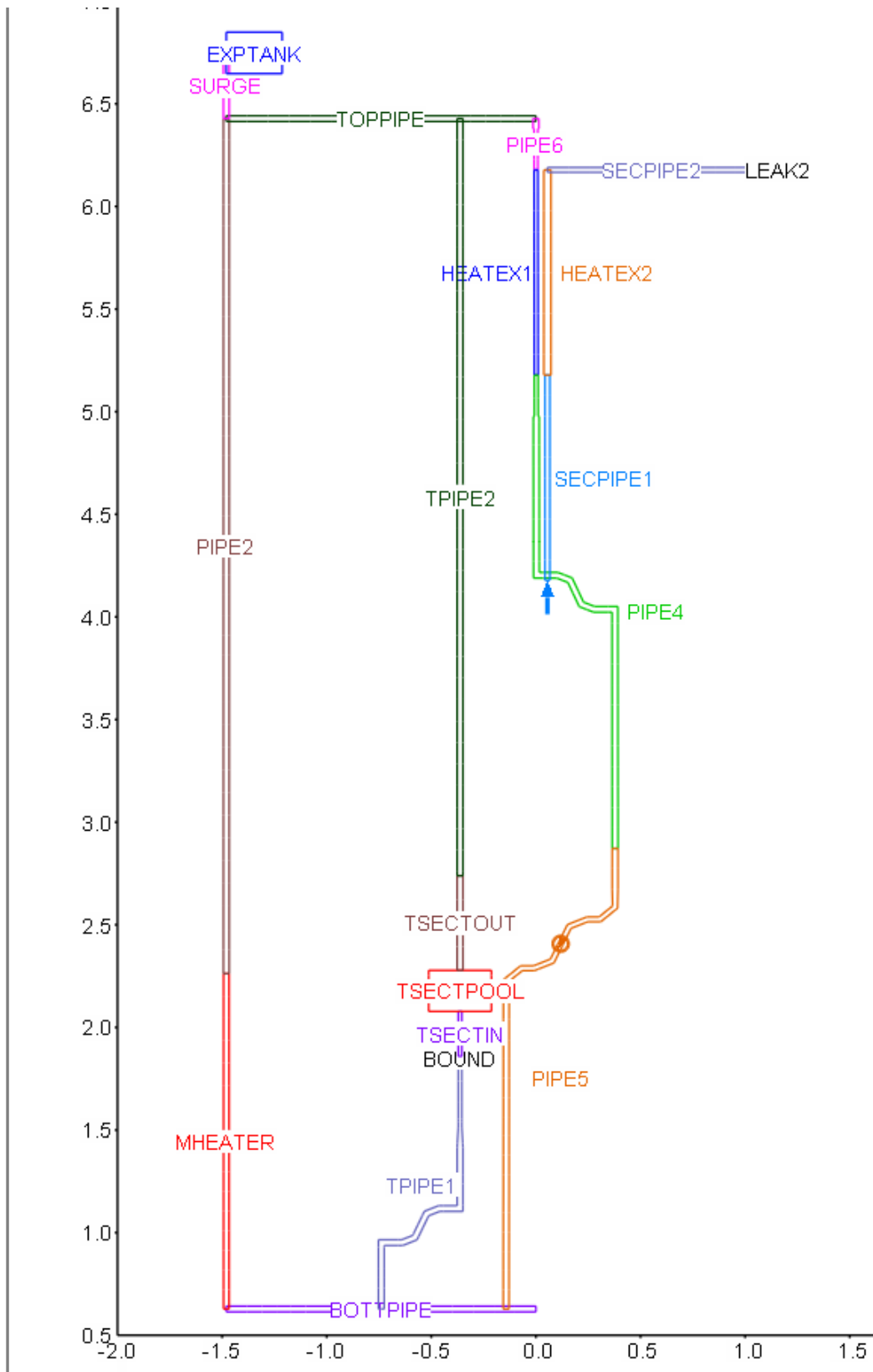
In Abb. 6.43 sind die Messstellen dargestellt, an denen die Temperaturen während des Versuchs T01.09 erfasst wurden. Diese werden im Folgenden mit den Simulationsdaten der gekoppelten Rechnung mit ATHLET-OpenFOAM verglichen.



**Abb. 6.43** Messstellen im Experiment /PAP15a/.

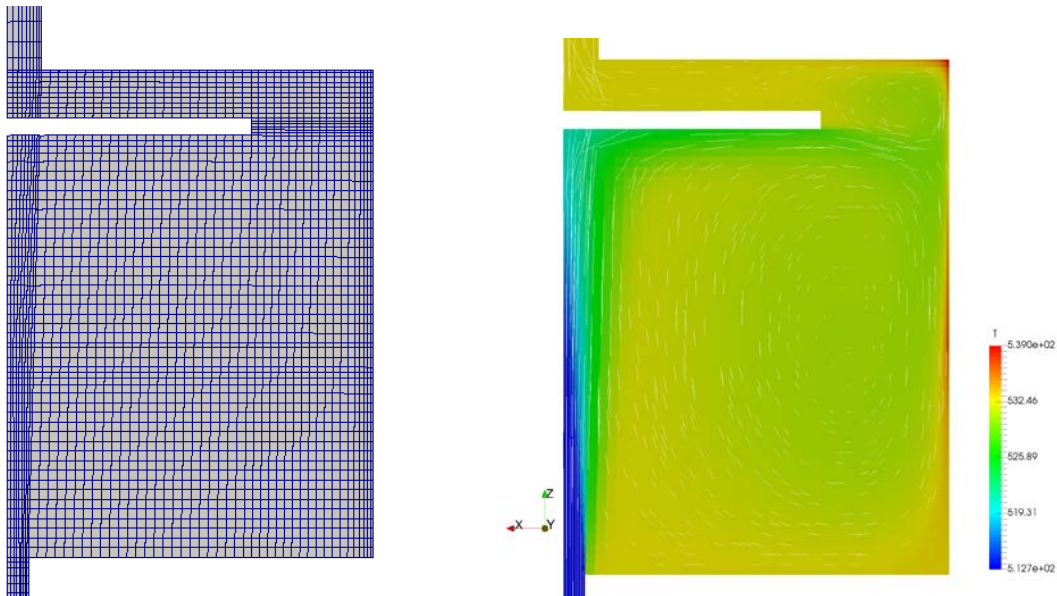
Die Geometrie /PAP15b/ der Simulationen mit ATHLET bzw. des ATHLET-Anteils in der gekoppelten Simulation mit ATHLET und OpenFOAM ist in Abb. 6.44 dargestellt.

Um die gekoppelte Simulation starten zu können, musste zunächst das Rechengebiet von OpenFOAM in einer quasi-stationären Simulation mit OpenFOAM alleine initialisiert werden. Dazu wurden in einer transienten Simulation statische Randbedingungen an den Rändern des Rechengebiets vorgegeben, die in der gekoppelten Simulation als Schnittstellen zu ATHLET dienen. Diese Randbedingungen basierten auf Werten, die in einer stand-alone Simulation von ATHLET ermittelt worden waren. Für die gekoppelte Rechnung wurden anschließend die Randbedingungen an den Schnittstellen in Kopplungsrandbedingungen geändert, wobei die zuvor berechneten Werte der Strömungsfelder im Inneren und auf den Rändern des Rechengebiets nicht verändert wurden und somit als Startwerte für die gekoppelte Simulation dienen.



**Abb. 6.44** Die Geometrie /PAP15b/ der Simulationen mit ATHLET bzw. des ATHLET-Anteils in der gekoppelten Simulation mit ATHLET und OpenFOAM.

In Abb. 6.45 (links) ist das Rechengitter dargestellt, das für die gekoppelte Rechnung verwendet wurde. Es besteht aus einem Kreissegment mit einem Öffnungswinkel von  $1^\circ$  in der horizontalen Ebene und ist eine zweidimensionale Repräsentation der 3D-Testregion. Es besteht aus (lediglich) ca. 3900 Zellen, um mit auch mit reduziertem Rechenaufwand Testrechnungen durchführen zu können.

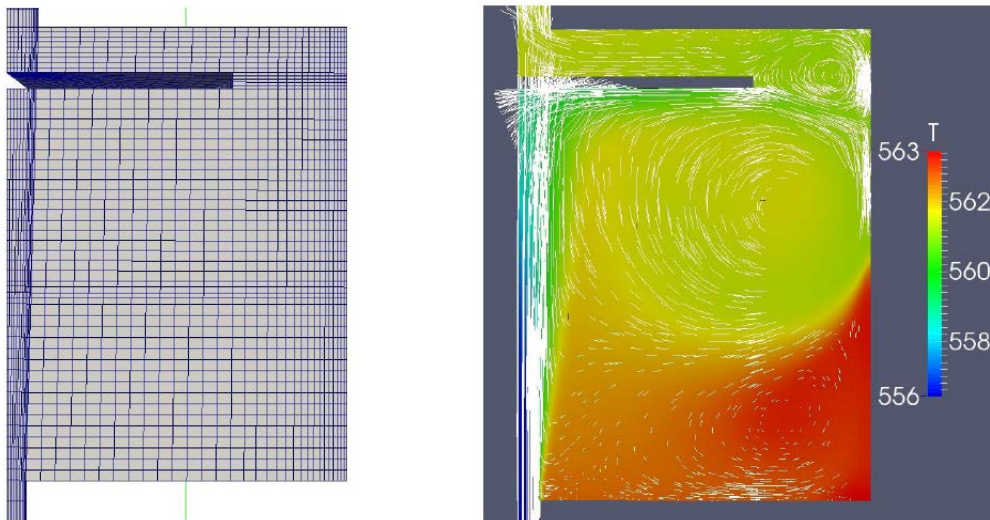


**Abb. 6.45** Rechengitter für Simulationen mit der  $1^\circ$ -Geometrie (links) und Geschwindigkeitsfeld während der erzwungenen Strömung (rechts) für die aktuelle Simulation

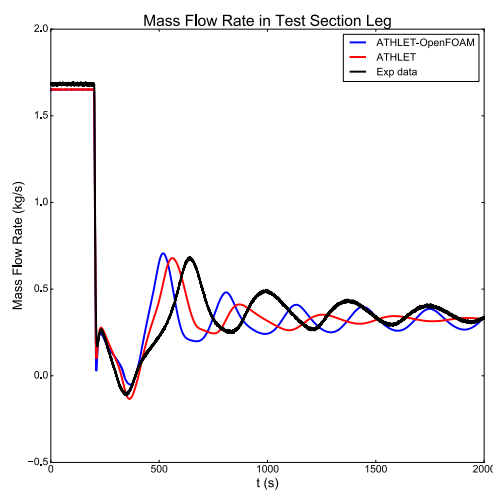
Abb. 6.45 (rechts) zeigt das Strömungsfeld während des Zwangsumlaufs in der 3D-Testregion vor Abschalten der Pumpe. Man erkennt einen großen Wirbel im Bereich unter der Stauplatte, durch den die Strömung an der beheizten Wand vorgeführt wird und sich im gesamten Bereich der 3D-Testregion vermischt. Entsprechend ist die Temperaturverteilung in der gesamten 3D-Testregion sehr homogen.

In einer Bachelorarbeit im Rahmen dieses Projekts wurde auch eine Simulation auf einem Rechengitter durchgeführt, das aus einem Viertel der Zylindergeometrie bestand (siehe Abb. 6.46 links). Das Strömungsfeld zeigt in diesem Fall im Bereich der 3D-Testregion zwei Wirbel. Dadurch ergibt sich auch andere Temperaturverteilung. Im unteren Bereich des Zylinders treten dabei höher Temperaturen auf als im oberen Bereich. Die Temperaturverteilung (siehe Abb. 6-46 rechts) ist insgesamt inhomogener. Dieses Verhalten wurde auch in den gekoppelten Rechnungen mit ATHLET-ANSYS

CFX beobachtet /PAP15a/. Der Einfluss des Rechengitters sollte in weiteren Simulationen geklärt werden.



**Abb. 6.46** Rechengitter für Simulationen mit  $\frac{1}{4}$  Zylindergeometrie (links) und Geschwindigkeitsfeld während der erzwungenen Strömung (rechts) /RIV14/.

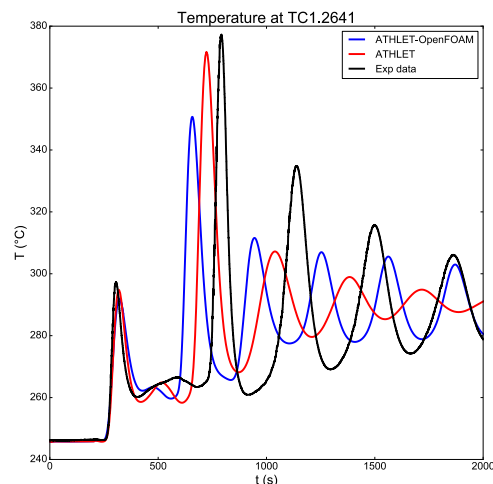


**Abb. 6.47** Massenstrom in der Teststrecke.

In Abb. 6.47 ist der Massenstrom in der Teststrecke (mittlerer Strang in Abb. 6.44) dargestellt. Qualitativ werden die Ergebnisse des Experiments gut wiedergegeben. So wird sowohl in der ATHLET- wie auch der ATHLET-OpenFOAM-Rechnung die Strömungsumkehr in der Teststrecke direkt nach Abschalten der Pumpe korrekt simuliert. Allerdings ist in der gekoppelten Simulationen der Effekt, dass die Oszillationen des Massenstroms während des Naturumlaufs ( $t > 400$  s) in der Simulation eine kürzere

Periode aufweisen als im Experiment, in der gekoppelten Simulationen sogar noch stärker ausgeprägt als in der ATHLET-Rechnung.

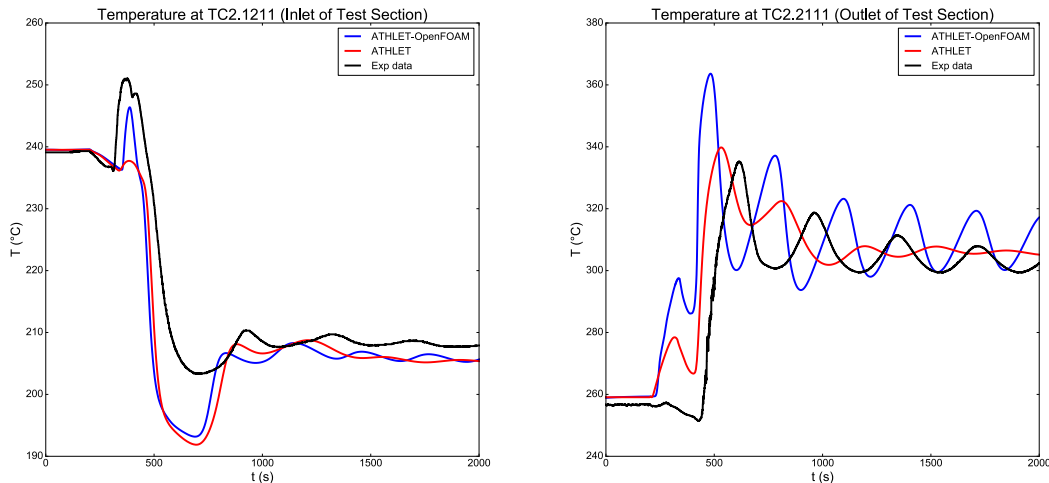
Es konnte nicht abschließend geklärt werden, wodurch dieses Verhalten in der gekoppelten Simulation ausgelöst wurde. Eine Möglichkeit wäre, dass durch die vereinfachte, quasi-zweidimensionale Geometrie, der Druckverlust über die Teststrecke falsch berechnet wurde. Eine andere mögliche Ursache könnte in der Anpassung der Druckwerte an den Kopplungsschnittstellen sein. Durch die große Dichte von LBE können sich Unterschiede in der Höhenkoordinate der Kopplungsschnittstelle zwischen den beiden Solver sehr stark auswirken. Momentan ist in der Kopplungsschnittstelle eine Methode implementiert, die Höhe zu extrahieren, für die jeweils der Druck definiert ist. In OpenFOAM werden die Druckwerte der Kopplungsschnittstelle jeweils an der Grenzfläche berechnet. Deshalb ist es bisher notwendig, eine manuelle Anpassung in der Kopplungsschnittstelle vorzunehmen. Diese Anpassung sollte in Zukunft automatisch erfolgen.



**Abb. 6.48** Temperatur am Auslass des Main Heater.

Abb. 6.48 zeigt die Temperatur am Auslass des Main Heaters. Bedingt durch das schnellere Anlaufen des Naturumlaufs ergibt sich in der gekoppelten Simulation eine Verschiebung der Temperaturmaxima. Auch fallen diese niedriger aus, da durch das verfrühte Anlaufen eine kürzere Zeitspanne verfügbar war, in der sich das Fluid aufheizen konnte.

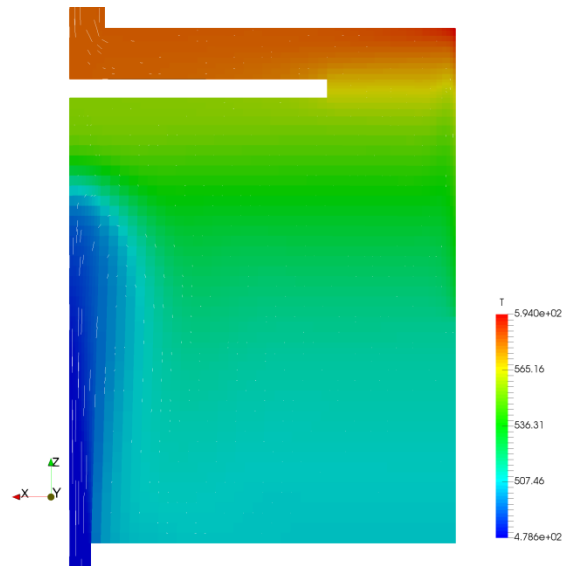
In Abb. 6.49 sind die Temperaturen am Ein- (links) und Auslass (rechts) der 3D-Teststrecke dargestellt. Die Temperaturerhöhung durch die Umkehr der Strömungsrichtung, die im Experiment beobachtet wurde, wird durch die gekoppelte Simulation korrekt wiedergegeben, während die ATHLET-Rechnung diese Beobachtung nicht reproduzieren kann.



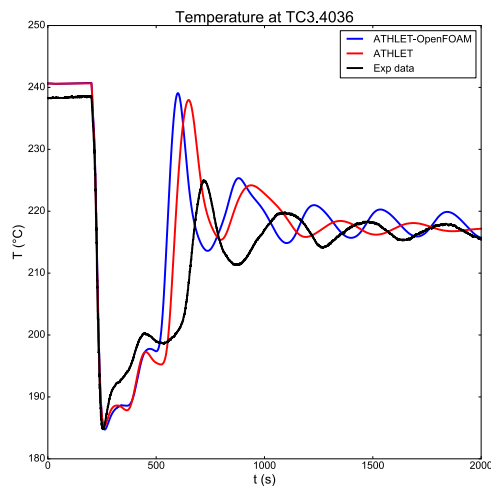
**Abb. 6.49** Temperatur am Ein- und Auslass der Teststrecke.

Sowohl die ATHLET- wie auch die ATHLET-OpenFOAM-Rechnung zeigen einen Temperaturanstieg am Auslass der Teststrecke ( $t$  ca. 350 s bis 450 s), der im Experiment nicht beobachtet wurde. In beiden Simulationen kam es nach dem Pumpenstopp zu einem kurzzeitigen Anhalten der Strömung ( $t$  ca. 210 s), die zu einer Erhitzung des Fluides in der 3D-Testregion führte, bevor für ca. 50 s die Strömung weiter nach oben gerichtet war. Diese Reduktion des Massenstroms konnte im Experiment nur sehr schwach beobachtet werden. Entsprechend konnte sich das Fluid nicht so stark erhitzen und dieser Temperaturanstieg konnte nicht beobachtet werden. Die gekoppelte Rechnung mit ATHLET-ANSYS CFX in /PAP15b/ zeigt dieses Verhalten nicht und stimmte besser mit dem Experiment überein. Die Rechnung mit RELAP (nicht gekoppelt) in /PAP15b/ zeigte dagegen ebenfalls das falsche Verhalten.

In weiteren Simulationen ist zu klären, wie das Verhalten von ATHLET-OpenFOAM optimiert werden kann. Mögliche Ansätze wären eine Reduktion der Zeitschrittweite sowie eine Verschärfung der Konvergenzkriterien. Allerdings könnte auch dieser Effekt durch eine nicht optimale Anpassung der Druckwerte an den Kopplungsschnittstellen begründet sein.



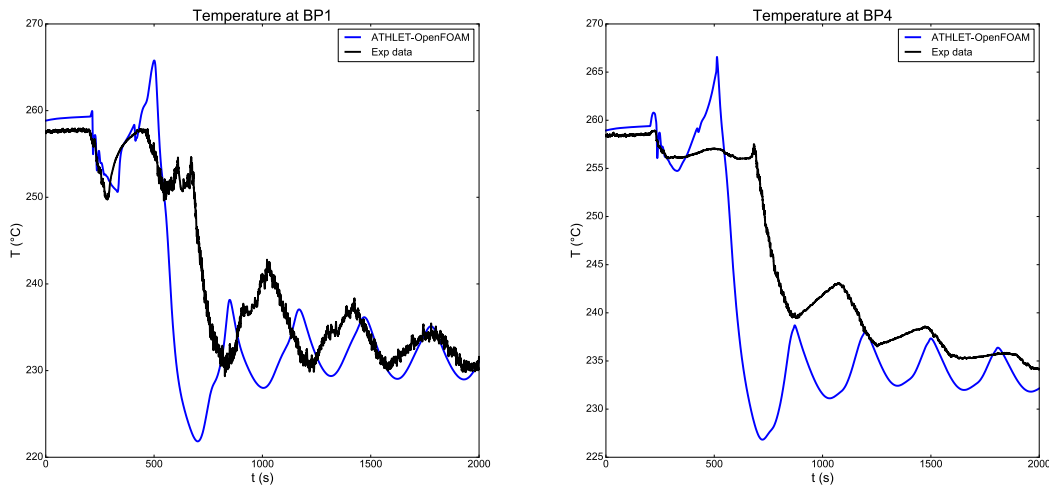
**Abb. 6.50** Temperatur (in K) in der 3D Testregion nach Einsetzen des Naturumlaufs (t = 3000 s).



**Abb. 6.51** Temperatur am Auslass des Wärmetauschers.

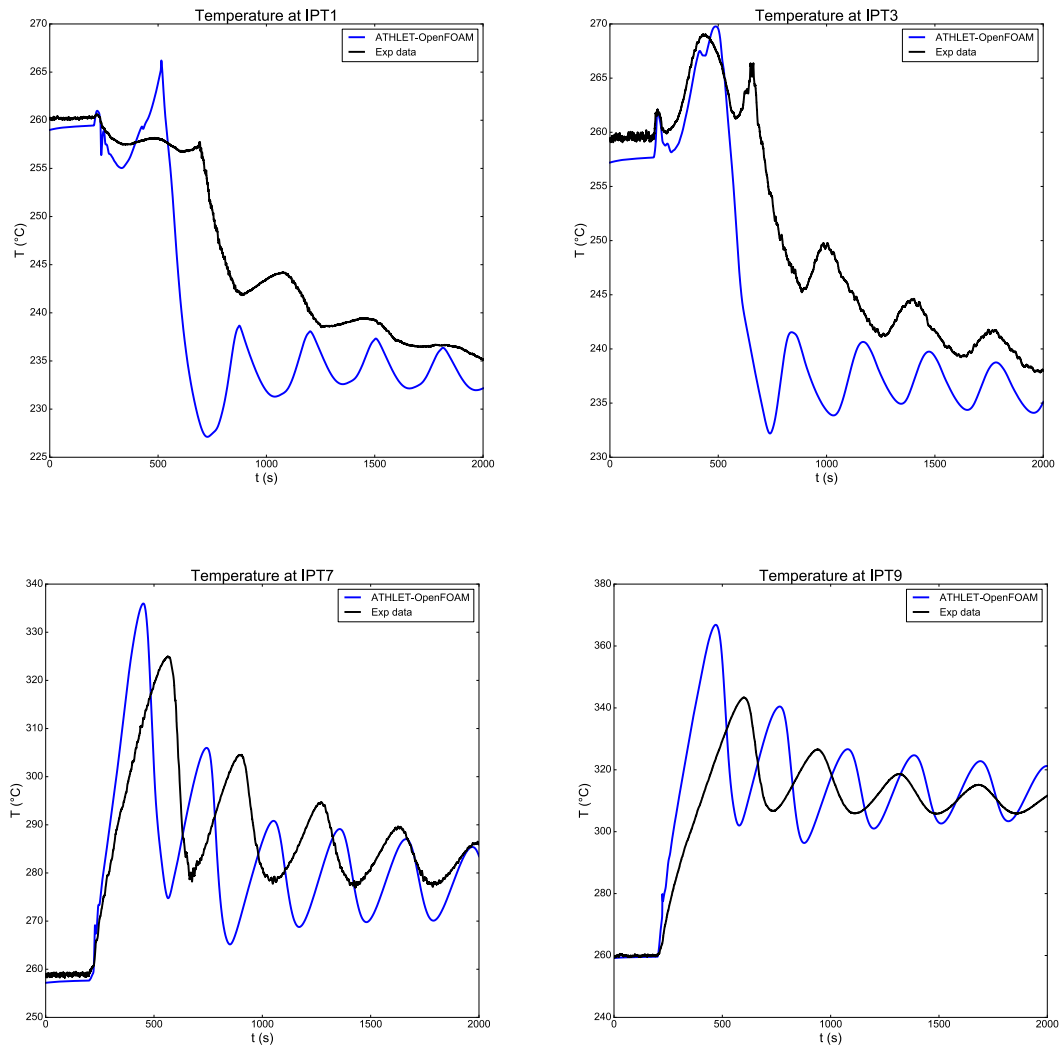
In Abb. 6-51 werden die Temperaturwerte am Auslass des Wärmetauschers (im rechten Strang in Abb. 6.44) dargestellt. Wieder treten die Maxima der Temperaturosillationen in den Simulationen zu früheren Zeitpunkten auf als im Experiment. Dass die Maxima in den Simulationen höhere Werte aufweisen, könnte daran liegen, dass die Wärmeverluste in den Simulationen unterschätzt wurden. Die Simulationen mit RELAP5 in /PAP15b/ zeigen für diese Temperaturmessstelle die beste Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.





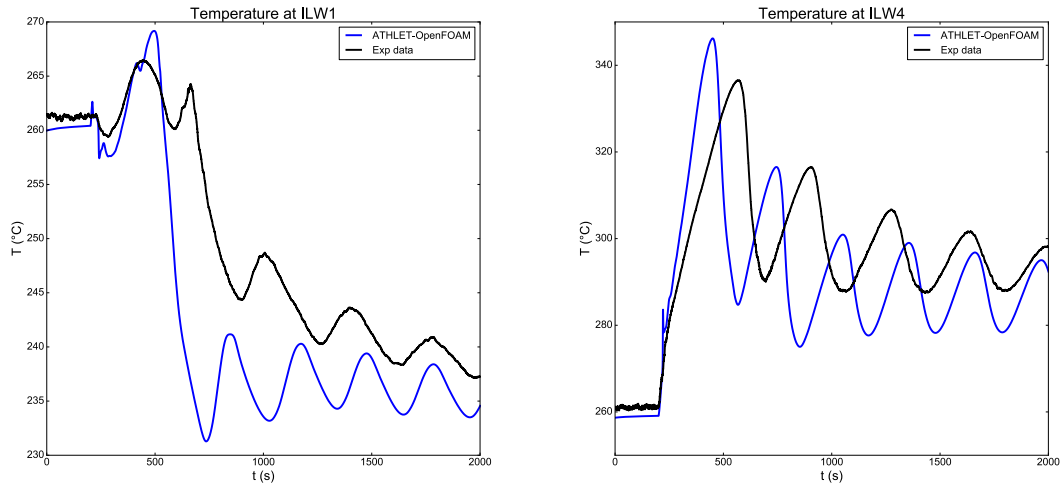
**Abb. 6.52** Temperatur an der Bodenplatte des 3D-Testregion.

Abb. 6.52 zeigt den Verlauf der Temperatur am Boden der 3D-Testregion (siehe Abb. 6.43 für die genaue Position der Messpunkte). Nach dem Stopp des Zwangsumlaufs kam es dort zu einer Reduzierung der Temperatur, da das durch den Heizer im oberen Teil der 3D-Testregion erwärmte LBE nicht mehr durch den bzw. die Wirbel nach unten verlagert wird. Dieses Verhalten wird durch die Simulation gut wiedergegeben. Nach Einsetzen des Naturumlaufs bildet sich dann die in Abb. 6.50 dargestellte Schichtung aus, die zu einer noch stärkeren Reduktion der Temperatur an der Bodenplatte führt. Auch dieses Verhalten gibt die Simulation richtig wieder. Allerdings wird durch das zu frühe Einsetzen des Naturumlaufs die Abkühlung über- bzw. die Temperatur unterschätzt. Gegen Ende der Simulation stellt sich dann der gleiche Temperaturgleichgewichtswert ein wie im Experiment. Durch den zu früh und zu stark einsetzenden Naturumlauf liefert die Simulation einen Temperaturanstieg (bei ca.  $t = 500$  s), der im Experiment nicht beobachtet werden konnte. Die Simulationen mit ATHLET-ANSYS CFX bzw. RELAP5-STAR CCM+ in /PAP15b/ zeigen dieses Verhalten nicht.

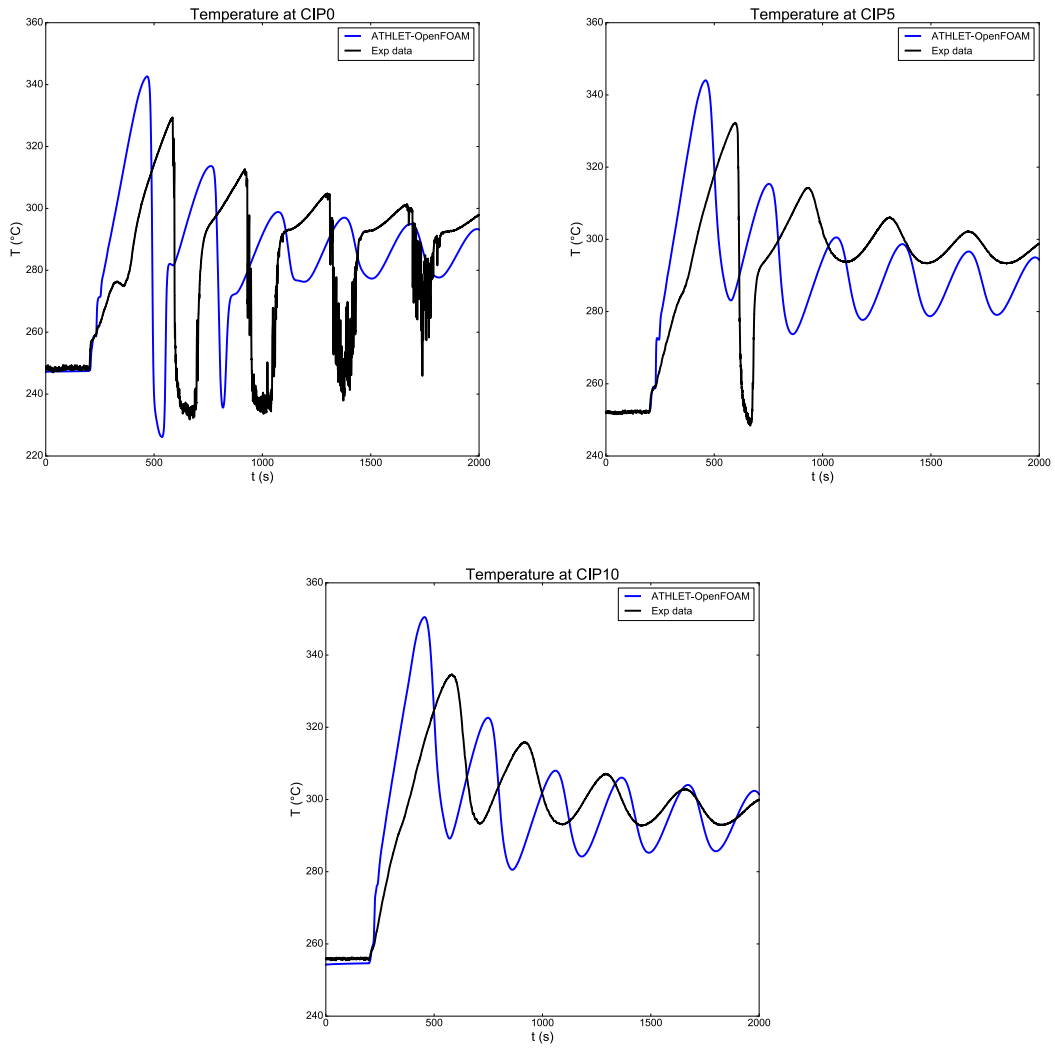


**Abb. 6.53** Temperatur innerhalb der 3D-Testregion.

Der Unterschied im Verlauf des Massenstroms in der Testschleife erklärt auch die Unterschiede, die für die Temperaturmessungen innerhalb der 3D-Testregion (siehe Abb. 6.53), für die Innenseite der Seitenwand (siehe Abb. 6.54) und die Unterseite der Prallplatte (siehe Abb. 6.55) ermittelt wurden. Der Temperaturanstieg wird zu Beginn des Naturumlaufs in der gekoppelten Simulation überschätzt und die Oszillationen haben eine zu kurze Periode. Der Gleichgewichtszustand am Ende der Simulation wird wieder gut erreicht.



**Abb. 6.54** Temperaturen an der Innenseite der Seitenwand der 3D-Testregion.



**Abb. 6.55** Temperaturen an der Unterseite der Prallplatte in der 3D-Testregion.

Insgesamt zeigen die Ergebnisse der Validierungsrechnung der Kopplung zwischen ATHLET und OpenFOAM, dass insbesondere in Bezug auf die Kopplung der Druckrandbedingungen noch Verbesserungsbedarf besteht. Qualitativ liefert die Simulation eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen des Versuchs. Teilweise können mit der gekoppelten Version auch Aussagen gemacht werden, die eine Simulation mit ATHLET alleine nicht liefern kann, z. B. den Temperaturanstieg durch die Rückströmung im Einlass des 3D-Testgebiets (siehe Abb. 6.49) oder Aussagen über die Temperaturverteilung innerhalb der 3D-Testregion. Durch die Probleme bei der Ermittlung des Massenstroms in der gekoppelten Rechnung sind allerdings alle Temperaturvorhersagen beeinträchtigt.

#### **6.3.4 Zusammenfassung**

Die OpenFOAM-Kompetenz der GRS konnte durch die Arbeiten in diesem Projekt vertieft werden. Dies zeigt sich z. B. darin, dass jetzt auch Rechnungen auf einem nicht-idealen Rechengitter möglich waren, die zuvor noch nicht möglich waren. Für einphasige Strömungen liefert OpenFOAM mittlerweile vergleichbare Ergebnisse wie kommerzielle CFD-Codes. Dies zeigt sich auch durch die große Anzahl von wissenschaftlichen Veröffentlichungen zur Anwendung von OpenFOAM im Bereich von kerntechnischen Fragestellungen /SIG16/ (im März 2016 mehr als 50 Veröffentlichungen in Peer-Reviewed Journals).

Im Rahmen dieses Projekts wurde die Kopplungsmöglichkeit von ATHLET mit CFD-Codes auf eine Kopplung mit OpenFOAM erweitert. Sie wurde mit qualitativ guten Ergebnissen am Beispiel eines Experiments an der TALL-Versuchsanlage validiert. Dabei hat sich noch weiterer Verbesserungsbedarf gezeigt. Dies betrifft insbesondere die Kopplung der Druckrandbedingung bei Kopplungsschnittstellen mit Strömungen in vertikaler Richtung, da durch die große Dichte von Flüssigmetallen kleine Ungenauigkeiten zu großen Druckdifferenz führen können.

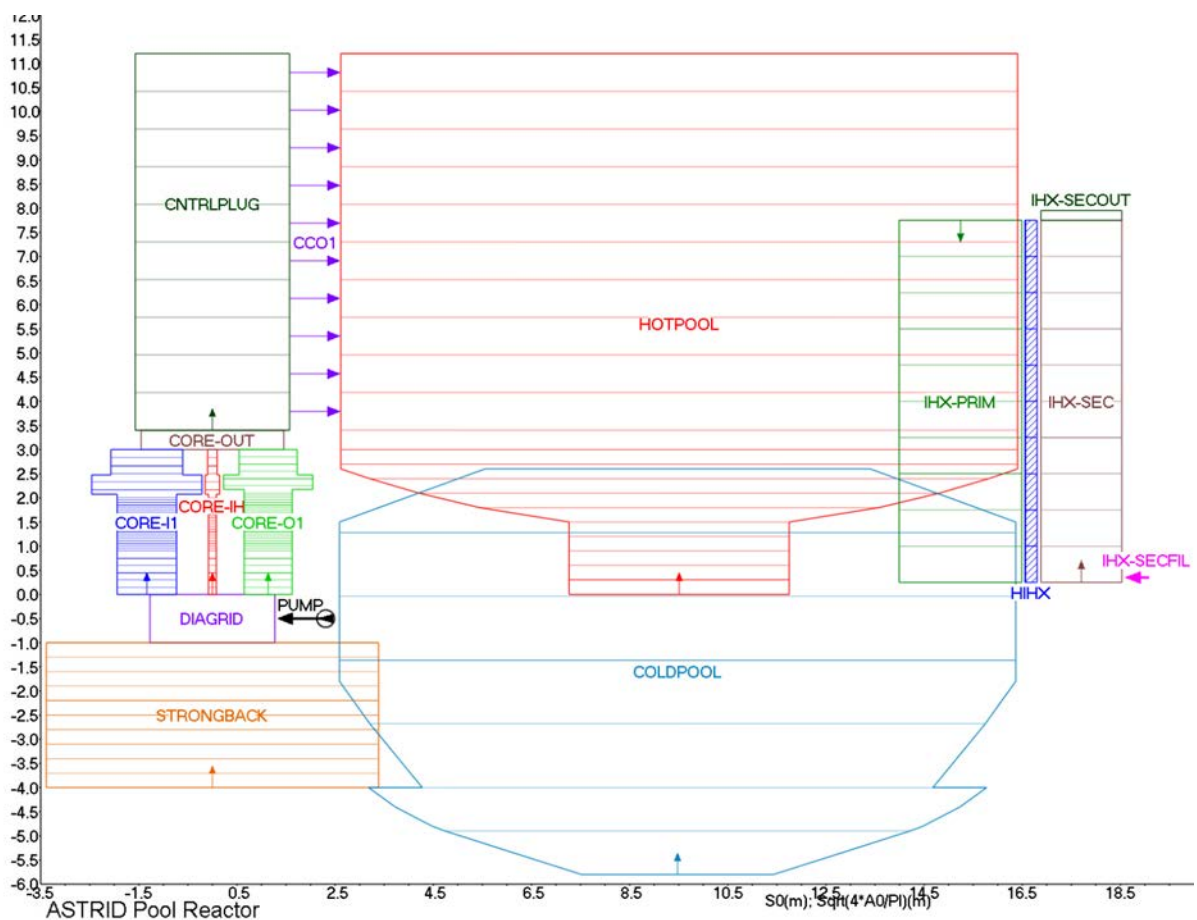
#### **6.4 AP 4.4: Erstellung von ATHLET-Modellen ausgewählter flüssigmetallgekühlter Systeme**

Die Arbeiten zur Erstellung von ATHLET-Modellen ausgewählter flüssigmetallgekühlter Systeme orientiert sich an aktuellen europäischen Projekten für flüssigmetallgekühlte kritische und unterkritische Systeme mit Natrium- bzw. Blei-Wismut-(LBE-)Kühlung.

## 6.4.1 ASTRID

### 6.4.1.1 Reaktorkern und Komponenten

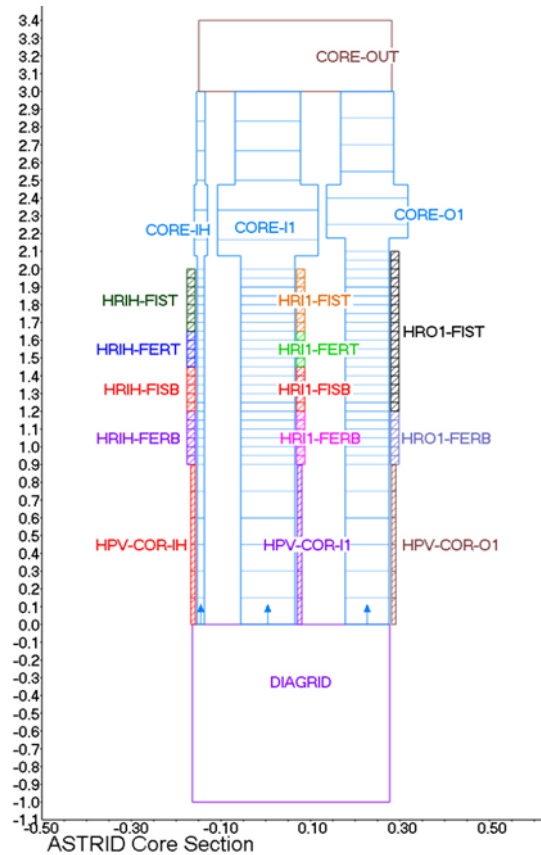
Das thermohydraulische Modell, welches für die Simulation der ULOF-Transiente mit ATHLET entwickelt wurde, enthält alle relevanten Komponenten im Kernbehälter (ausgenommen das Overflow-Device) und ist in Abb. 6.56 dargestellt. Darin sind alle Komponenten des Modells, deren Durchmesser (abgeleitet von freien Kühlmittelströmungsfläche) und ihre Höhenlagen gezeigt. Es enthält ferner die Wärmetauscherrohre sowie die Sekundärseite des Wärmetauschers.



**Abb. 6.56** Schema des ATHLET-Simulationsmodells für ASTRID.

Die Modellierung des Reaktorkerns ist im Detail in Abb. 6.57 wiedergegeben. Gemäß Spezifikation zur thermohydraulischen Modellierung sind drei Brennelement-Gruppen modelliert: heißes Brennelement der inneren radialen Kernzone (Anzahl im Kern: insgesamt 3), mittleres Brennelement der inneren radialen Kernzone (174) und mittleres

Brennelement der äußeren radialen Kernzone (114). Verschiedene Wärmeleitobjekte repräsentieren in den Brennstäben Spalt-, Brut- und unbeheizte Zonen.



**Abb. 6.57** Modellierung und Nodalisierung des Reaktorkernbereichs von ASTRID

### Beschreibung der Thermofluid-Objekte des ATHLET-Modells

CORE-IH	Heißkanal in der inneren radialen Kernzone (3 SAs)
CORE-I1	mittlerer Kanal in der inneren radialen Kernzone (174 SAs)
CORE-O1	mittlerer Kanal in der äußeren radialen Kernzone (114 SAs)
CCO1	<i>Control Rod Plug Outlet</i> zum <i>Hot Pool</i> (ATHLET-Querverbindungs-Object)
PUMP	Umwälzpumpe zwischen <i>Cold Pool</i> und <i>Diagrid</i> (Ausführung 3-fach)
IHX-PRIM	Wärmetauscher-Primärseite (Ausführung 4-fach)
IHX-SEC	Wärmetauscher-Sekundärseite (Ausführung 4-fach)
IHX-SECFIL	Na-Fill-Komponente am sekundärseitigen Wärmetauschereintritt
IHX SECOUT	Druck-Enthalpie-Randbedingung am sekundärseitigen Wärmetauscheraustritt

### **Beschreibung der Wärmeleit-Objekte des ATHLET-Modells:**

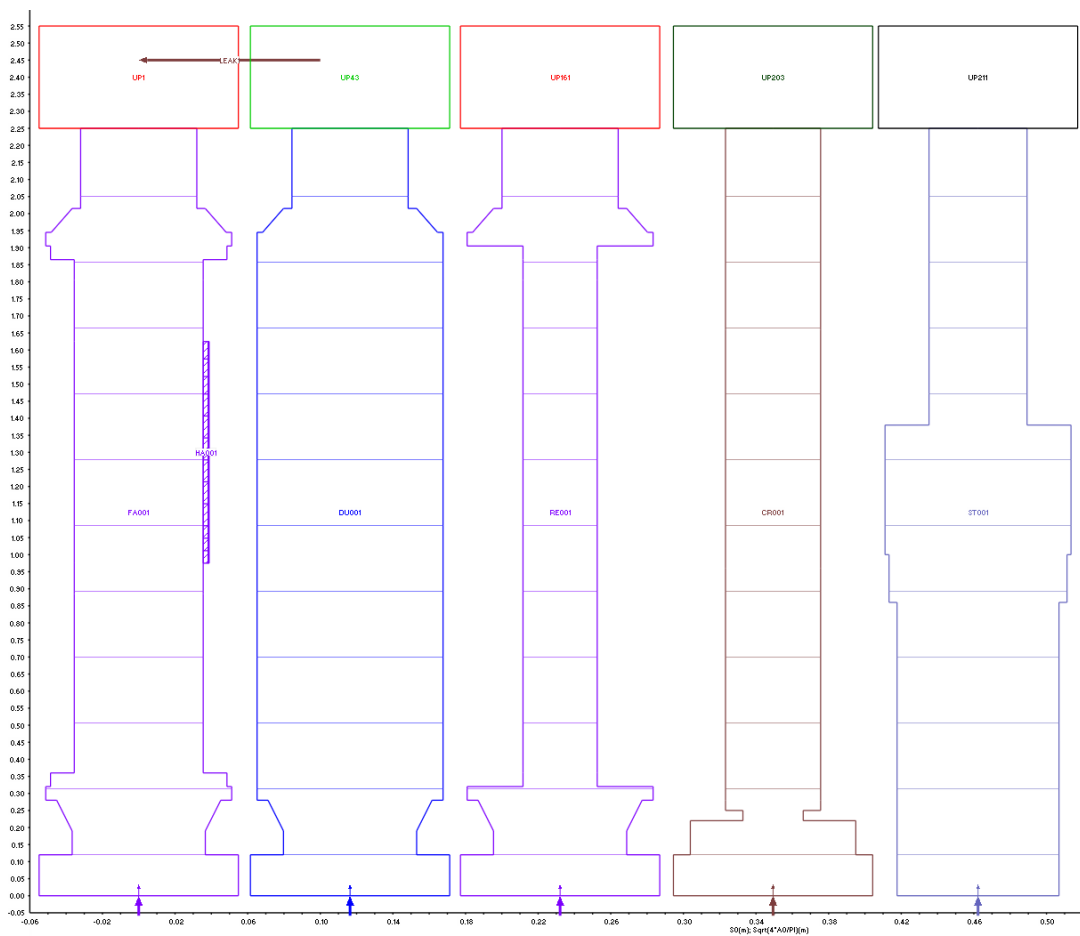
HPV-COR...	unbeheizte Stäbe (nur Hüllrohr)
HR...	beheizte Stäbe
IH	Heißkanal der inneren radialen Kernzone
I1	mittlerer Kanal der inneren radialen Kernzone
O1	mittlerer Kanal der äußeren radialen Kernzone
FER	Brutzone
FIS	Spaltzone
B	unterer Abschnitt ( <i>bottom</i> )
T	oberer Abschnitt ( <i>top</i> )
HIHX	Wärmetauscherrohre

#### **6.4.1.2 Modellierung der Brennstäbe**

Die Brennstäbe werden im ATHLET-Modell durch zylindrische Wärmeleitobjekte (HCO, Heat Conduction Objects) dargestellt. Sie bestehen aus den Materialien *MOX-Brennstoff* und *Hüllrohr* mit einem dazwischenliegenden Gasspalt. Die geometrische Beschreibung entspricht den Angaben der von ESNII+ bereitgestellten Spezifikationen. Die Materialeigenschaften des Hüllrohrs werden von geeigneten, in ATHLET eingebauten Korrelationen berechnet. Für die Wärmeleitung im MOX-Brennstoff wird spezifikationsgemäß die Korrelation nach Philipponneau verwendet. Die Spaltweite wird auf 0,06 mm fixiert, was jedoch ohne Belang ist, da für den Spalt Wärmeübergangskoeffizienten (HTC) spezifiziert sind. Das (zeitlich konstante) axiale Profil der Wärmeübergangskoeffizienten wird als Tabelle vorgegeben, wobei die Daten unterschiedlichen Versionen der ESNII+-ASTRID-Spezifikation entnommen werden mussten. Die im ATHLET-Modell tatsächlich verwendeten HTC-Profile sind geringfügig geglättete (die ursprünglichen Werte weisen Unstetigkeiten auf) Kombinationen aus Daten von CEA und KIT (SIM). Die dem stationären Zustand entsprechende anfängliche Leistungsverteilung wurde ebenfalls der Spezifikation entnommen.

## 6.4.2 MYRRHA

Für gekoppelte neutronenkinetisch-thermohydraulische transiente Kernberechnungen mit PARCS/ATHLET wurde ein ATHLET-Modell für den Kern der Anlage MYRRHA entwickelt. Es handelt sich um ein Parallelkanal-"Open-Core-" Modell, in dem jedes einzelne Brennelement sowie Steuer-, Reflektor- und Targetelemente durch je einen thermohydraulischen Kanal abgebildet werden. Für den Kern der Anlage MYRRHA wurde ein Parallelkanalmodell. Das Modell und die Nodalisierung ist in Abb. 6.58 dargestellt.



**Abb. 6.58** Schema des ATHLET-Simulationsmodells für den Kern der Anlage MYRRHA





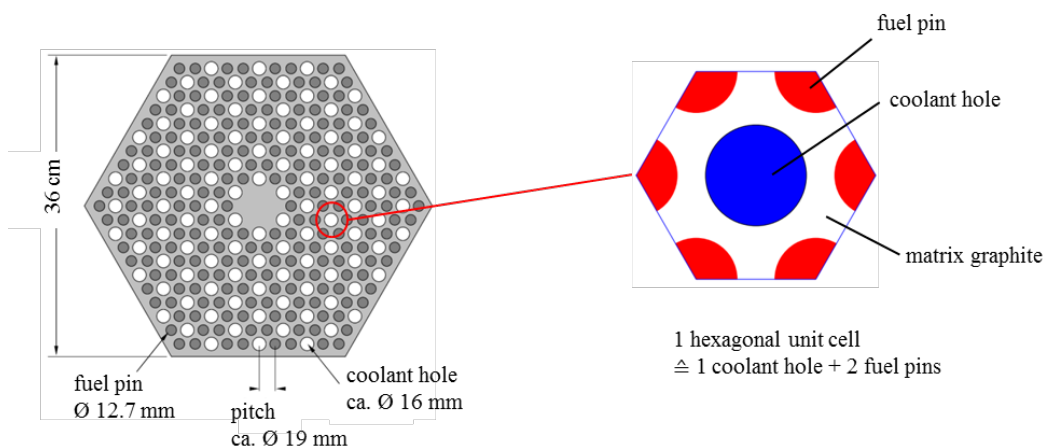
## 7 AP 5: Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren

### 7.1 AP 5.1: Implementierung geeigneter Modelle zur Simulation des Reaktorkerns von V/HTR Reaktoren mit dem Systemcode ATHLET

Basierend auf den Spezifikationen des OECD-Benchmark-Programms /ORJ13/ wurde ein vereinfachtes Kernmodell des MHTGR-350 für die thermohydraulische Simulation mit ATHLET (Version 3.0B) erstellt. Die größte Herausforderung bestand in der Modellierung der prismatischen Brennelementblöcke mittels der in ATHLET bereits vorhandenen Wärmeleitobjekte, denn auch bei Vernachlässigung der axialen Wärmeleitung liegt in den Brennelementblöcken aufgrund der Anordnung von Kühlmittelbohrungen und Kernbrennstoff ein zweidimensionales Temperaturprofil vor, während mit den Standard-Objekten in ATHLET nur eine eindimensionale Modellierung der Wärmeleitung möglich ist.

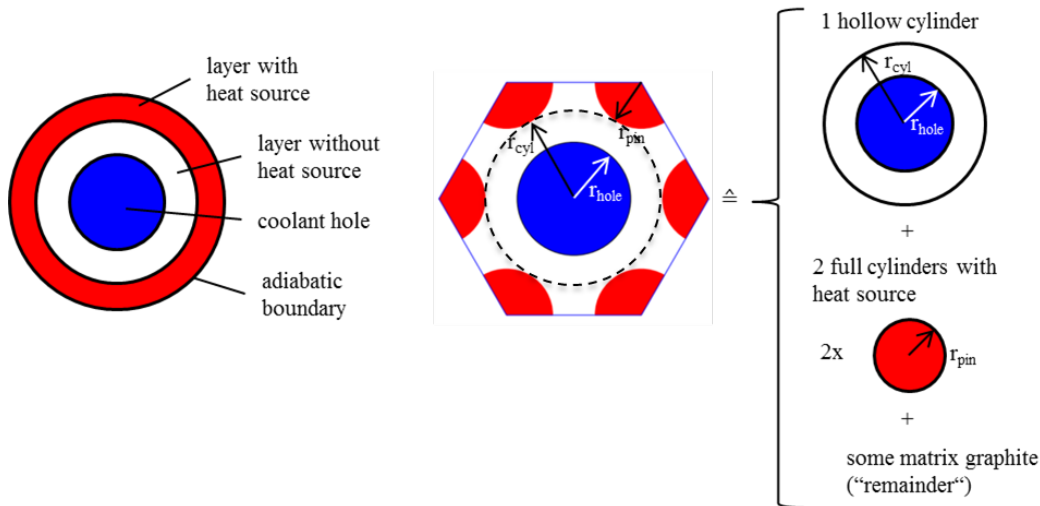
#### 7.1.1 Modellierung der prismatischen Brennelementblöcke

In Abb. 7.1 ist ein prismatischer Brennelementblock zusammen mit einer hexagonalen Einheitszelle gezeigt. Ein Brennelementblock enthält 108 Kühlmittelbohrungen sowie 210 Bohrungen für die Brennstäbe und lässt sich damit in 105 bis 108 Einheitszellen unterteilen.



**Abb. 7.1** Prismatischer Brennelementblock im Querschnitt (modifiziert nach /STR09/) und hexagonale Einheitszelle

Um eine Einheitszelle mit den ATHLET-Standardwärmeleitobjekten abzubilden, wurden zwei Optionen miteinander verglichen: Die erste besteht in der Verwendung eines Hohlzylinders mit der Kühlmittelbohrung in der Mitte und einer verschmierten Wärmequelle in der äußeren Materialschicht, vgl. Abb. 7.2 links.

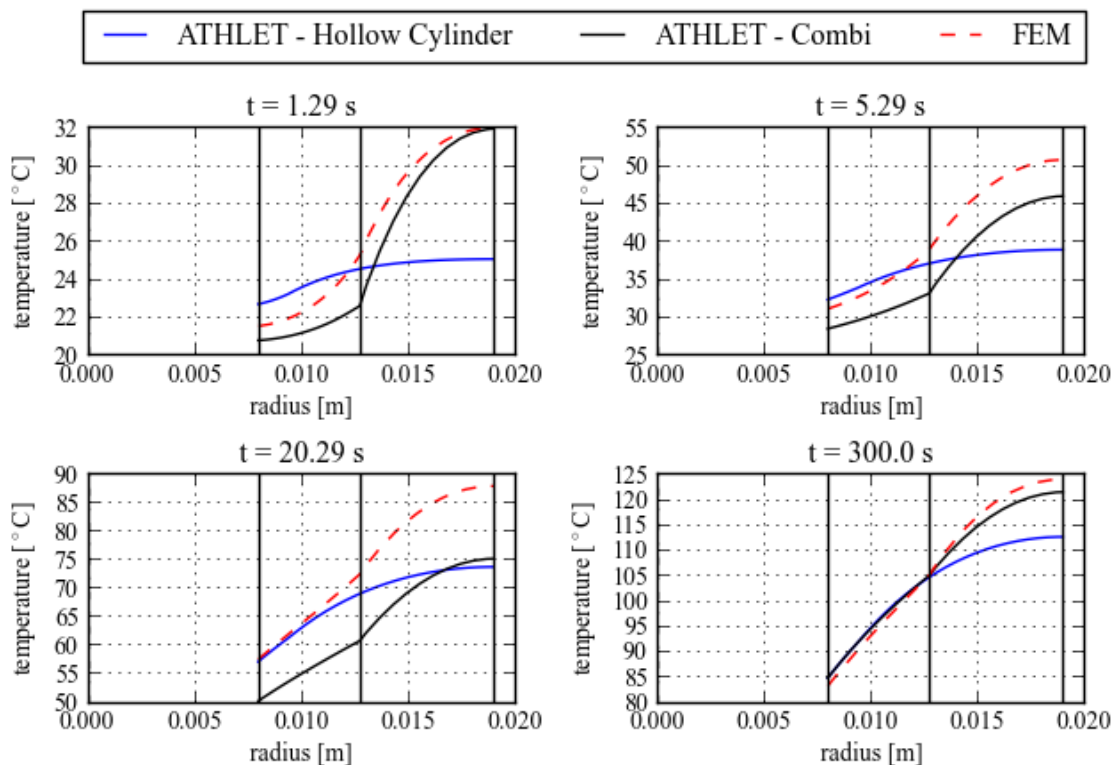


**Abb. 7.2** Modellierung einer Einheitszelle mittels eines Hohlzylinders (links) oder durch eine Kombination aus einem Hohl- und zwei Vollzylindern (rechts)

Wie weiter unten gezeigt wird, weicht das mit dieser Methode berechnete Temperaturprofil jedoch deutlich vom realen Temperaturprofil in einer hexagonalen Einheitszelle ab. Aus diesem Grund wurde ein weiterer Modellierungsansatz verfolgt, vgl. Abb. 7.2 rechts: Die Kühlmittelbohrung wird hierbei zusammen mit etwas Matrixgraphit durch einen Hohlzylinder repräsentiert. Die Brennstäbe werden durch zwei Vollzylinder mit Wärmeenergie erzeugt modelliert. Um Wärmeströme von den Brennstäben zur Kühlmittelbohrung zuzulassen, müssen der Hohl- und die zwei Vollzylinder thermisch gekoppelt werden; dies geschieht mit Hilfe eines Fluides, welches Kontakt zu allen drei Zylindern hat und die gleichen Stoffeigenschaften wie der Matrixgraphit aufweist. Dieses Fluid beschreibt denjenigen Matrixgraphit der Einheitszelle, welcher nicht durch den Hohlzylinder berücksichtigt wird, vgl. Abb. 7.2 („remainder“). Um einen ganzen Brennelementblock zu modellieren, genügt es, 108 Hohlzylinder und 210 Vollzylinder mit der entsprechenden Menge „Graphit-Fluid“ zu koppeln.

In Abb. 7.3 ist die zeitliche Entwicklung des Temperaturprofils in einer hexagonalen Einheitszelle gezeigt, ausgehend von einem flachen Profil von  $20^{\circ}\text{C}$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  s. Auf der x-Achse ist die radiale Koordinate der Einheitszelle eingetragen, welche vom Zentrum einer Kühlmittelbohrung aus auf einen Eckpunkt des Sechsecks (= Mit-

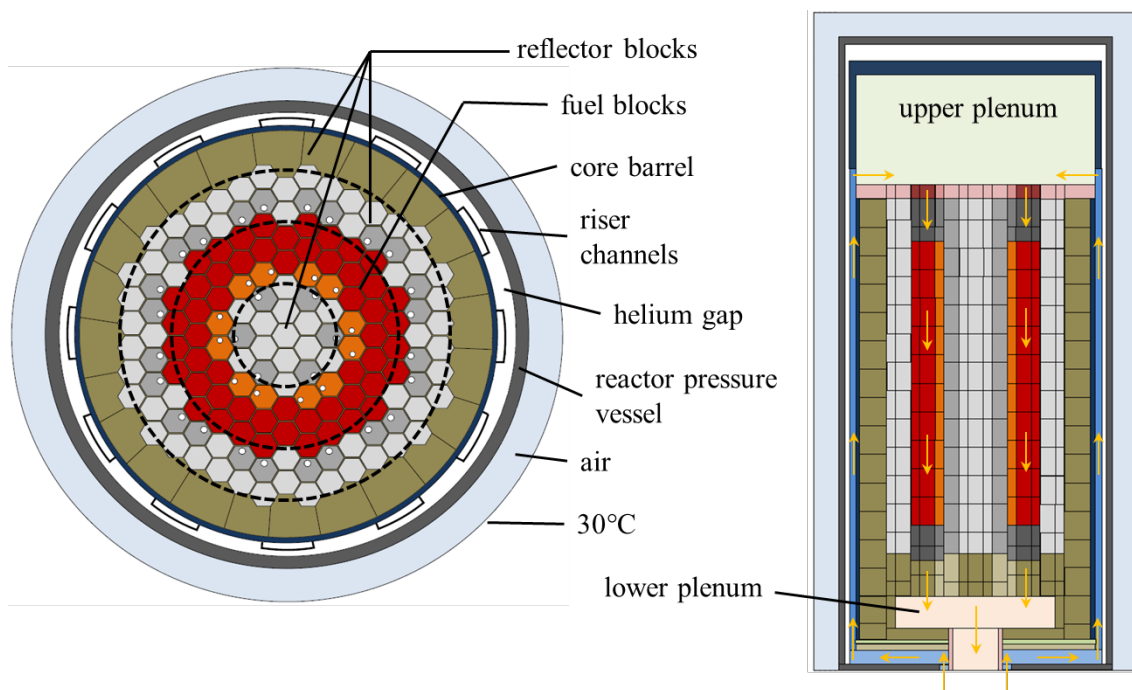
telpunkt eines Brennstabes) gerichtet ist. Die vertikalen Linien in den Plots markieren die Radien der Kühlmittelbohrung bzw. des Brennstabes. In jedem Plot sind drei Kurven eingetragen: Die gestrichelte rote Kurve ist das Ergebnis einer FEM-Simulation und aus /STR09/ entnommen; sie stellt den Referenzwert dar. Die blaue Kurve ist das Ergebnis einer ATHLET-Rechnung mit dem Hohlzylindermodell aus Abb. 7.2 (links) und die schwarze Kurve stammt von einer ATHLET-Simulation mit dem Kombinationsmodell, welches in Abb. 7.2 auf der rechten Seite gezeigt ist. Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen der schwarzen und der roten Kurve im stationären Zustand ( $t = 300$  s). Da die weiter unten beschriebene MHTRG-350-Simulation für einen stationären Zustand durchgeführt wurde, ist die Modellierung der prismatischen Brennelementblöcke mit Hilfe des Kombinationsmodells akzeptabel. Ein Vorteil dieser Art der Modellierung besteht außerdem darin, dass sie flexibel ist und sich leicht auch Brennelementblöcke mit einer anderen Konfiguration als 108 Kühlmittelbohrungen/210 Brennstäbe pro Block nachbilden lassen, denn das MHTGR-350-Design sieht auch sogenannte „Reserve Shutdown Control“ (RSC) Elemente mit 95 Kühlmittelbohrungen/186 Brennstäben vor ORJ13.



**Abb. 7.3** Berechnete Temperaturprofile mit den in Abb. 7.1 beschriebenen Modellen im Vergleich zur FEM-Simulation einer Einheitszelle. Bei 300 s ist der stationären Zustand erreicht.

### 7.1.2 MHTGR-350-Simulation

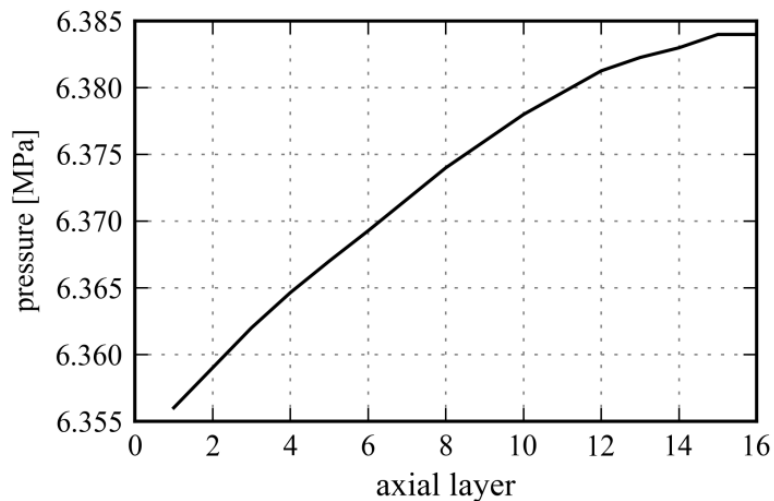
Die Spezifikationen für das Simulationsmodell des MHTGR-350 sind in /ORJ13/ im Detail beschrieben. In Abb. 7-4 sind das radiale und das axiale Kernlayout zu sehen, welche als Grundlage zur Erstellung des ATHLET-Eingabedatensatzes dienen. Das ATHLET-Kernmodell wurde aus konzentrischen Ringen für die Reflektoren und den aktiven Kern aufgebaut, wie durch die gestrichelten Linien im radialen Schnittbild angedeutet wird. Der Strömungsweg des Heliums ist durch gelbe Pfeile im axialen Schnittbild gekennzeichnet. Am Einlass ist im ATHLET-Modell ein fester Massen- und Enthalpiestrom vorgegeben (ca. 157 kg/s bei 259 °C). Von hier strömt das Helium durch die Riser-Kanäle ins obere Plenum, wo es sich vermischt und durch den ringförmigen Kern abwärts ins untere Plenum und schließlich zum Auslass strömt, wo eine Druckrandbedingung von 6,39 MPa vorgegeben ist. Der Kern mit einer thermischen Gesamtleistung von 350 MW wurde aufbauend auf dem im vorigen Kapitel beschriebenen Kombinationsansatz modelliert. An den radialen Modellgrenzen wurde eine Temperatur von 30°C aufgeprägt, während Ober- und Unterseite des Reaktors als adiabat betrachtet wurden. Neutronenkinetik wurde in der Simulation nicht betrachtet, die Leistungsverteilung im Kern wurde stattdessen entsprechend der Benchmark-Spezifikation durch ein GCSM-Signal fest vorgegeben.



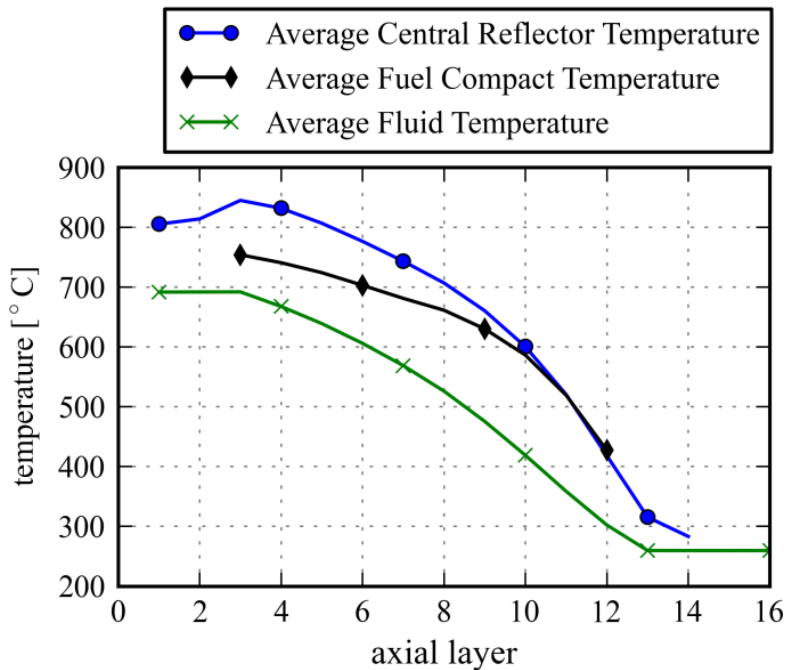
**Abb. 7.4** MHTGR-350 Kern-Layout (modifiziert nach ORJ13)

In der durchgeführten Simulation wurde ein stationärer Zustand unter den o.g. Randbedingungen und unter Vernachlässigung von Bypassströmungen zwischen den Graphitblöcken betrachtet. Die Rechnung ist eine Teilaufgabe des OECD-Benchmarkprogramms (/ORJ13/, Exercise 2a) mit dem Ziel, die Simulationsergebnisse verschiedener Benchmarkteilnehmer miteinander zu vergleichen. Dabei werden von den Teilnehmern sowohl verschiedene Codes als auch unterschiedlich detaillierte Simulationsmodelle verwendet.

In Abb. 7.5 und Abb. 7.6 sind einige vorläufige Ergebnisse der ATHLET-Simulation präsentiert. Die Ergebnisse der anderen Benchmarkteilnehmer dürfen aus Vertraulichkeitsgründen nicht gezeigt werden; sie werden in Zukunft von der OECD veröffentlicht. In den Bildern sind Druck bzw. Temperaturen über die axiale Kernlänge aufgetragen. Der Bereich zwischen oberem und unterem Plenum in Abb. 7.4 wurde hierzu in 16 axiale Layer unterteilt, von denen 10 Layer den aktiven Kernbereich abdecken (dies sind die Layer 3 bis 12; aus diesem Grund ist die Brennstabtemperatur in Abb. 7.6 über genau diese 10 Layer aufgetragen). Da die Layer entgegen der Strömungsrichtung des Heliums von unten nach oben nummeriert sind, steigt der Druck, bzw. sinken die Temperaturen, mit zunehmender Layer-Nummer. Die mit ATHLET erzielten Simulationsergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Benchmarkteilnehmer, welche hier leider nicht gezeigt werden dürfen.



**Abb. 7.5** Mit ATHLET berechnete axiale Druckverteilung im MHTGR-Kern



**Abb. 7.6** Axiale Temperaturverteilung im zentralen Reflektor, in den Brennstäben und im Helium

Die hier beschriebenen Arbeiten zur Modellierung der prismatischen Brennelementblöcke und zur MHTGR-350-Simulation mit ATHLET wurden auf der Konferenz „16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-16)“ unter dem Titel „Modeling of the Thermal Hydraulics of Very-High-Temperature Reactors with the System Code ATHLET“ in Form eines Vortrags präsentiert. Zudem wurde ein gleichnamiges Paper eingereicht /VDC15/, welches zur Publikation im Journal „Nuclear Technology“ vorgeschlagen wurde und sich im Review-Prozess befindet.

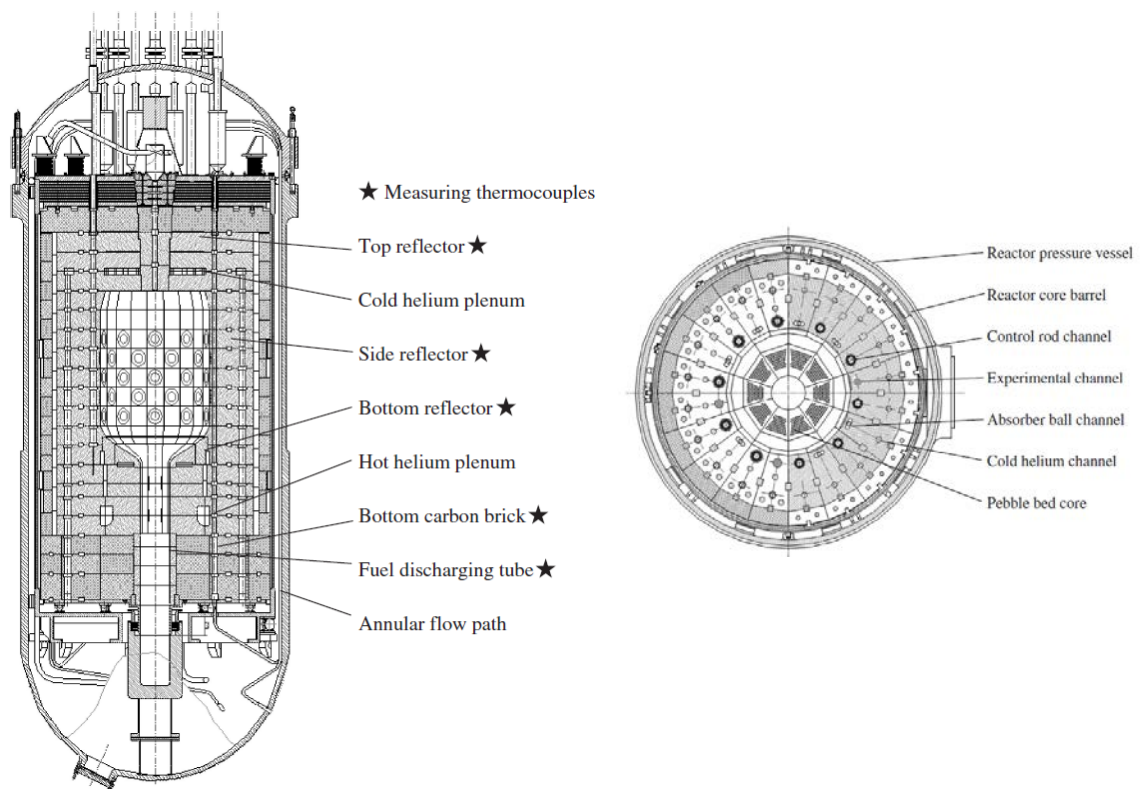
### 7.1.3 Modellierung des HTR-10 mit ATHLET

Der HTR-10 ist ein modularer HTR vom Kugelhaufentyp, der vom Institute of Nuclear and New Energy Technology (INET) der Tsinghua-Universität in China betrieben wird. Das Ziel des HTR-10-Projekts ist die Demonstration und Verifikation der technischen und Sicherheitseigenschaften des HTR-Konzepts einschließlich Prozesswärmenutzung und Helium-Gasturbinen-Kreislauftechnologie. Wesentliche Kenngrößen sind in Tab. 7.1 zusammengefasst. Der HTR-10 ist derzeit der einzige in Betrieb befindliche Kugelhaufen-HTR, der für Validierungszwecke zur Verfügung steht. Dazu ist der Reaktorkern mit einer Reihe von Thermoelementen ausgestattet, welche die Temperaturen in den

Reflektorstrukturen messen und in ihrer Gesamtheit Aussagen über die Temperaturverteilung im Reflektor ermöglichen.

Thermal power	10 MW
System pressure	30 bar
Mass flow	4.32 kg/s
Inlet temperature	250 °C
Outlet temperature	≈ 700 °C

**Tab. 7.1** Wesentliche Kenngrößen des HTR-10.

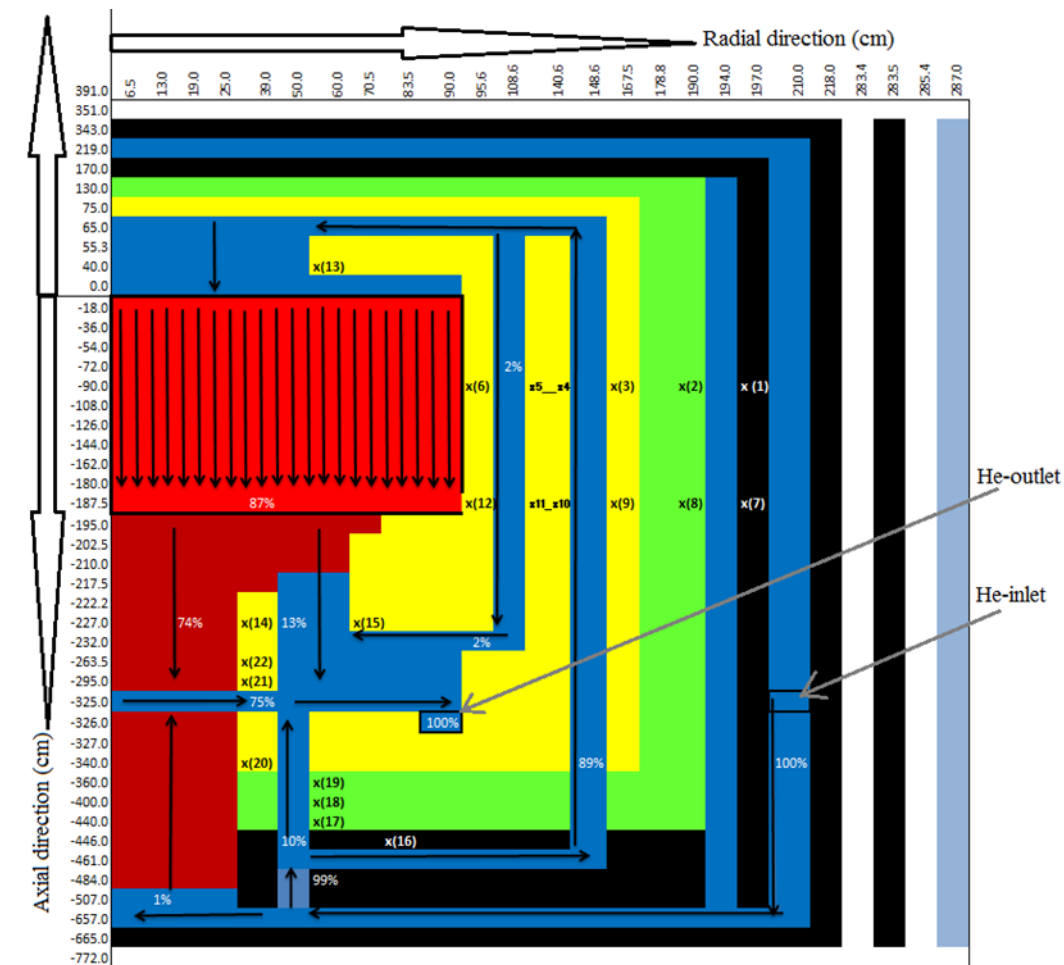


**Abb. 7.7** Vertikaler (links) und horizontaler Schnitt (rechts) durch den Reaktorkern des HTR-10.

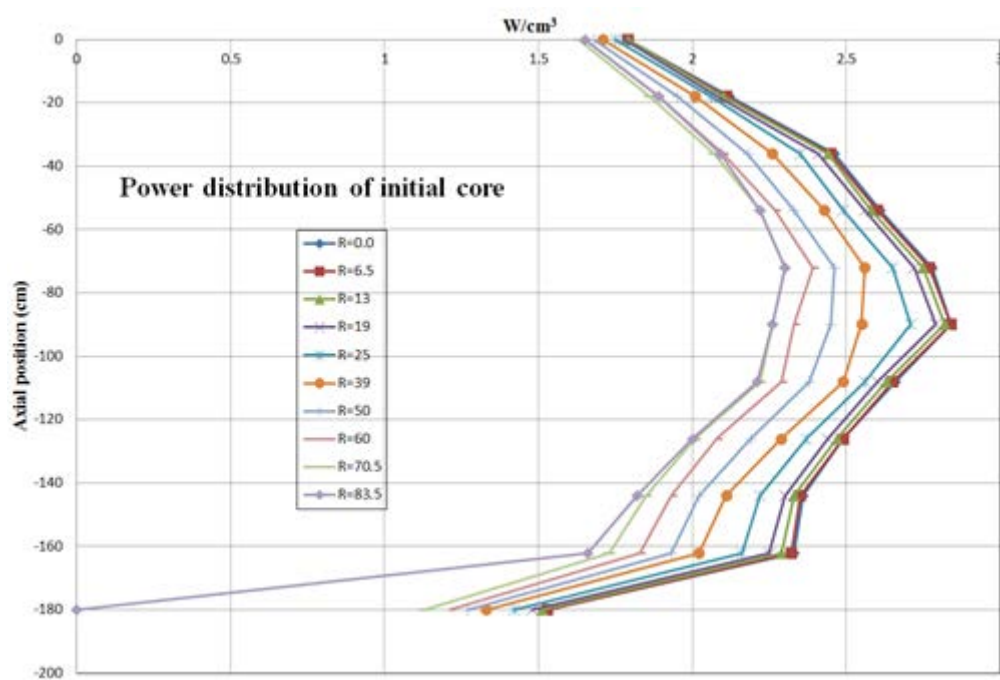
Spezifikation und Daten zum HTR-10 sind einem IAEA-Bericht dokumentiert /IAE03/. Vertikale und horizontale Schnitte durch den Reaktorkern des HTR-10 sind in Abb. 7.7 wiedergegeben. Durchmesser und mittlere Höhe des Kerns betragen 180 cm bzw. 197 cm. Die Kugelschüttung besteht aus 23900 Kugel-Brennelementen in einem Verhältnis von 57:43 für Brennstoff- zu Blindkugeln. Zur Temperaturmessung sind im Kern



22 Thermoelemente installiert, deren Positionen (x(1),...,x(22)) aus Abb. 7-8 hervorgehen. Diese Abbildung zeigt zugleich die Massenstromverteilung und Strömungspfade im Kern. Der Kern-Massenstrom unter Nominalbedingungen beträgt 4,32 kg/s. Vom Kerneintritt strömt das kalte Helium (ca. 250 °C) im Ringraum zwischen Kernrand und Druckbehälter (RPV, Reactor Pressure Vessel) zunächst nach unten in die untere Kavität des RPV, wo 1 % des Massenstroms in das Brennelemententladerohr strömt und sich danach mit dem heißen Heliumplenum vermischt. 89 % des Massenstroms strömt durch die 20 kalten Heliumströmungskanäle nach oben in das kalte Plenum, 10 % strömt über den durch die Zwischenräume zwischen Graphikblöcken gebildeten Bypass. Im weiteren Verlauf gelangen 2 % des Massenstroms durch 10 Steuerstabböhrungen in das heiße Plenum. Von der oberen Kavität aus strömt der Hauptanteil des Helium-Kühlmittels durch die Kugelschüttung und wird dadurch so aufgeheizt, dass die Kernaustrittstemperatur ca. 700 °C beträgt. Die Leistungsverteilung des Kerns ist vorgegeben /IAE13/ und Abb. 7.9 in gezeigt.

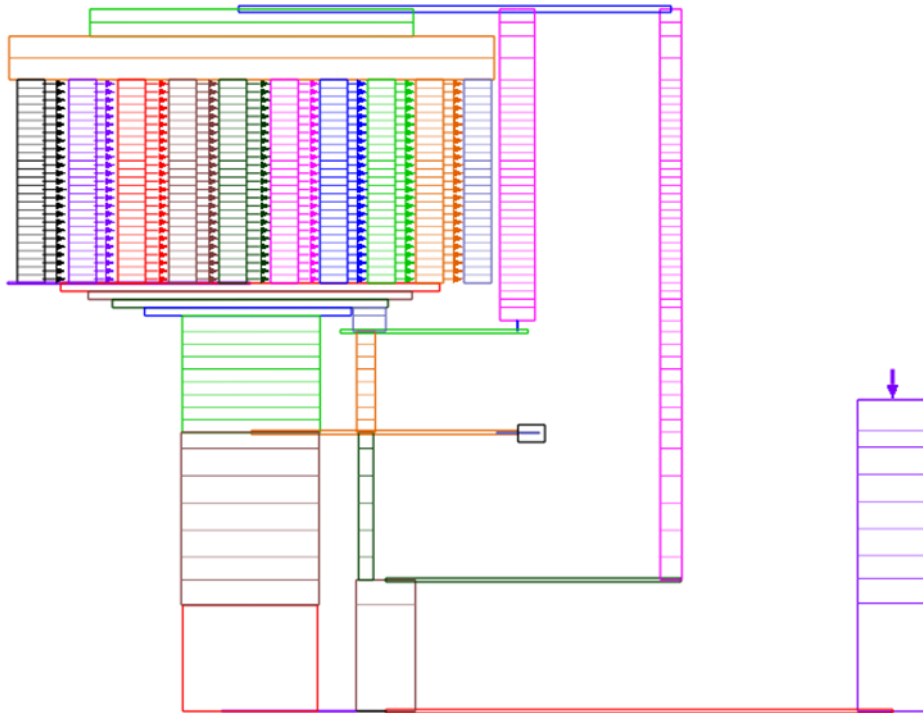


**Abb. 7.8** Strömungspfade, Massenstromverteilung, Materialverteilung, Abmessungen und Positionen der Thermoelemente im HTR-10-Kern.

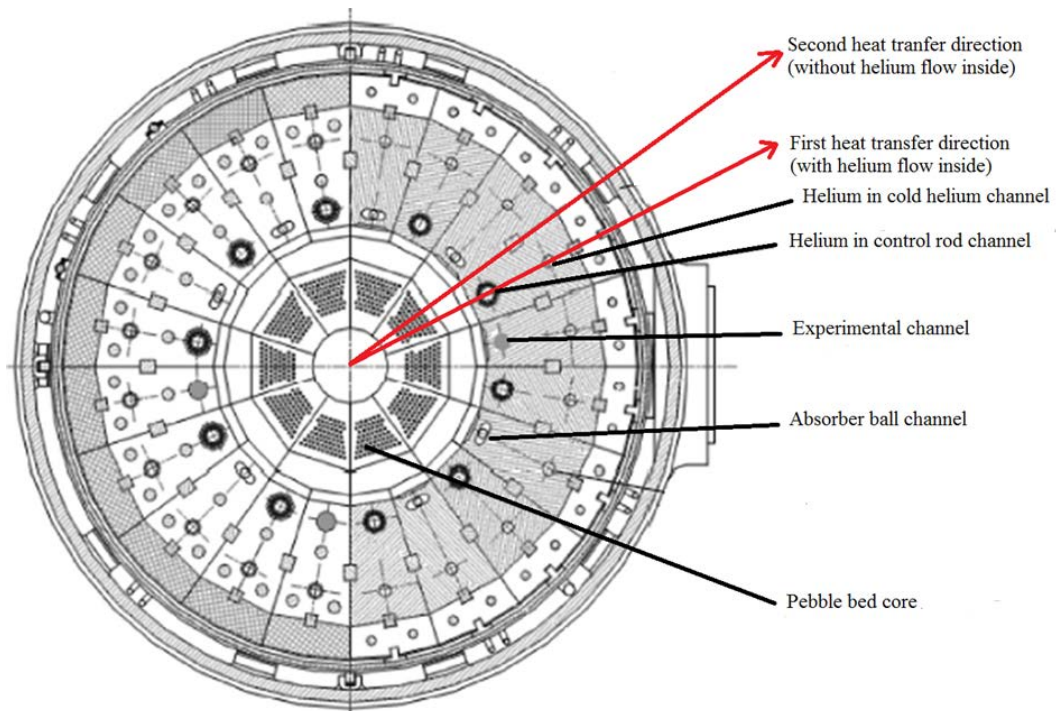


**Abb. 7.9** Vorgegebene Leistungsverteilung in  $W/cm^3$  für den HTR-10.

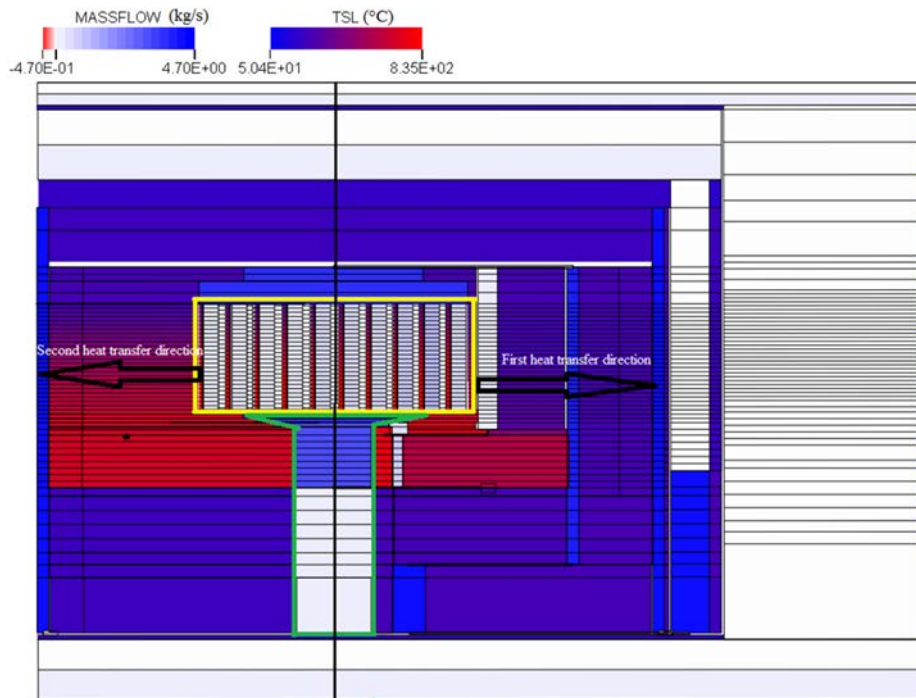
Im ATHLET-Modell wird der Reaktorkern durch 10 parallele thermohydraulische Kanäle (THC) mit Querverbindungen dargestellt /SET16/. Das Gesamtmodell ist in Abb. 7.10 einschließlich Nodalisierung wiedergegeben. Um die Zweidimensionalität der Wärmeleitung in azimuthaler Richtung im Rahmen der 1D-Modelle von ATHLET annähernd erfassen zu können, wurden in einer ersten Näherung die beiden in Abb. 7.11 rot markierten radialen Richtungen getrennt modelliert und die Ergebnisse aufgrund der annähernden azimuthalen Gleichverteilung beider Wärmetransportpfade gemittelt.



**Abb. 7.10** Schema des ATHLET-Modells des HTR-10 einschließlich Nodalisierung.

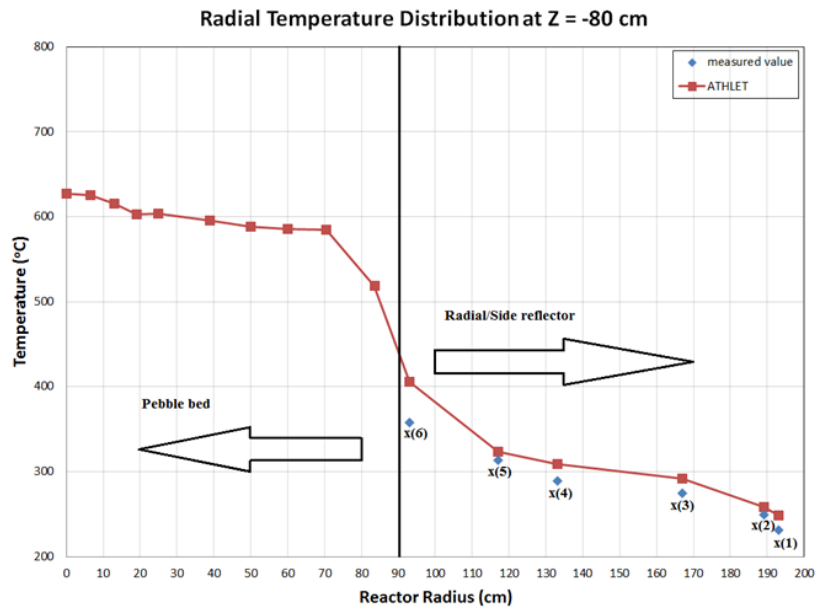


**Abb. 7.11** Radiale Richtungen (rote Pfeile), für die die Wärmeleitung in ATHLET modelliert wurde.

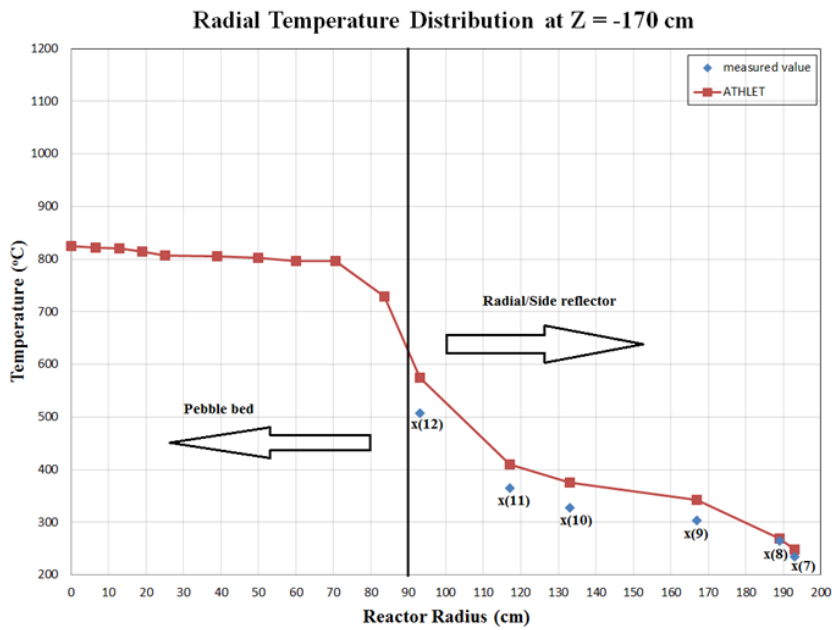


**Abb. 7.12** Von ATHLET für die vorgegebene Leistungsverteilung errechnete stationäre Temperaturverteilung des HTR-10 für die beiden Wärmetransportpfade.

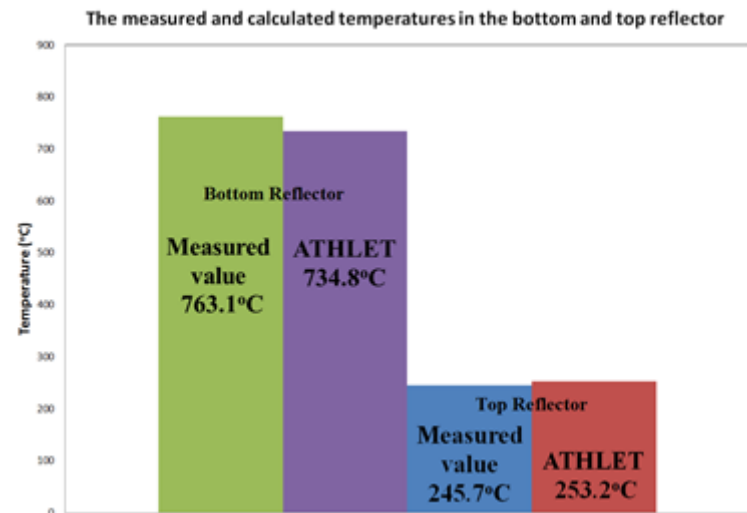
Abb. 7.12 zeigt die für die vorgegebene Leistungsverteilung von ATHLET ermittelte stationäre Temperaturverteilung im HTR-10. Die daraus abgeleitete radiale Temperaturverteilung in der Höhe  $z = -80$  cm geht aus Abb. 7.13 hervor. In dieser Höhe befinden sich im radialen Reflektor die sechs Thermoelemente  $x(1)$  bis  $x(6)$ , deren Temperaturmesswerte ebenfalls eingetragen sind. Die von ATHLET berechneten Temperaturen liegen etwas über den Messwerten, wobei die maximale Abweichung 13 % beträgt. Ein ähnliches Resultat ergibt sich für die Auswertung der radialen Temperaturverteilung in der Höhe  $z = -170$  cm, in der sich im Reflektor die sechs Thermoelemente  $x(7)$  bis  $x(12)$  befinden, siehe Abb. 7.14. Auch hier beträgt der maximale Unterschied zu den Temperaturmesswerten höchstens 13 %. Für die Positionen der Thermoelemente in unterem und oberem Reflektor liefert das ATHLET-Modell die in Abb. 7.15 angegebenen Temperaturen; die Abweichungen zu den Messwerten beträgt hier ca. 3 %.



**Abb. 7.13** ATHLET-Ergebnisse für die radiale Temperaturverteilung in der Höhe  $z = -80$  cm und Messwerte  $x(1)$  bis  $x(6)$ .



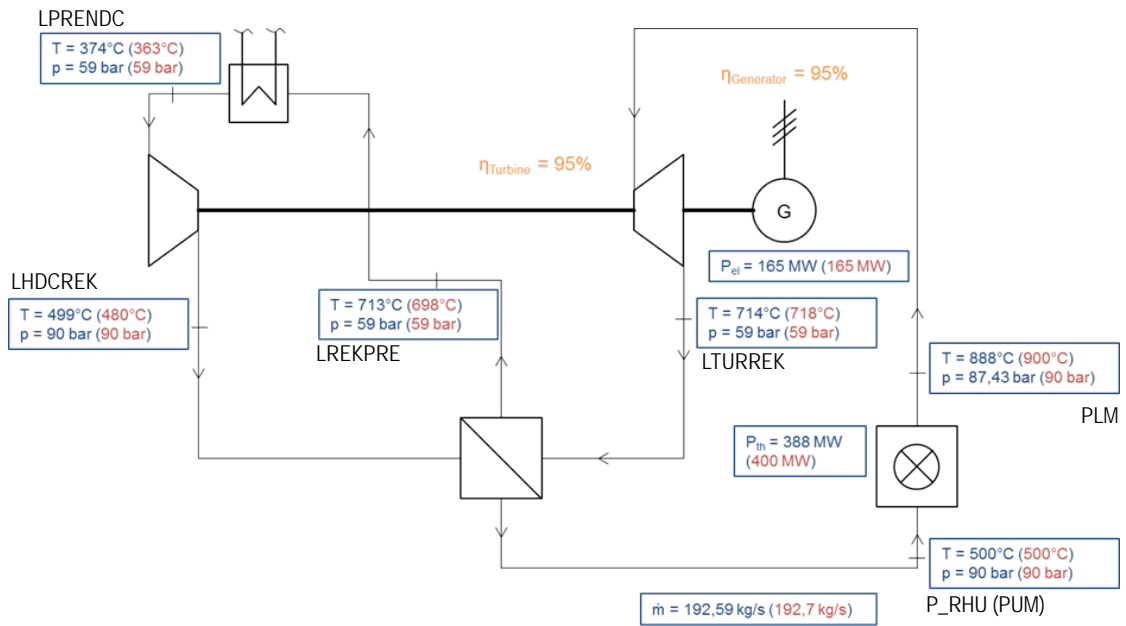
**Abb. 7.14** ATHLET-Ergebnisse für die radiale Temperaturverteilung in der Höhe  $z = -170$  cm und Messwerte  $x(7)$  bis  $x(12)$ .



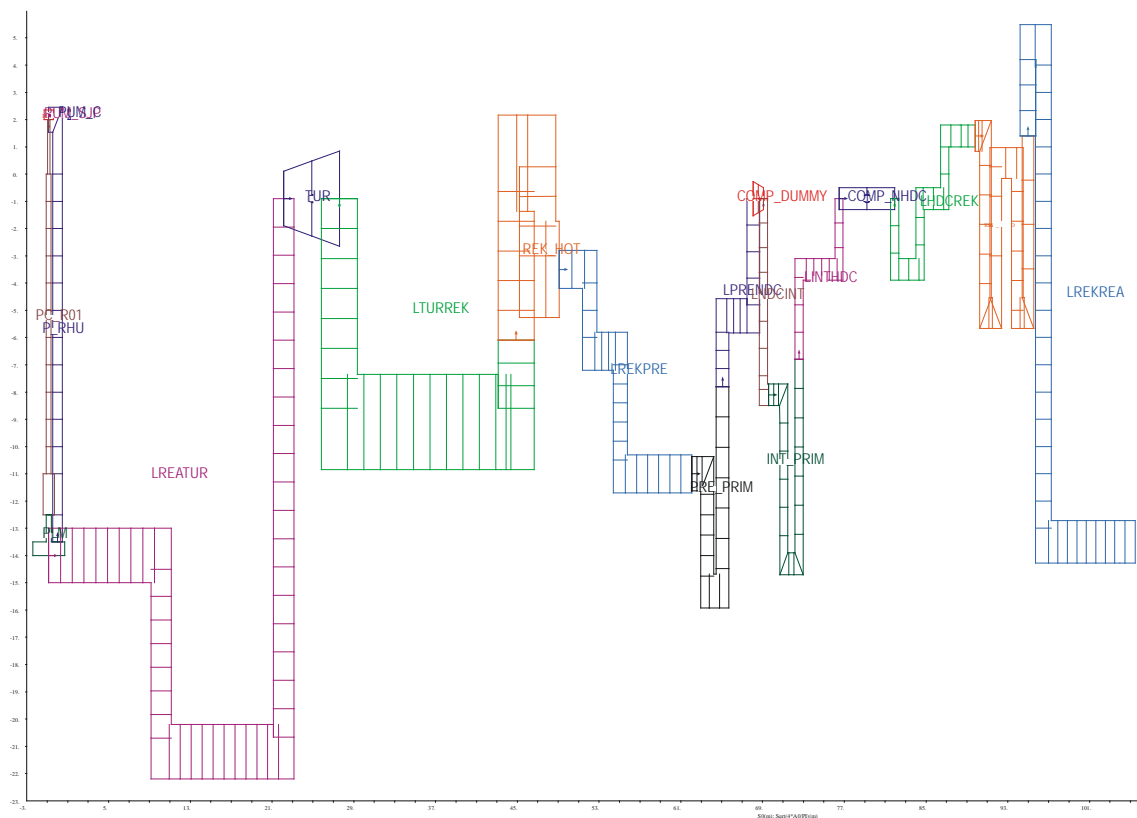
**Abb. 7.15** ATHLET-Ergebnisse für die Temperaturen in unterem und oberem Reflektor im Vergleich mit den Messwerten.

## 7.2 AP 5.2: Entwicklung eines ATHLET-Kreislaufmodells

In Anlehnung an das PBMR-400-Design wurde ein einfaches ATHLET-Kreislaufmodell eines Kugelhaufenreaktors mit Turbine und Kompressor erstellt. Das Modell enthält neben dem Reaktorkern eine Gasturbine, einen Kühler, einen Rekuperator und – da das Kompressormodell zur Zeit der Datensatzerstellung noch nicht einsetzbar war – eine Pumpe zur Druckerhöhung. Mit dem Modell wurde bisher nur ein stationärer Anlagenzustand simuliert, um die Lauffähigkeit des Datensatzes zu prüfen. Aufgrund mangelnder anlagenspezifischer Daten mussten viele geometrische und thermohydraulische Randbedingungen geschätzt werden. Abb. 7.16 zeigt ein Wärmeschaltbild des Simulationsmodells mit den von ATHLET berechneten Zustandsgrößen Druck und Temperatur an verschiedenen Positionen. Das ATHLET-Modell des PBMR-400-Primärkreises ist in Abb. 7.17 wiedergegeben.



**Abb. 7.16** Wärmeschaltbild des ATHLET-Kreislaufmodells mit wichtigen Systemparametern im simulierten stationären Zustand



**Abb. 7.17** PBMR-400-Primärkreismodell in ATHLET

Das Kompressormodell ist prinzipiell für den Einsatz in Kreislaufsimulation geeignet. Als künftige Weiterentwicklungen des Kompressormodells können u.a. die Berechnung mehrstufiger Kompressoren verfolgt werden.





## **8 AP 6: Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation-IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors**

### **8.1 Verbesserung der Stoffwertberechnung in der Umgebung des kritischen Punktes in ATHLET**

Die thermodynamischen Stoffwerte für Wasser sind in ATHLET als Spline-Polynome approximiert. Es gibt zwei Stoffwertpakete, eines für unterkritisches Wasser, das die Stoffwerte für die flüssige und die gasförmige Phase einschließlich meta-stabiler Zustände (überhitztes Wasser, unterkühlter Dampf) berechnet, und eines für überkritisches Wasser, das das Wasser im gesamten Bereich – also sowohl unterhalb als auch oberhalb der pseudokritischen Temperatur – als Flüssigkeit betrachtet. Bei der Erweiterung von ATHLET auf überkritisches Kühlmittel wurde das erste Stoffwertpaket unverändert beibehalten, um die Funktionalität und die Validierung von ATHLET im „klassischen“ Einsatzgebiet mit unterkritischem Wasser nicht aufs Spiel zu setzen. Zwischen 22.0 und 22.5 MPa wurde ein kontinuierlicher Übergang zwischen den beiden Programmpaketen realisiert. Der Übergangsbereich wurde mit 0.5 MPa bewusst recht weit gewählt, um die starken Änderungen der Stoffwerte am kritischen Punkt etwas zu ‚mildern‘ und somit die numerische Stabilität von ATHLET in diesem Zustandsbereich nicht zu gefährden.

Wird bei einer ATHLET-Simulation die Umgebung des kritischen Punktes durchlaufen, zeigen die Ergebnisse ein verstärkt oszillatorisches Verhalten. Was davon physikalisch oder numerisch bedingt ist - beispielsweise durch die im Übergangsbereich vorliegende eingeschränkte Konsistenz der Stoffwertstammfunktionen Dichte und spezifische Enthalpie mit deren partiellen Ableitungen nach den ATHLET-Lösungsvariablen Druck und Temperatur - kann mangels geeigneter Messdaten schwer beurteilt werden. Sicher ist, dass der o.g. weite Übergangsbereich die Stoffwertverläufe über Druck und Temperatur im Vergleich mit der Realität deutlich abflacht und dort die Konsistenz von Stammfunktion und partieller Ableitung verringert.

Mit den hier beschriebenen Arbeiten wurde die Stoffwertberechnung näher an die Realität herangeführt. Der wesentliche Unterschied besteht darin, den Einsatzbereich des überkritischen Stoffwertpakets bis nahe an den kritischen Druck auszudehnen und den Übergangsbereich auf jetzt 21.9 bis 22.12 MPa zu verringern und in Richtung unterkri-

tisch zu verschieben, letzteres auch, weil die Genauigkeit der Approximation der unterkritischen Stoffwerte bei diesen hohen Drücken abnimmt. Mit der Verkleinerung des Übergangsbereichs wird auch das Gebiet potentiell inkonsistenter Stoffwerte verringert.

Die bisher mit dem neuen Stoffwertpaket durchgeführten Testrechnungen zeigen ähnliche Ergebnisse wie die Vergleichsrechnungen mit dem alten Programm. Im Detail sind die Stoffwerte nun genauer, was sich aber (bisher) weder auf das numerische Gesamtverhalten von ATHLET noch auf die Ergebnisse signifikant auswirkte. Die befürchteten numerischen Probleme wegen der nun deutlich größeren (aber realistischeren) partiellen Ableitungen in der Nähe des kritischen Punktes traten nicht auf.

### **8.1.1 Pseudokritische Temperatur**

Die pseudokritische Temperatur kann man sich als Verlängerung der Sättigungstemperatur über den kritischen Druck hinaus vorstellen. Anders als beim unterkritischen Druck kommt es aber hier nicht zum sprunghaften Phasenwechsel. Dichte und spezifische Enthalpie ändern sich dennoch als Funktion des Druckes bzw. der Temperatur hier sehr stark – insbesondere in der Nähe des kritischen Punktes – so dass man tatsächlich von Verdampfen bzw. Kondensieren sprechen kann und das Wasser oberhalb der pseudokritischen Linie häufig als Dampf und unterhalb als Flüssigkeit bezeichnet wird.

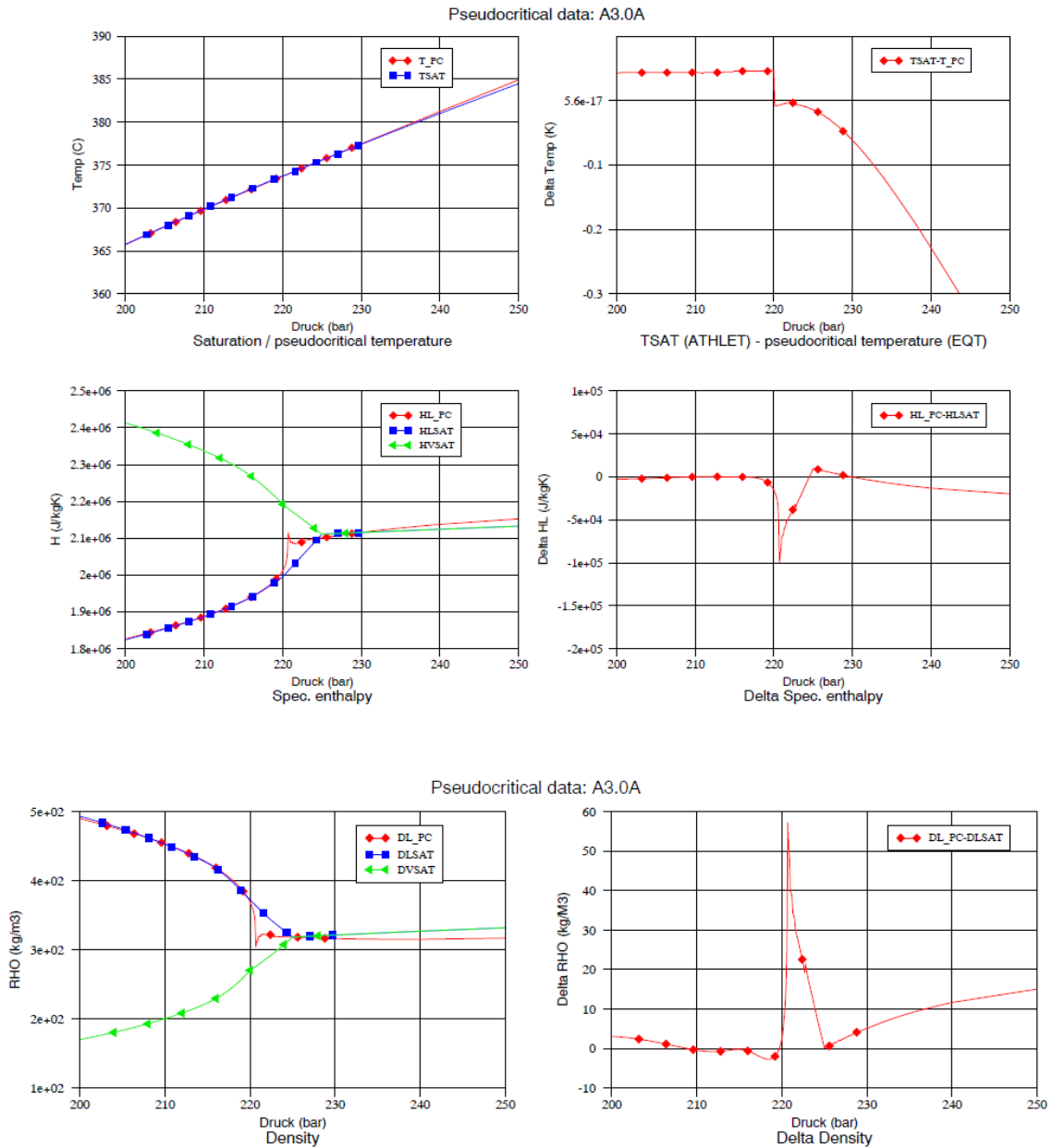
In ATHLET wird die pseudokritische Temperatur für einige Modelle (z. B. für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten), aber auch für die Approximation der Stoffwerte verwendet. Analog zum Vorgehen bei unterkritischem Wasser erfolgt die Stoffwertberechnung für überkritisches Wasser als Funktion des Druckes und der Temperaturdifferenz zur pseudokritischen Temperatur. Durch die Vorgabe dichter Polynomstützwerte entlang der pseudokritischen Temperatur können die hier sich stark ändernden Stoffwerte effizient approximiert werden.

Da keine hinreichend genaue Formel für die Berechnung der pseudokritischen Temperatur zur Verfügung stand, wurde diese iterativ mit Hilfe des Stoffwertprogramms EQT der RU Bochum /WAG97/ ermittelt. Für gegebene Drücke wurde die Temperatur so lange variiert, bis die spezifische Wärmekapazität den Maximalwert erreichte. Für die so ermittelten Sättigungs- bzw. pseudokritische Temperaturen wurden dann die Dichte und die spez. Enthalpie berechnet. Diese Werte wurden mit den in ATHLET bisher

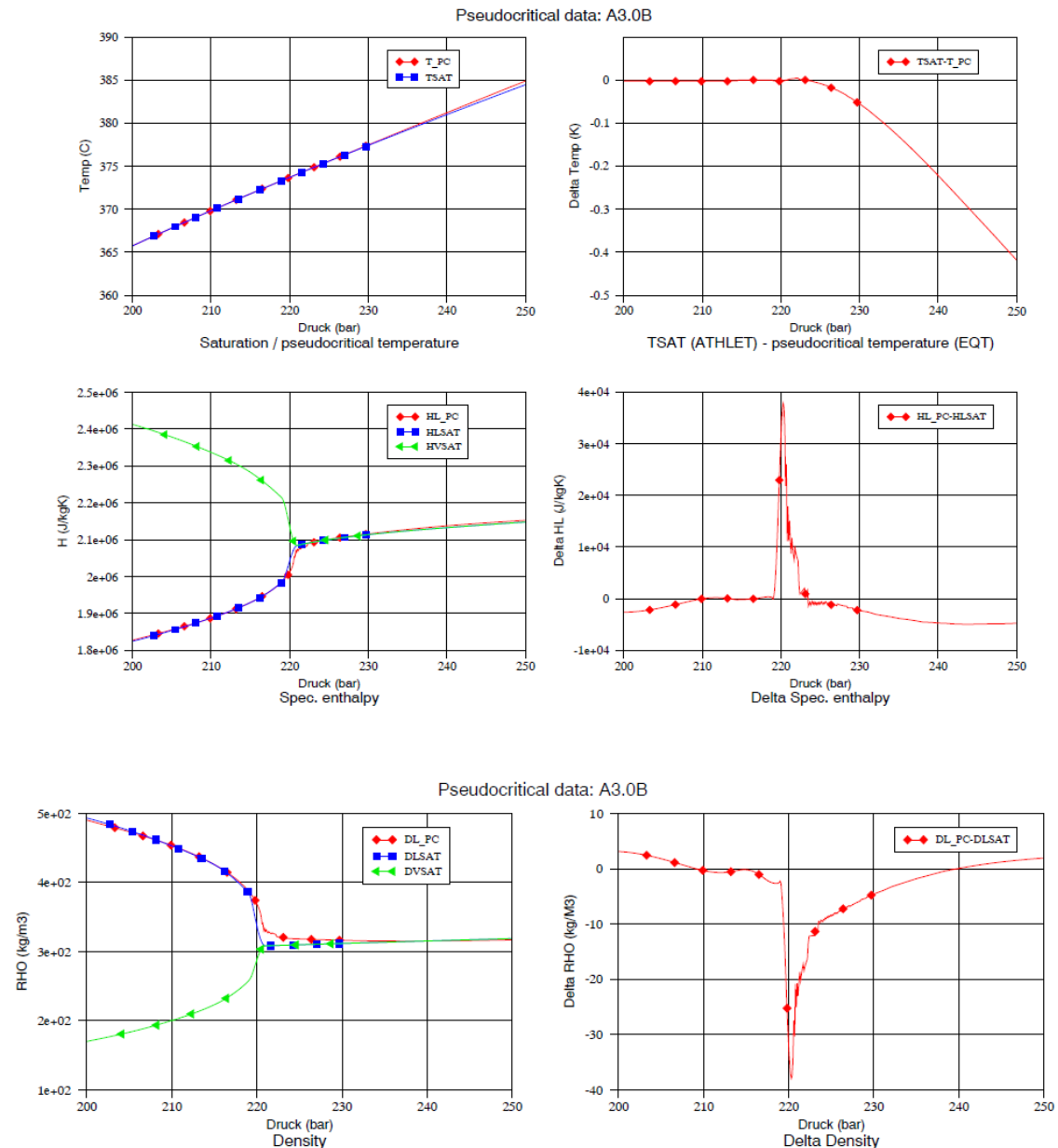
verwendeten Approximationen /LER07/ verglichen (Abb. 8.1). In der rechten Spalte sind die Abweichungen dargestellt. Man kann deutlich einen Sprung im Temperaturverlauf bei 22.0 MPa erkennen, dessen Ursache in der ungenauen Berechnung der unterkritischen Sättigungstemperatur liegt. Ferner sind zu flachen Verläufe der Dichte und der spezifischen Enthalpie als Folge des weiten Übergangsbereichs von 22.0 bis 22.5 MPa zwischen unterkritischem und überkritischem Stoffwertpaket erkennen. Mit steigendem Druck weichen die pseudokritischen Werte zunehmend voneinander ab.

Um die Sättigungstemperatur näher an die EQT-Werte heranzuführen, wurden die Polynomstützwerte der Approximation von unterkritischem Wasser in ATHLET optimiert. Der Übergangsbereich zwischen den Stoffwertpaketen wurde verringert und die Polynome für die pseudokritische Enthalpie und Dichte verbessert. Die Ergebnisse der optimierten Programme sind in Abb. 8.2 dargestellt. In der Umgebung des kritischen Punktes sind die Abweichungen nun deutlich geringer als bei A3.0A.

Die bei höheren Drücken nach wie vor zunehmende Abweichung der mit EQT bzw. ATHLET berechneten pseudokritischen Temperatur (Abb. 8.2 oben links und oben rechts) ist hinsichtlich der Stoffwertapproximation nur von geringer Bedeutung, da zum einen die (fehlerbehaftete) pseudokritische Temperatur von ATHLET sowohl für die Berechnung der Polynomstützwerte als auch für die Interpolation im ATHLET-Stoffwertpaket verwendet wird, so dass in ATHLET die Stoffwerte dann doch wieder korrekt bestimmt werden, zum anderen ist der Verlauf der Stoffgrößen hier deutlich flacher als am kritischen Punkt.



**Abb. 8.1** Sättigungswerte bzw. pseudokritische Werte für Temperatur, spez. Enthalpie und Dichte mit A3.0A berechnet. Mit \_PC werden die mit dem EQT-Programm ermittelten Sättigungs- bzw. pseudokritischen Werte bezeichnet (s. Text oben), mit SAT die mit dem alten ATHLET Stoffwertprogramm berechneten.



**Abb. 8.2** Sättigungswerte bzw. pseudokritische Werte für Temperatur, spez. Enthalpie und Dichte mit A3.0B berechnet. Mit \_PC werden die mit dem EQT-Programm ermittelten Sättigungs- bzw. pseudokritischen Werte bezeichnet (s. Text oben), mit SAT die mit dem neuen ATHLET Stoffwertprogramm berechneten.

### 8.1.2 Thermodynamische Stoffgrößen

Die thermodynamischen Stoffwerte Dichte und spezifische Enthalpie müssen in ATHLET als Funktion der Lösungsvariablen Druck und Temperatur bereitgestellt werden. Zusätzlich benötigt das ATHLET-Grundgleichungssystem deren partielle Ablei-

tungen nach diesen Lösungsvariablen. Da die Berechnung der Stoffwerte in Programmen wie ATHLET sehr häufig erfolgt und die Stoffwertberechnung auf Basis der Helmholtz-Funktionen sehr rechenzeitintensiv ist, werden die Stoffwerte mit Hilfe bikubischer Splines approximiert. Dazu werden für geeignete Stützstellen in  $p$  und  $T$  die Spline-Koeffizienten sowohl für die Stammfunktionen als auch für die erforderlichen partiellen Ableitungen berechnet. Da letztere – ausgenommen  $c_p$  – vom Programm EQT nicht berechnet werden, werden sie numerisch über Differenzenquotienten bestimmt. An Stelle eines rechteckigen Splinegitters in  $p$  und  $T$  werden die Temperaturstützstellen als Differenz zur pseudokritischen Temperatur vorgegeben. Durch eine hohe Temperaturstützstellendichte in der Nähe der pseudokritischen Temperatur – und nur dort – wird den in diesem Bereich auftretenden extremen Werten und starken Krümmungen der Stoffwerte Rechnung getragen, ohne den numerischen Aufwand in Zustandsbereichen mit flachen Stoffwertverläufen unnötig zu erhöhen. Analog wird in der Nähe des kritischen Drucks die Druckstützstellendichte erhöht. Der Approximationsbereich für überkritische Stoffwerte begann mit dem alten Stoffwertpaket /LER07/ bei einem Druck von 22.5 MPa. Im nun verbesserten Programm wird das überkritische Stoffwertpaket bereits bei 22.12 MPa angewendet. Das klingt wenig spektakulär, hat aber signifikante Bedeutung, da dieser Druck sehr viel näher am kritischen Punkt liegt als bisher. Um die Stoffwerte in der Nähe des kritischen Punktes ohne allzu große Welligkeit approximieren zu können, musste die Zahl der Stützstellen deutlich erhöht werden. Für den Druck sind nun 15 Stützwerte vorgegeben (vorher: 7), für die Temperaturdifferenz 33 (vorher: 25). (Der Versuch, die überkritische Stoffwertapproximation noch näher am kritischen Punkt beginnen zu lassen, scheiterte an den Unzulänglichkeiten des EQT-Stoffwertprogramms. Beispielsweise werden für 22.1 MPa – also bei überkritischem Druck – unterschiedliche Werte für Flüssigkeit und Dampf berechnet, die dann auch noch vertauscht zu sein scheinen. Jedenfalls waren einige Dampfdichten geringfügig größer als die Flüssigkeitsdichten, und einige Dampfenhalpien kleiner als die Flüssigkeitsenthalpien. Die Unterschiede waren so gering, dass sie in der grafischen Darstellung zunächst nicht zu sehen waren. Die Berechnung der Splinekoeffizienten, insbesondere für die partiellen Ableitungen unter Verwendung der Differenzenquotienten, war aber so beeinträchtigt, dass die approximierten Stoffwerte wellig waren.)

Druckstützwerte (Pa):

2.2120000D+07, 2.2150000D+07, 2.2190000D+07,  
 2.2240000D+07, 2.2300000D+07, 2.2400000D+07, 2.2500000D+07,  
 2.2700000D+07, 2.3000000D+07, 2.3500000D+07, 2.4500000D+07,  
 2.6000000D+07, 3.0000000D+07, 5.0000000D+07, 1.0000000D+08

Temperaturstützwerte ( $T-T_{\text{sat}}$ ; K):

-6.0000000D+02, -4.0000000D+02, -3.0000000D+02,  
-2.0000000D+02, -1.0000000D+02, -5.0000000D+01, -2.0000000D+01,  
-8.0000000D+00, -4.0000000D+00, -2.0000000D+00, -1.0000000D+00,  
-5.0000000D-01, -3.0000000D-01, -2.0000000D-01, -1.2000000D-01,  
-5.0000000D-02, 0.0000000D+00, 5.0000000D-02, 1.2000000D-01,  
2.0000000D-01, 3.0000000D-01, 5.0000000D-01, 1.0000000D+00,  
2.0000000D+00, 4.0000000D+00, 8.0000000D+00, 2.0000000D+01,  
5.0000000D+01, 1.0000000D+02, 2.0000000D+02, 3.0000000D+02,  
8.0000000D+02, 3.0000000D+03

### 8.1.3 Übergang zwischen unter- und überkritischem Stoffwertpaket

In ATHLET existieren nun zwei eigenständige Stoffwertpakete. Eines für unterkritisches Wasser, das die Stoffwerte für Wasser und für Dampf bis zu einem maximalen Druck von 21.9 MPa bestimmt, und eines für überkritische „Flüssigkeit“, das erst ab 22.12 MPa Werte liefert. Wollte man für letzteres den Gültigkeitsbereich zu niedrigeren Drücken hin erweitern, müsste man auch in diesem Stoffwertpaket beide Phasen abbilden, also die Stoffwerte für Wasser und Dampf getrennt berechnen, was zusätzliche Splinekoeffizienten für „Dampf“ und die Darstellung der metastabilen Zustände beider Phasen erfordert hätte. Hinzu kommt, dass eine Splineapproximation der Stoffwerte am kritischen Punkt nicht realisierbar ist und dass es für die Anwendung in ATHLET-Simulationen möglicherweise numerische Probleme geben könnte, würde man die Stoffwerte realistisch – also ihr extremes Verhalten – abbilden. Eine „Entschärfung“ könnte die numerische Stabilität erhöhen, ohne allzu viel Genauigkeit einzubüßen. Für die Realisierung des Übergangs zwischen den Stoffwertpaketen wirkt sich die fehlende Überlappung aber sehr nachteilig aus. Hier müssen die Eingangsparameter Druck und Temperatur für die jeweiligen Stoffwertpakete individuell auf deren jeweiligen Gültigkeitsbereich begrenzt werden, während die Sättigungs- bzw. pseudokritischen Werte kontinuierlich berechnet werden. Während im unterkritischen Stoffwertpaket die Dampfwerte als Funktion des Drucks und der Temperaturdifferenz  $T_v - T_s$  berechnet werden, werden die der Flüssigkeit als Funktion von  $T_L$  und der Druckdifferenz  $P - P_s$  bestimmt, mit  $P_s = f(T_L)$ . Insbesondere in der Nähe des kritischen Punktes ist deshalb eine sehr hohe Konsistenz von  $T_s = f(P)$  und  $P_s = f(T)$  erforderlich.

### 8.1.4 Grafische Darstellung der thermodynamischen Stoffwerte

Im Folgenden werden die thermodynamischen Stoffgrößen Dichte und spezifische Enthalpie sowie deren partielle Ableitungen nach Druck und Temperatur in der Nähe

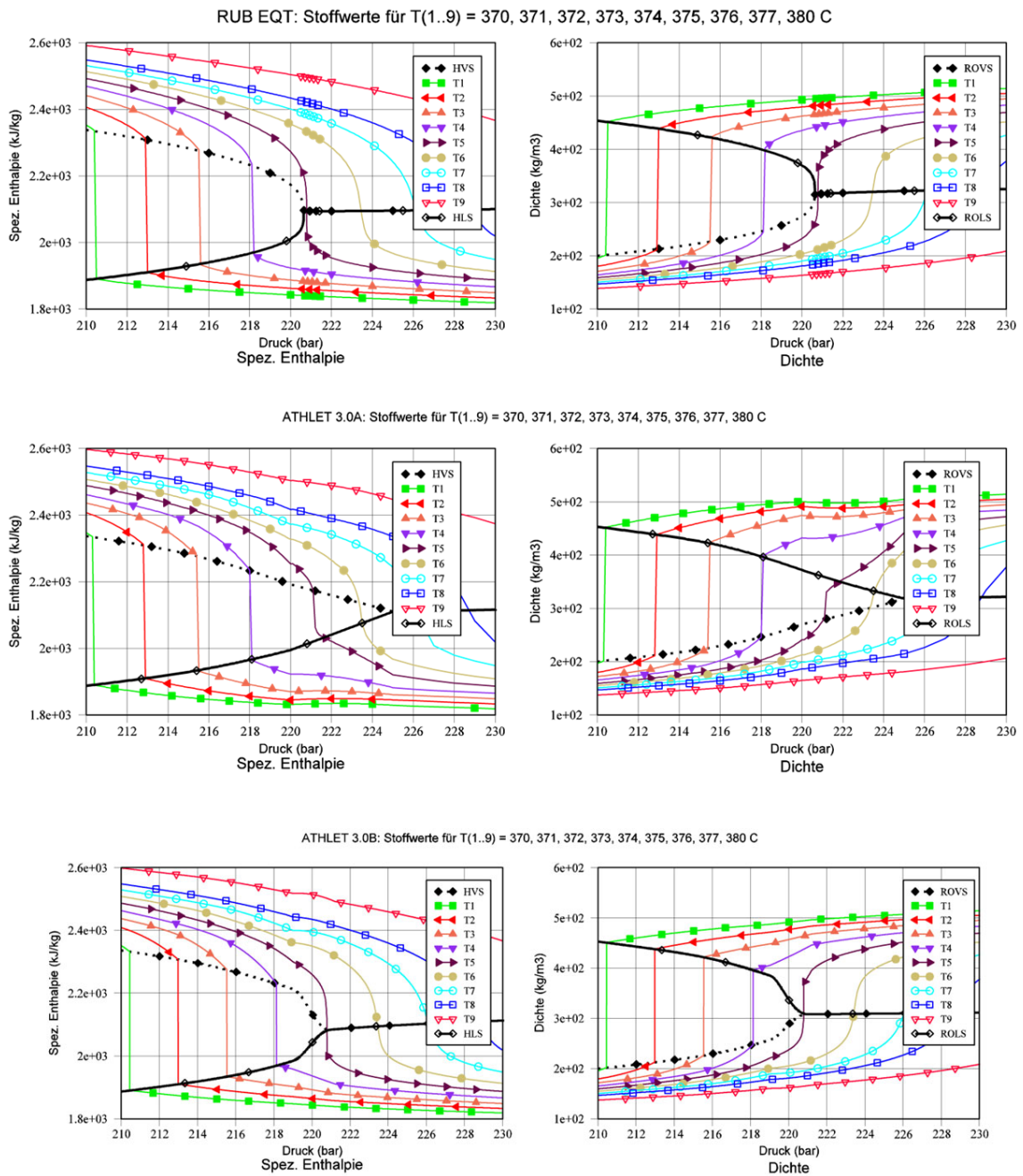


des kritischen Punktes dargestellt. Es werden die von EQT berechneten Werte sowohl mit den bisher in ATHLET 3.0A berechneten als auch mit den neuen ab ATHLET 3.0B verfügbaren Ergebnissen verglichen. Da die partiellen Ableitungen einen großen Wertebereich aufweisen, werden sie unterschiedlich gezoomt dargestellt. Auf den folgenden Seiten stehen oben die EQT-Werte, darunter die von A3.0A und ganz unten die von A3.0B. Die markantesten Unterschiede sind mit Pfeilen gekennzeichnet.

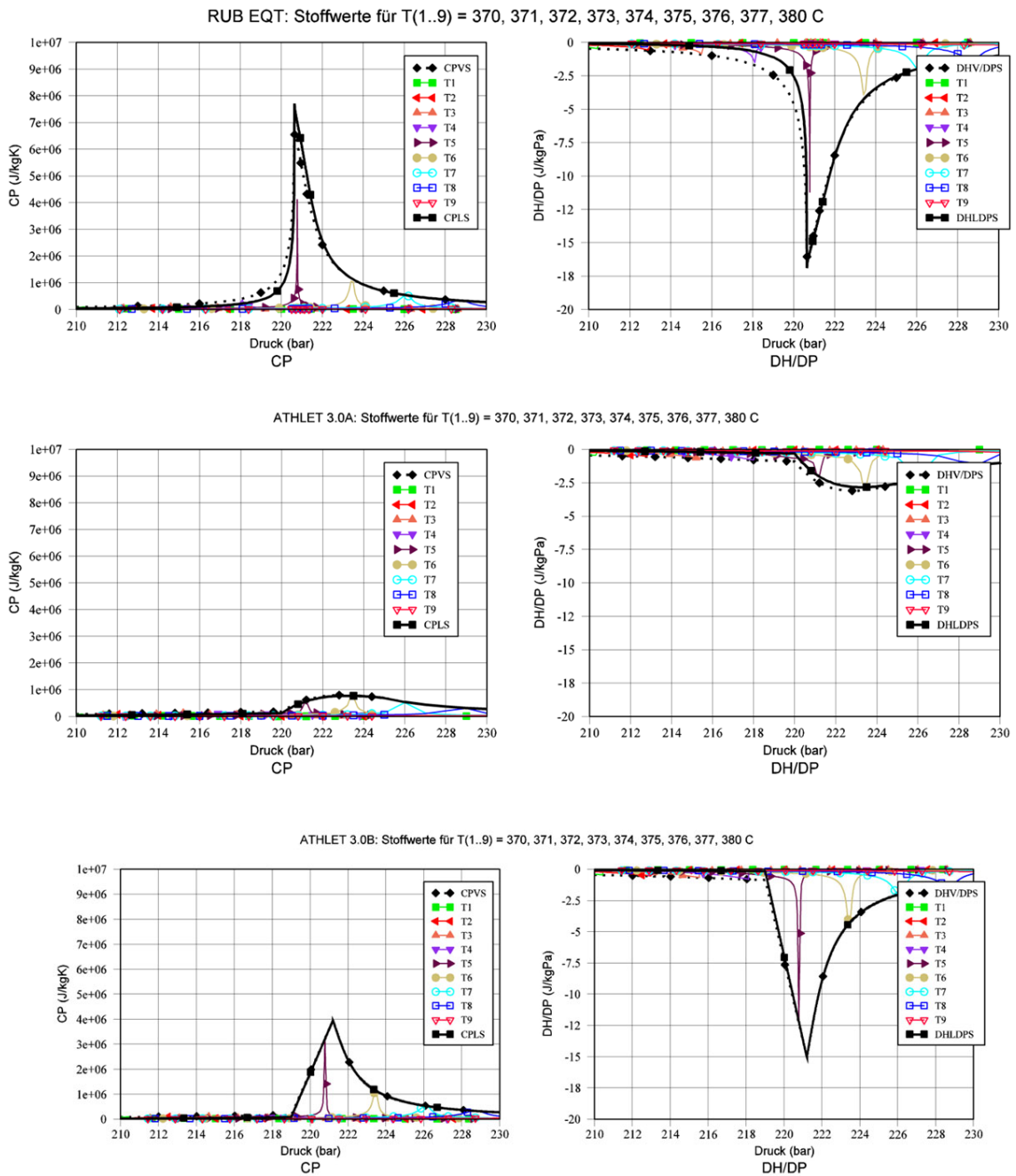
Die wichtigsten Verbesserungen sind im Folgenden kurz skizziert:

- Aufgrund des verkleinerten Übergangsintervalls zwischen den beiden Stoffwertpaketen treffen sich die Sättigungswerte für Dichte und spezifische Enthalpie der beiden Phasen nun bei 22.12 MPa, also deutlich näher am kritischen Druck von 22.07 MPa (s. Abb. 8.3).
- Die Maximalwerte der partiellen Ableitungen in der Umgebung des kritischen Punktes konnten deutlich erhöht werden (s. Abb. 8.4 und Abb. 8.5). Sie erreichen jedoch immer noch nicht die realistischen Werte; im Hinblick auf die numerische Stabilität von ATHLET ist dies aber auch nicht unbedingt erstrebenswert.
- Die Welligkeit der partiellen Ableitungen konnte verringert, aber nicht vollständig beseitigt werden (s. Abb. 8.8 und Abb. 8.9).

Die Verbesserungen beschränken sich im Wesentlichen auf den Bereich überkritischer Drücke und das Übergangsintervall zwischen den beiden Stoffwertpaketen. Nähert man sich von niedrigem Druck aus dem kritischen Punkt, weisen die Stoffwerte einen zunehmend gekrümmten Verlauf auf. Dieser wird vom unterkritischen Stoffwertprogramm nicht in vollem Umfang wiedergegeben. Am Deutlichsten ist dies bei den partiellen Ableitungen zu erkennen (s. beispielsweise Abb. 8.4 und Abb. 8.5). Da man Splinesfunktionen nicht manuell erweitern kann, hätte man zur Behebung dieser Abweichungen das unterkritische Stoffwertpaket komplett neu erstellen müssen. Aus den bereits eingangs erwähnten Gründen wurde davon abgesehen.



**Abb. 8.3** Spezifische Enthalpie und Dichte, Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B



**Abb. 8.4** Partielle Ableitungen  $\frac{\partial h}{\partial T}$  und  $\frac{\partial h}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B.

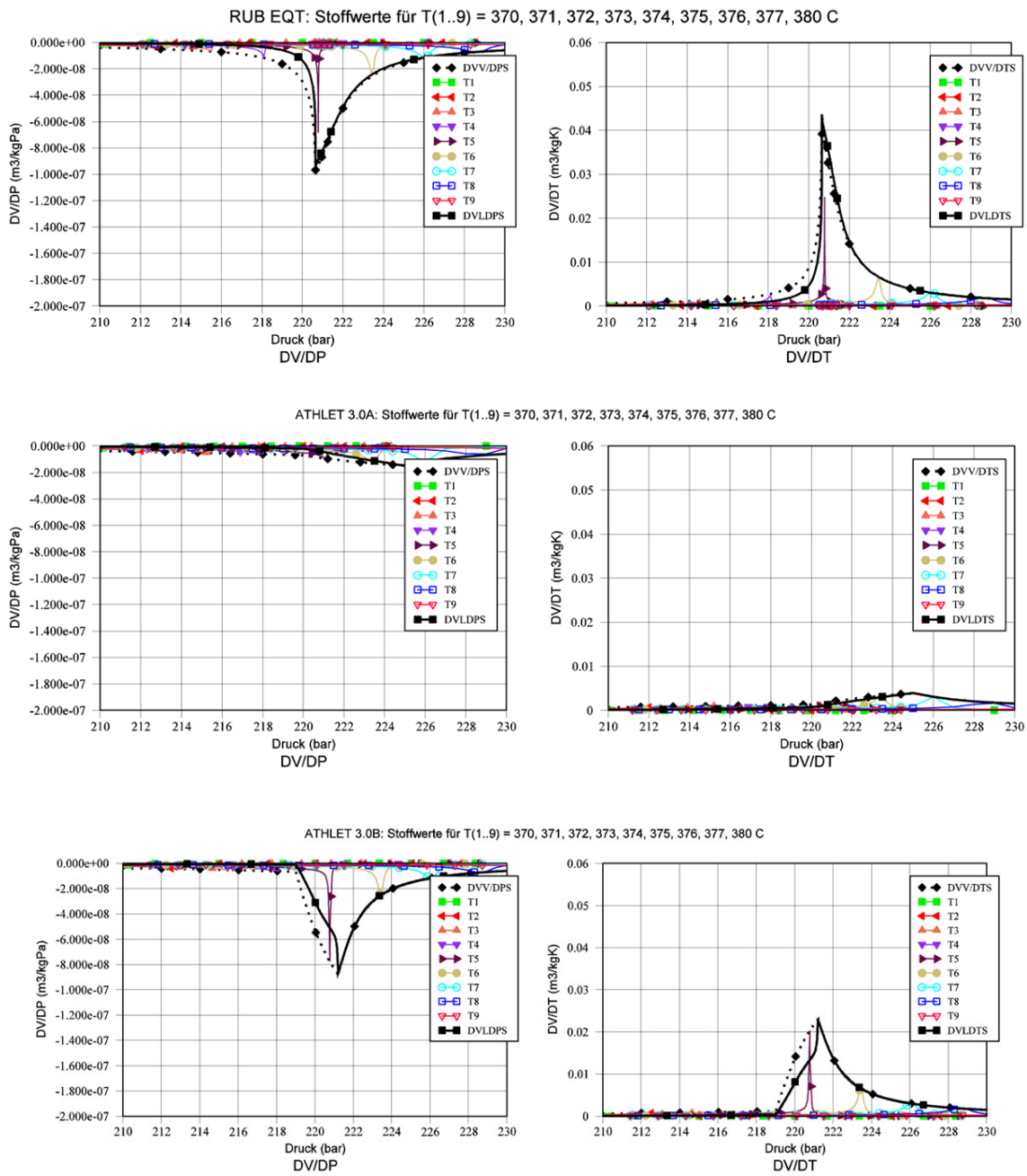
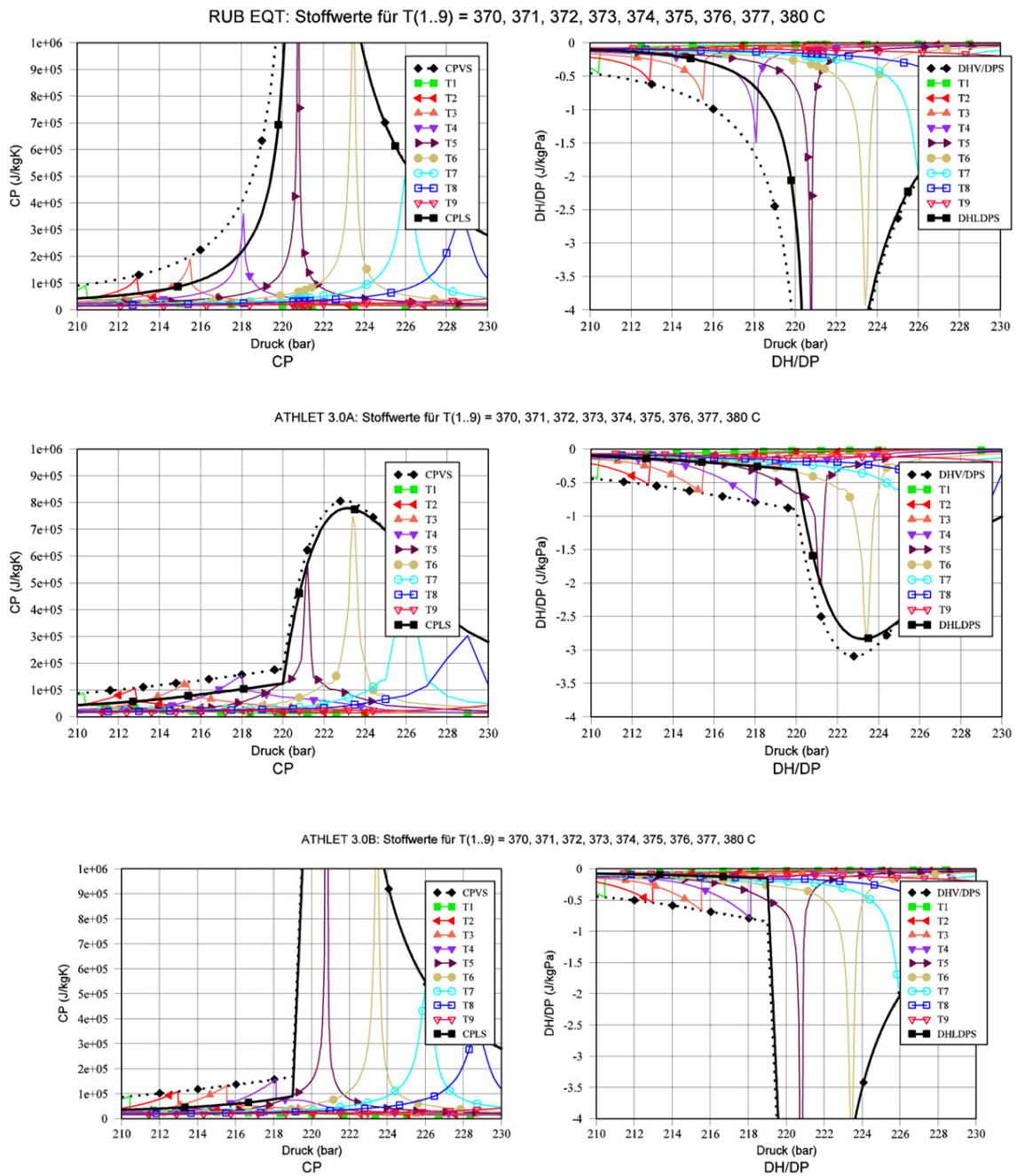
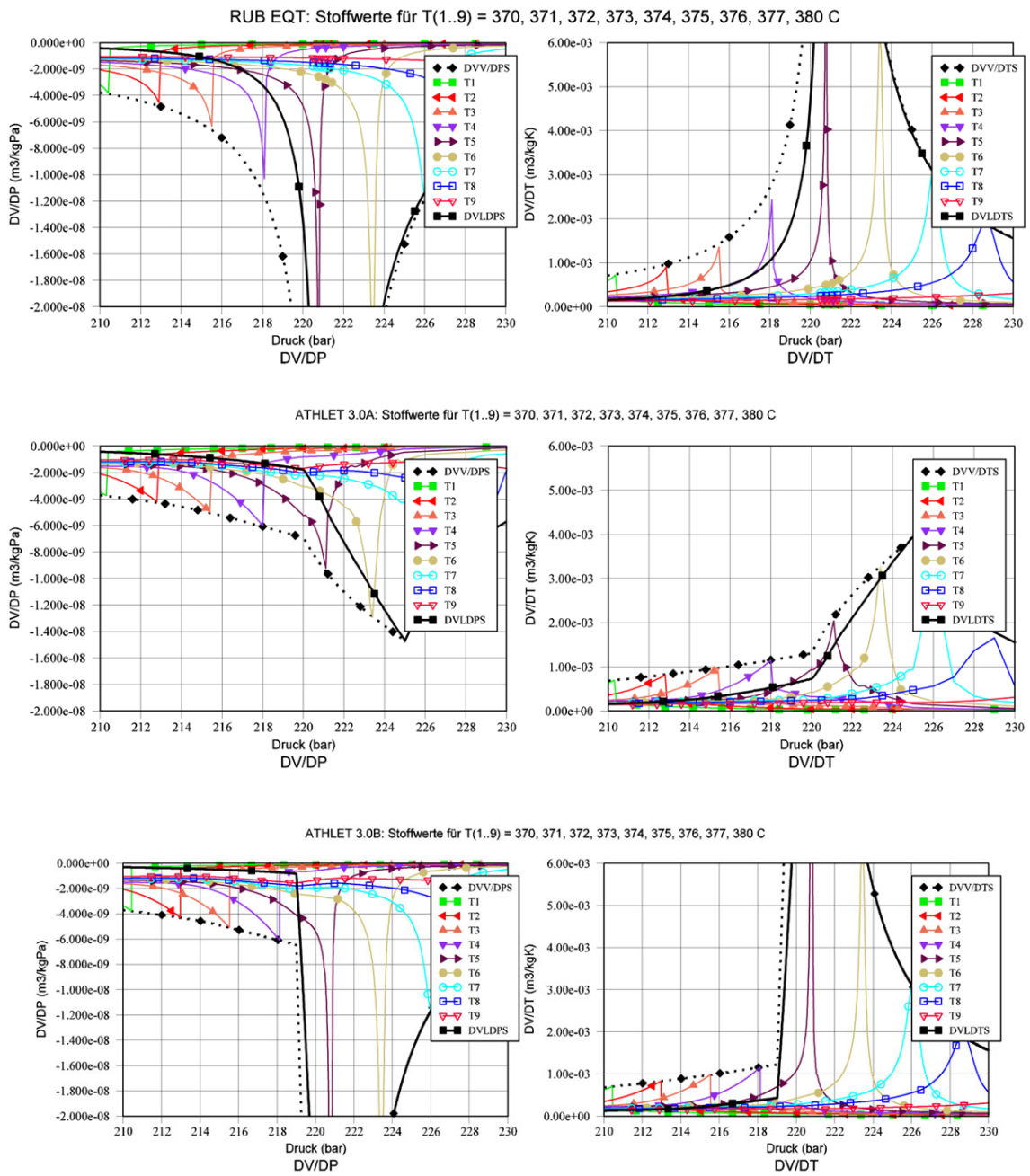


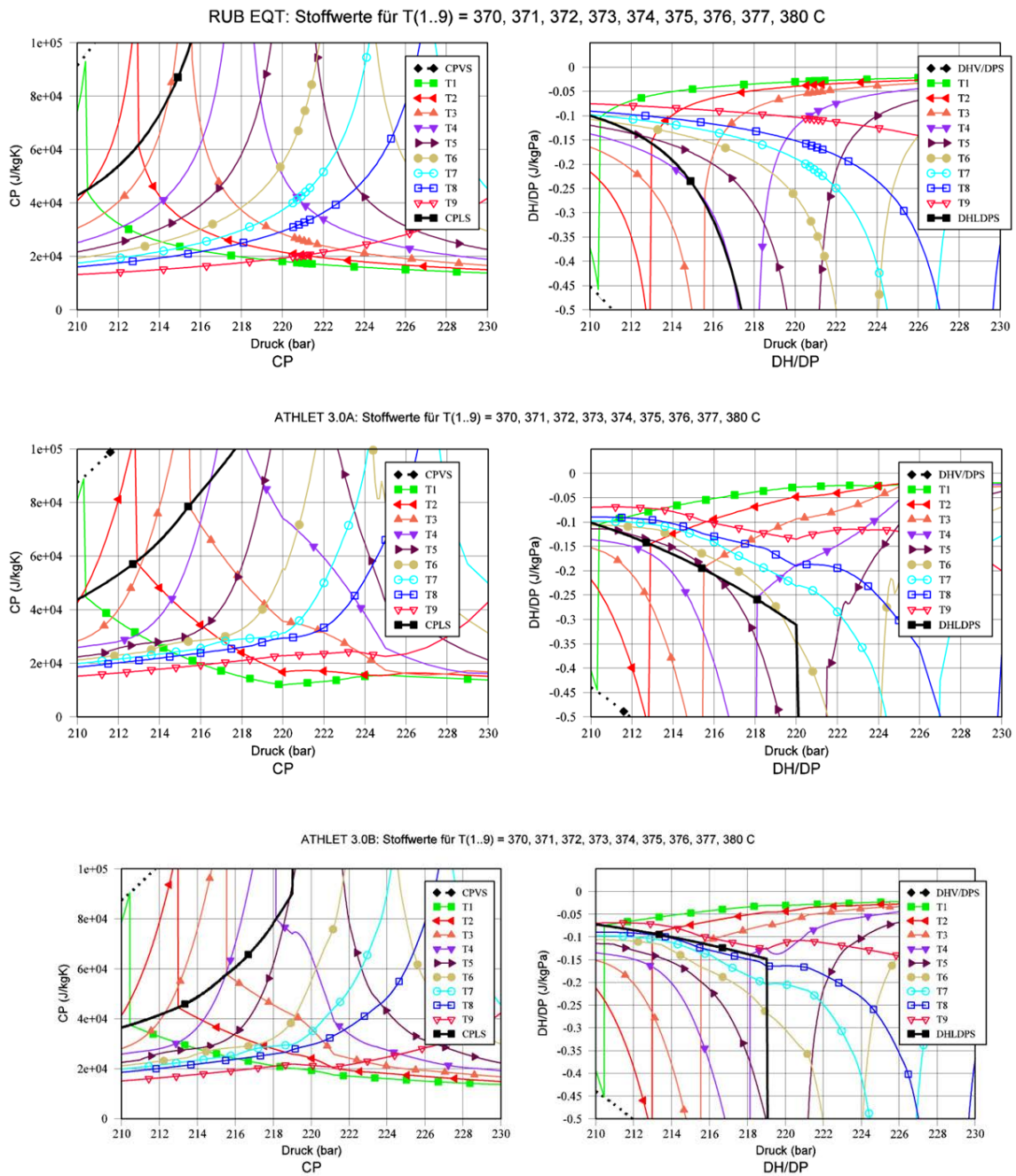
Abb. 8.5 Partielle Ableitungen  $\frac{\partial v}{\partial T}$  und  $\frac{\partial v}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B.



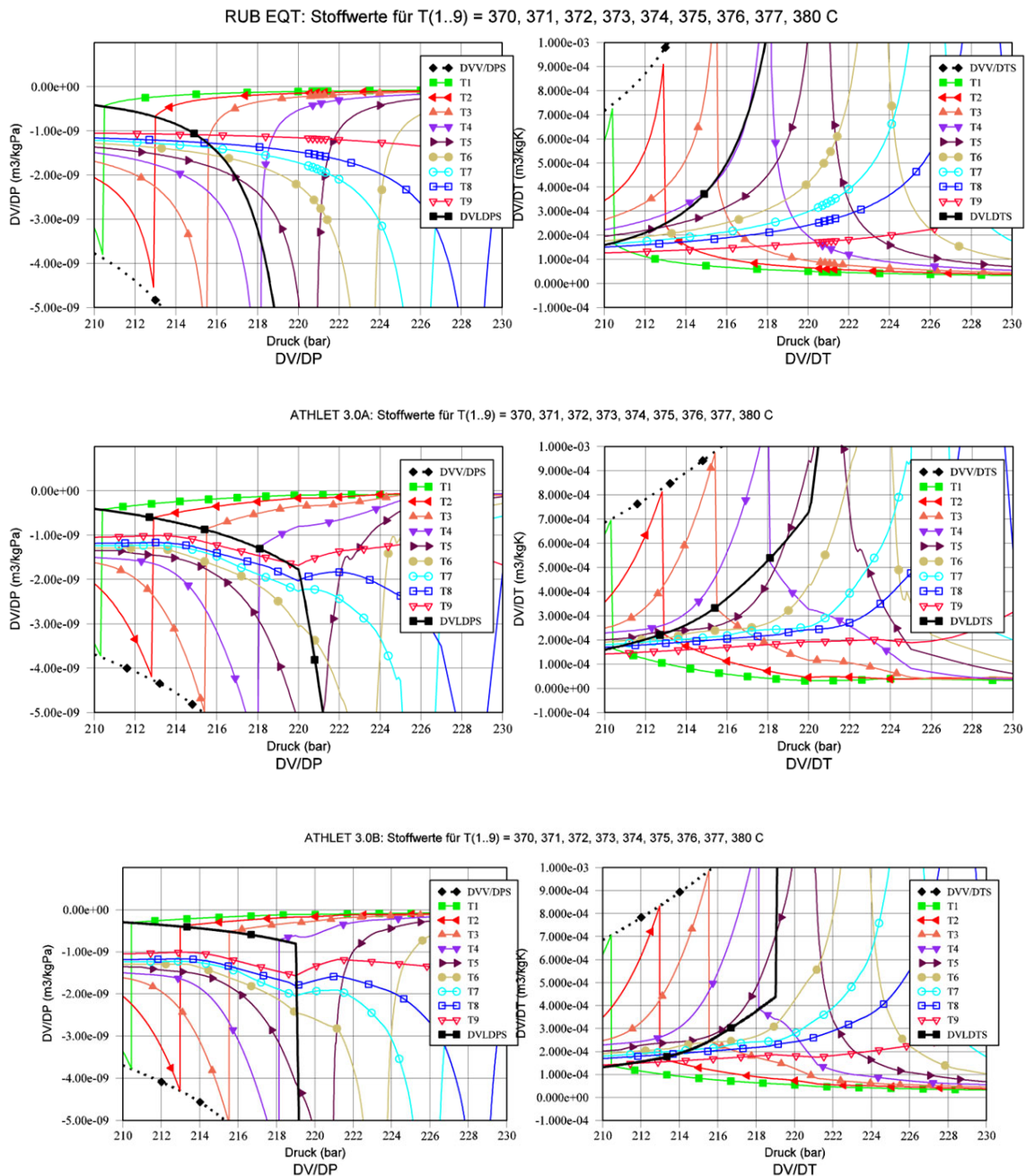
**Abb. 8.6** Partielle Ableitungen  $\frac{\partial h}{\partial T}$  und  $\frac{\partial h}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 1).



**Abb. 8.7** Partielle Ableitungen  $\frac{\partial v}{\partial T}$  und  $\frac{\partial v}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoozt 1).



**Abb. 8.8** Partielle Ableitungen  $\frac{\partial h}{\partial T}$  und  $\frac{\partial h}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 2).



**Abb. 8.9** Partielle Ableitungen  $\frac{\partial v}{\partial T}$  und  $\frac{\partial v}{\partial p}$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 2).

### 8.1.5 Testrechnungen mit dem neuen Stoffwertpaket

Mit dem verbesserten Stoffwertpaket wurden mehrere ATHLET-Rechnungen durchgeführt und die Ergebnisse mit ATHLET 3.0A verglichen. Die Ergebnisse waren insgesamt sehr ähnlich, die Verbesserung der Stoffwertberechnung hatte also keinen großen Einfluss. Das liegt vermutlich daran, dass die Stoffwerte nur in einem kleinen Zu-



standsbereich in der Umgebung des kritischen Punktes überarbeitet worden sind. Gleichzeitig ist dies auch ein Beleg dafür, dass das alte Stoffwertpaket durchaus anwendbar war. Erfreulicherweise hat sich Sorge, wegen der nun deutlich größeren partiellen Ableitungen Einbußen bei der numerischen Stabilität hinnehmen zu müssen, als unbegründet erwiesen.

Betrachtet man jedoch lokale Zustände detaillierter, so sind doch hin und wieder Verbesserungen erkennbar. In Abb. 8.10 werden physikalische Größen in einem algebraischen Kontrollvolumen (time dependent volume, TDV) verglichen, dessen Druck bei konstanter spezifischer Enthalpie den kritischen Druck passiert. Im TDV wird aus den vom Benutzer vorgegebenen Werten für Druck und spezifischer Enthalpie die Fluidtemperatur iterativ durch Aufruf des Stoffwertpaketes für Druck und Temperatur ermittelt. Danach werden – wie üblich – die Stoffwerte berechnet. Die Bilder zeigen, dass mit ATHLET 3.0A der dabei auftretende Temperaturanstieg beim kritischen Druck gestört ist, was sich dann auch auf die Berechnung der Dichte auswirkt. Mit dem neuen Stoffwertpaket ist der Temperaturanstieg auch in diesem Bereich stetig und ungestört.

Die Plots der Abb. 8-11 zeigen die Verläufe von Temperatur und spezifischer Wärmekapazität entlang eines beheizten Rohres (konstante Leistungsverteilung) bei einem Druck von 24 MPa. Die Fluidtemperatur passiert dabei die pseudokritische Temperatur, was deutlich am dort flachen Temperaturanstieg zu erkennen ist. Während sich die Temperaturverläufe der beiden Programmversionen kaum unterscheiden, zeigt das alte Programmpaket (A3.0A) einen deutlichen Einbruch der spezifischen Wärmekapazität in der Nähe der pseudokritischen Temperatur; mit dem neuen Stoffwertprogramm wird ein glatter Verlauf erzielt.

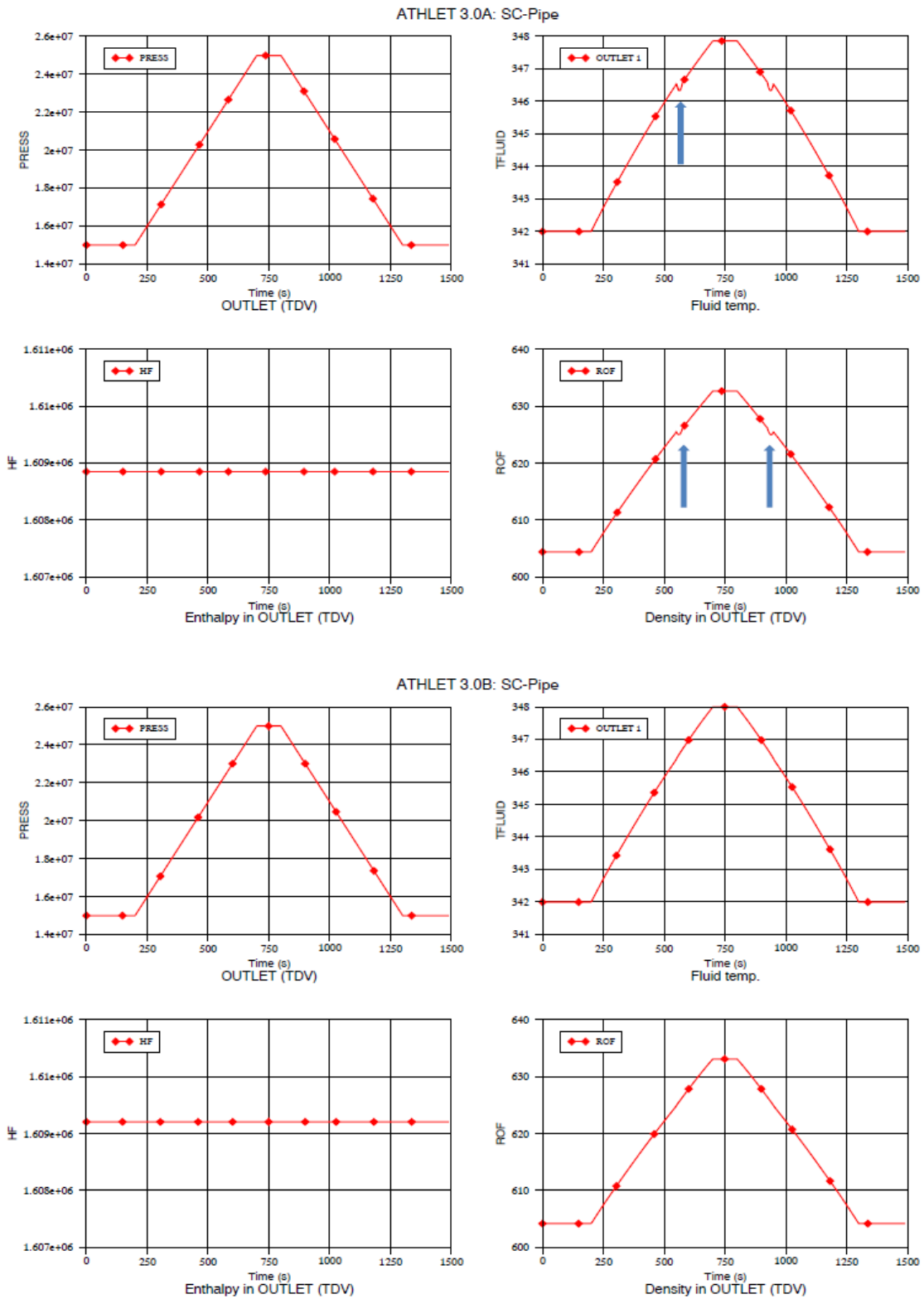
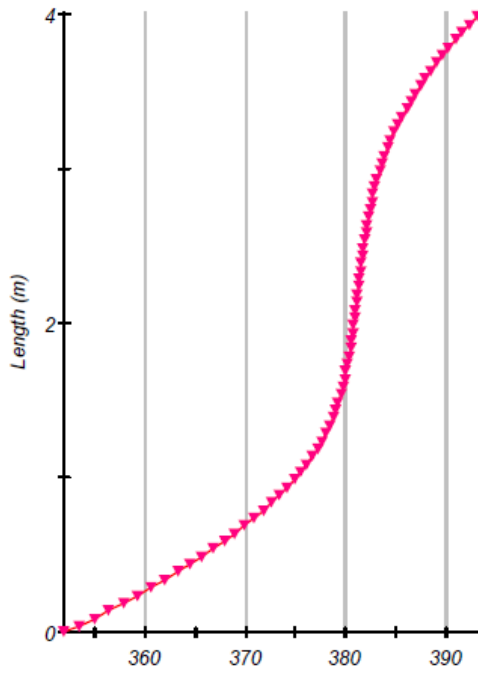
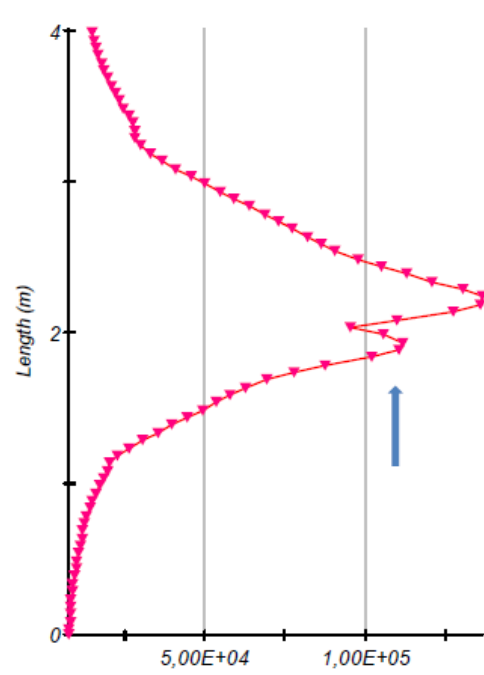


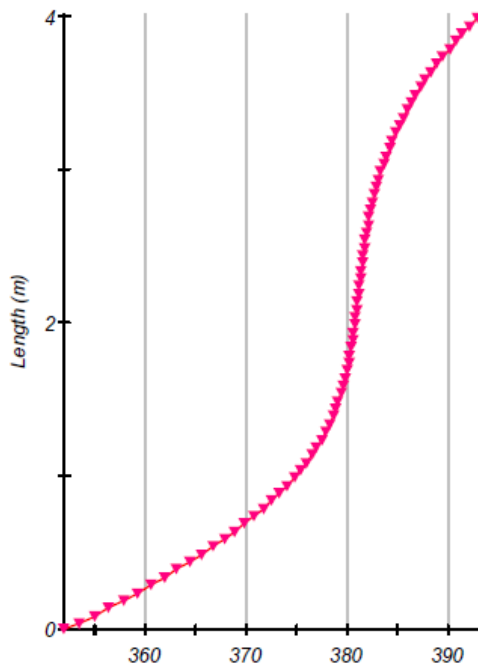
Abb. 8.10 Pipe mit Drucktransiente; Vergleich von A3.0A (oben) mit A3.0B (oben).



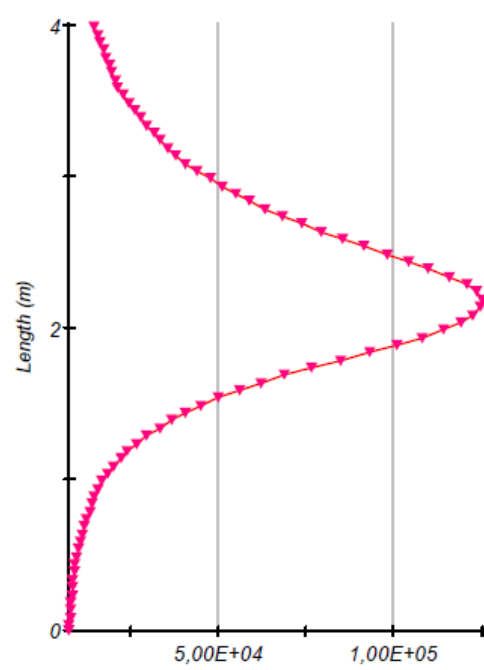
PIPE - TFLUID [C]



PIPE - CPL [undefined]



PIPE - TFLUID [C]



PIPE - CPL [undefined]

**Abb. 8.11** Beheiztes Pipe bei 24 MPa: Ortsprofil von Fluidtemp. (links) und spez. Wärmekapazität (rechts); Vergleich von A3.0A (oben) mit A3.0B (unten)

## 8.2 Erweiterungen in ATHLET für flüssigmetallgekühlte Systeme

Bei Reaktoren der Generation IV sind Reaktivitätsrückwirkungen zu modellieren, die im LWR keine Bedeutung haben und deshalb vom Punktkinetikmodell in ATHLET nicht erfasst werden. Über die externe Reaktivität des Punktkinetikmodells können solche Beiträge dennoch berücksichtigt werden. Dazu müssen vom Programmanwender geeignete GCSM-Modelle geschrieben werden, die die erforderlichen thermohydraulischen Daten abgreifen und diese mit Hilfe von Tabellen in Rückwirkungskoeffizienten umrechnen. Zu diesem Zweck wurde ein neues GCSM-Prozesssignal geschrieben, das für den gesamten Kern oder Teile davon die mittlere Hüllrohroberflächentemperatur gewichtet bestimmt.

In ATHLET wurde die Korrelation nach Philippeoneau /PHI92/ implementiert, die die Wärmeleitfähigkeit von MOX-Brennstoff als Funktion der Temperatur und des Abbrands berechnet.



## **9 AP 7: Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA**

### **9.1 Das EU-Projekt ESNII+**

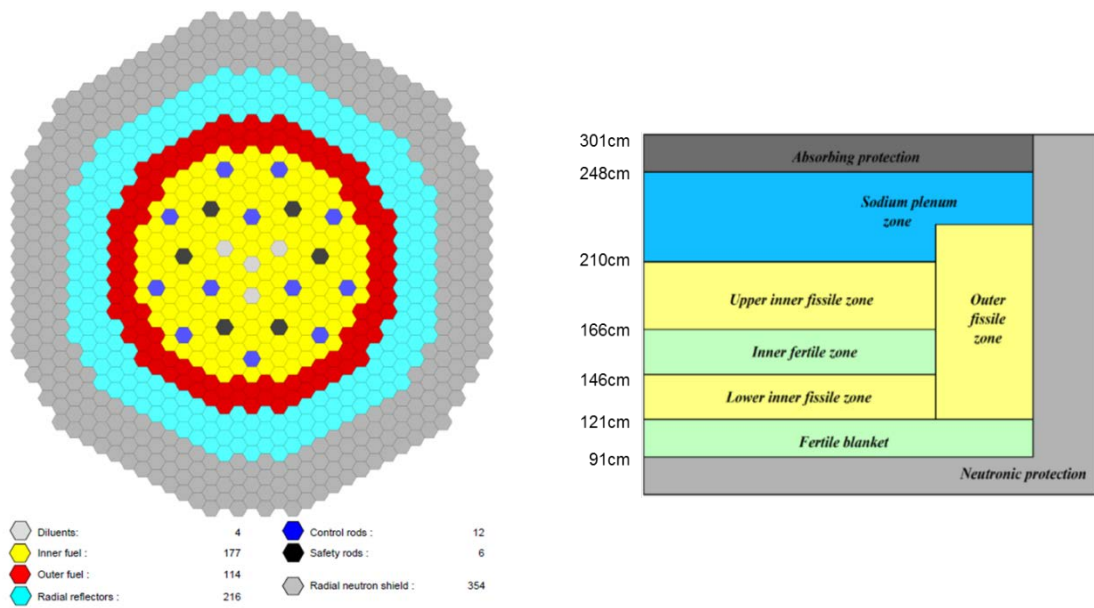
Im EU-Vorhaben ESNII+ ist die GRS im Workpackage 6 (Core Safety) an der Task 6.1 (Core safety calculations for the ESNII reactors) beteiligt und bearbeitet darin die Subtasks 6.1.2 (ASTRID core safety coefficients) und 6.1.3 (ASTRID core behaviour under design-basis accident conditions). Die durchgeführten Arbeiten und Ergebnisse werden in den folgenden drei Abschnitten dokumentiert.

#### **9.1.1 Neutronenphysikalische Modellierung des ASTRID-Kerns**

Basierend auf der in Subtask 6.1.1 bereitgestellten neutronenphysikalischen Spezifikation des ASTRID-Kerns wurden deterministische 3D-Kernberechnungen zur Ermittlung von Multiplikationsfaktor, räumlicher Leistungsverteilung, Abschaltreaktivitäten und der integralen Steuerelementwirksamkeit sowie folgender Reaktivitätskoeffizienten durchgeführt:

- Doppler-Konstante,
- Reaktivitätsrückwirkung aufgrund thermischer Brennstoff-/Hüllrohr-Ausdehnung,
- Diagrid-Reaktivitätsrückwirkung,
- Reaktivitätsrückwirkung aufgrund thermischer Ausdehnung der Brennelement-Kästen (Wrapper),
- Reaktivitätsrückwirkung aufgrund von Kühlmittelverdrängung (Void) für verschiedene Voiding-Szenarien.

Abb. 9.1 zeigt links einen radialen und rechts einen axialen Schnitt durch den ASTRID-Kern gemäß der im Rahmen von ESNII+ zur Verfügung gestellten Spezifikation.



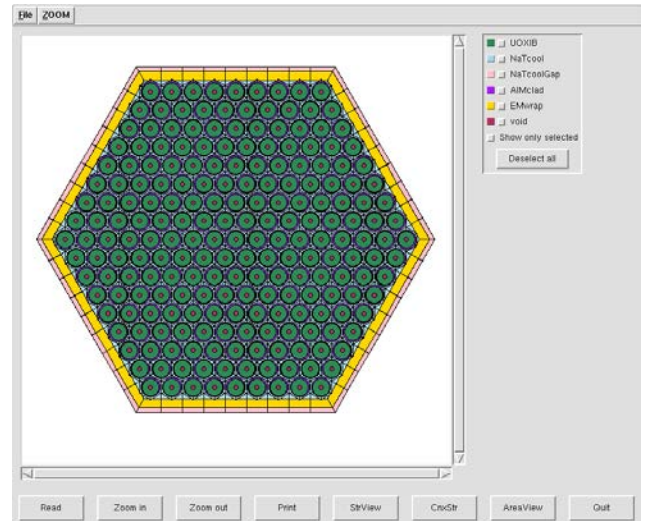
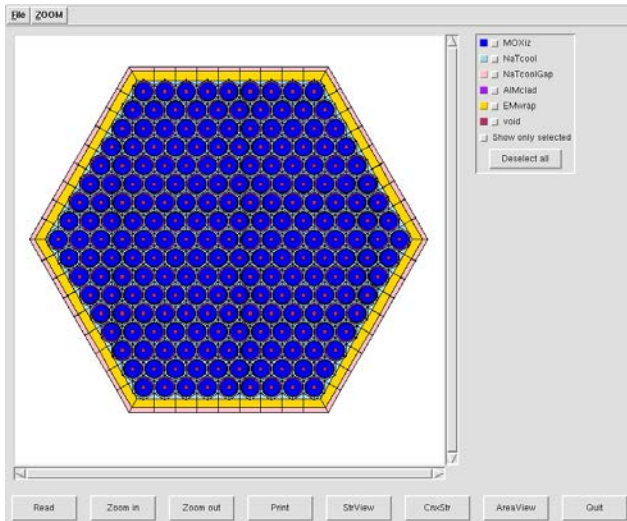
**Abb. 9.1** Radiale (links) und axiale (rechts) Kernkonfiguration von ASTRID gemäß der Spezifikation von ESNII+.

Zur 3D-Kernberechnung wurden zunächst mittels HELIOS-1.12 Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für alle Brennelemente sowie alle sonstigen Komponenten (Steuer-, Abschalt-, Reflektor-, Schild-, Natrium-Plenum-Elemente etc.) in 8 Energiegruppen (siehe Tab. 9.1) berechnet.

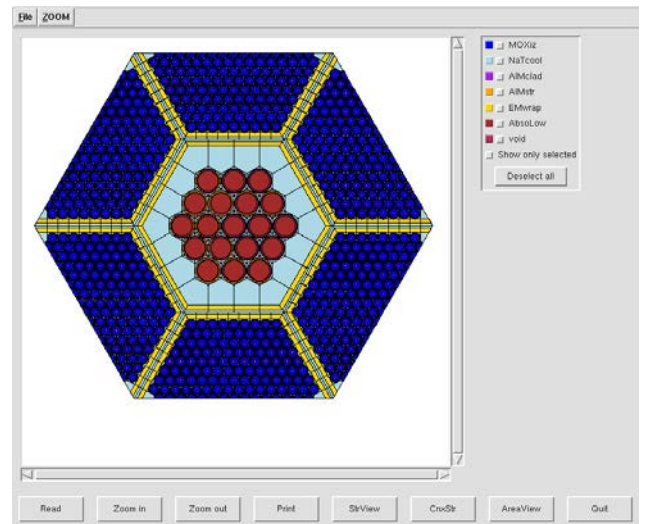
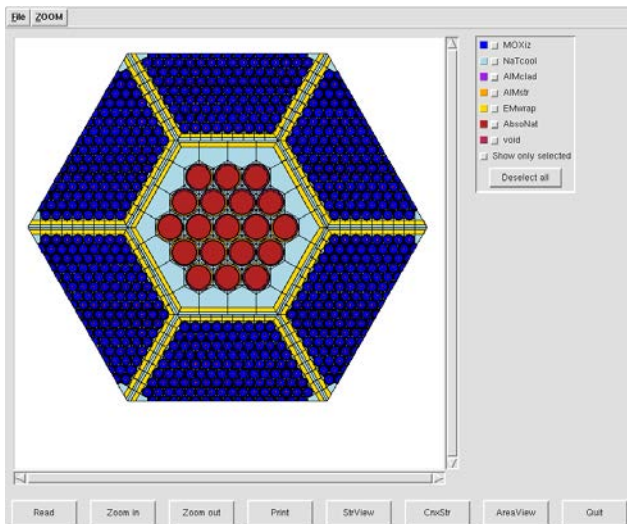
Index	Lower limit (eV)	Index	Lower limit (eV)
1	2.2313E+06	5	4.0868E+04
2	8.2085E+05	6	1.5034E+04
3	3.0197E+05	7	7.4852E+02
4	1.1109E+05	8	1.0000E-04

**Tab. 9.1** Energiegrenzen der 8-Gruppen-Struktur.

Für Brennelemente der Spalt- und Brutzone sowie innerer und äußerer Kernzone wurde in HELIOS-1.12 das jeweilige Brennelement im unendlichen Gitter (siehe Abb. 9.2) modelliert, für alle übrigen Komponenten wurden Modelle ähnlich denen in Kapitel 4.3 beschriebenen verwendet (siehe Abb. 9.3). In allen Fällen liefern reflektierende Randbedingungen in HELIOS Anordnungen im unendlichen Gitter für Brennelemente und Superzellen.



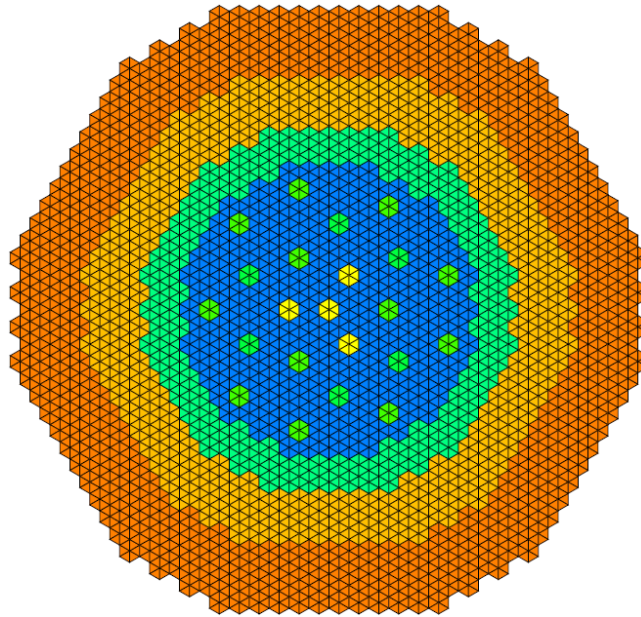
**Abb. 9.2** HELIOS-Modelle für Brennelemente von ASTRID, links z. B. für die Spaltzone der inneren Kernzone und rechts für die untere axiale Brutzone.



**Abb. 9.3** HELIOS-Supercell-Modelle für Nicht-Brennelemente, links z. B. für das CSD-Steuerelement und rechts für das DSD-Abschaltelement.

Mit den wie beschrieben generierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnittsdaten wurden deterministische 3D-Kernberechnungen mit dem Mehrgruppen-Diffusions-Modul TPEN von PARCS durchgeführt. FEM-Diffusionsprogramm durchgeführt. Da das verfügbare Release von PARCS hierbei jedoch teils die in Kapitel 4.4.2.2 erwähnten Konvergenzprobleme aufwies, wurde das FEM-Diffusionsprogramm FEMDiff3D eingesetzt, welches diese Probleme nicht zeigte.





**Abb. 9.4** Materialverteilung des deterministischen Kernmodells von ASTRID in einer Höhe von 120 cm im Nominalzustand mit den Steuerelementen in Parkpositionen.

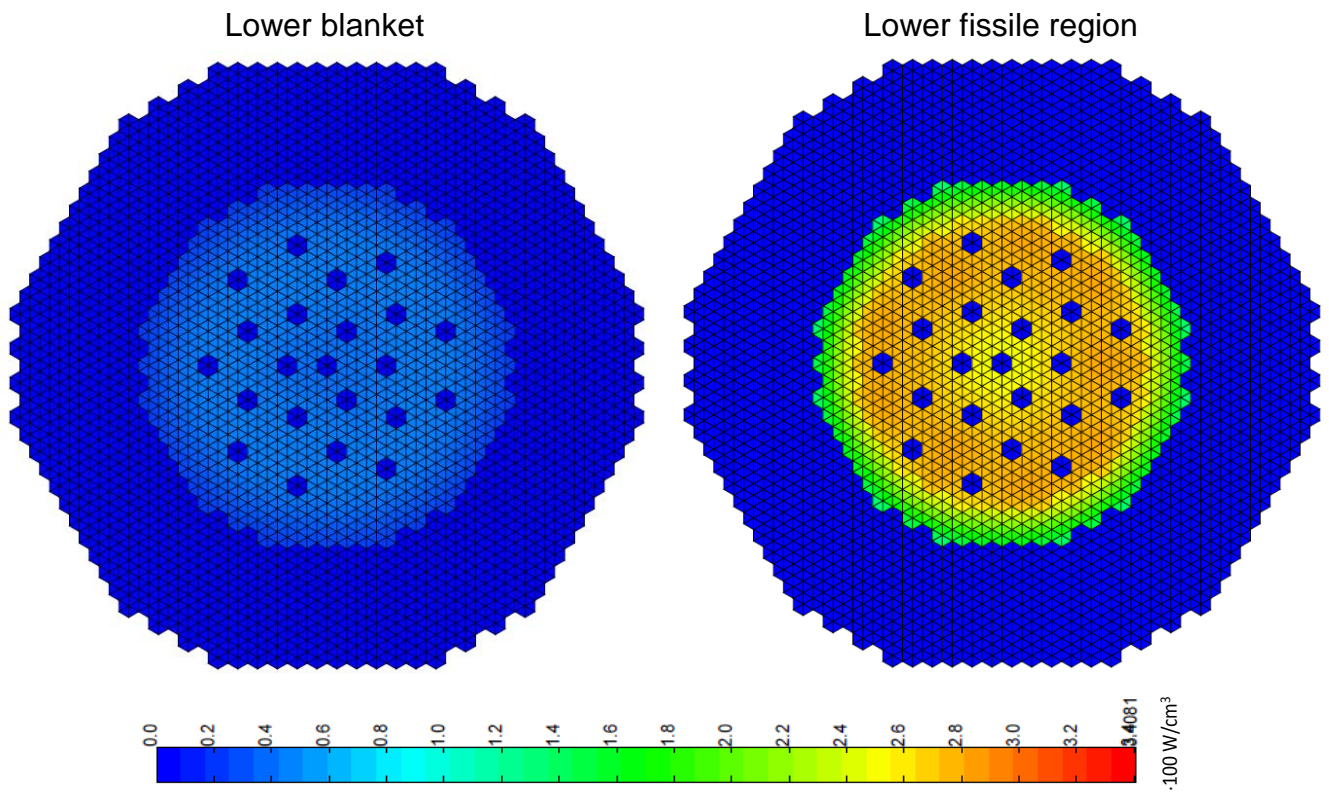
Abb. 9.4 zeigt die Materialverteilung des deterministischen Kernmodells von ASTRID in einer Höhe von 120 cm im Nominalzustand mit den Steuerelementen in Parkpositionen. Zu erkennen sind innere und äußere Kernzone (blau bzw. grün), Reflektor (orange), radialer Schild (rot) sowie die Positionen der Dummy-Elemente (gelb) und der Steuerelemente (grün) in der inneren Kernzone. Alle Geometrie-, Temperatur- und Materialdaten wurden der in Subtask 6.1.1 bereitgestellten Datenbank ASTRIDCoreSpecificationTemplate\_v6b.xls entnommen. Da FEMDiff3D auf Dreiecksprismen benutzt, wird jedes Hexagon durch 6 Dreiecksprismen dargestellt. Die axiale Diskretisierung variiert – je nach Materialzone und deren axialer Ausdehnung – zwischen 2,519 cm und 8,8165 cm, so dass das Modell insgesamt 39 axiale Maschen aufweist.

Für den Kern im Nominalzustand und den Steuerelementen in Parkstellung sind die radialen Leistungsdichteverteilungen in Abb. 9.5 für die untere Brutzone (links) und die untere Spaltzone (rechts) gezeigt, in Abb. 9.6 für die innere Brutzone (links) und die obere Spaltzone (rechts).

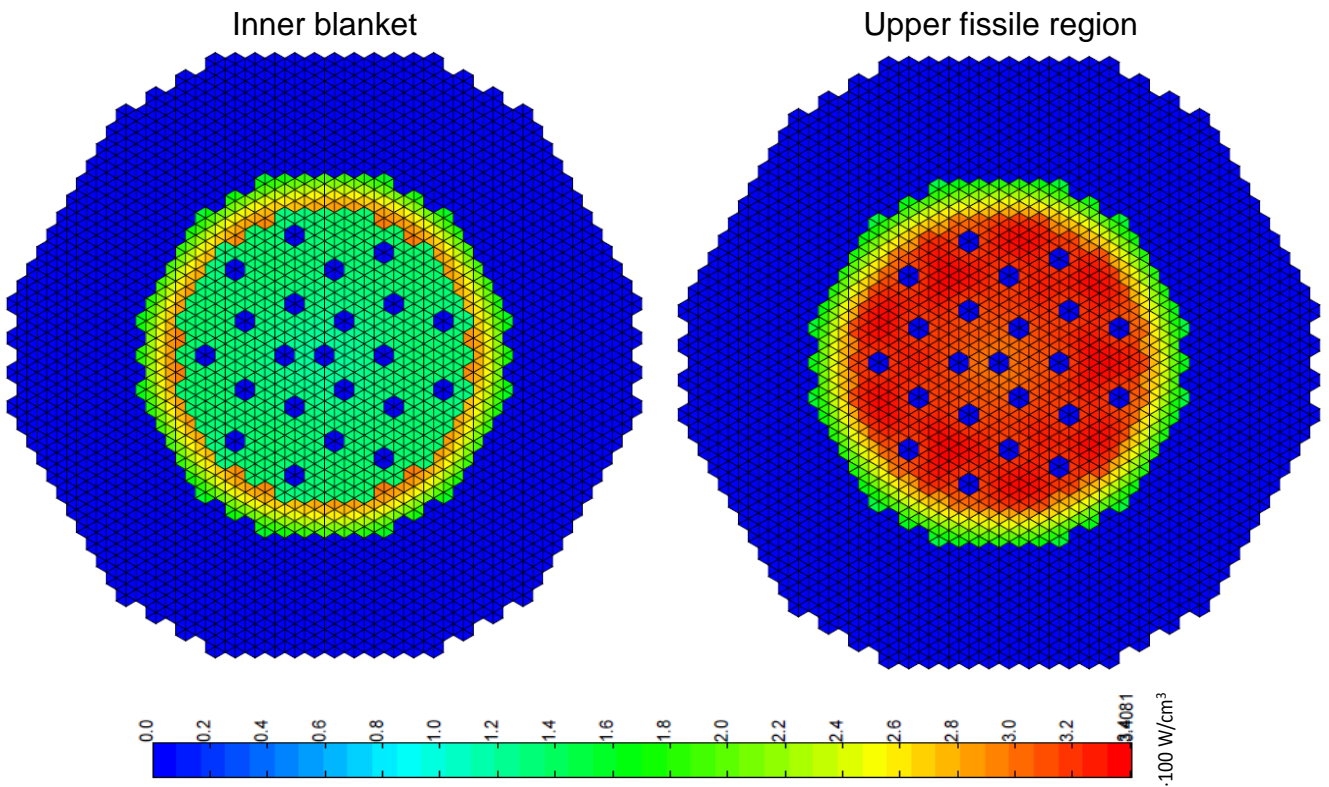
Die integrale Steuerstabwirksamkeit für die CSD-Elemente als Funktion der Einfahrtiefe ist in Abb. 9.8 wiedergegeben.

Tab. 9.2 zeigt die für ASTRID zu betrachtende Kernzustände zur Berechnung der Reaktivitätskoeffizienten der Brennstofftemperatur-Rückwirkung, der Reaktivitätsrückwirkung aufgrund thermischer Brennstoff-/Hüllrohr-Ausdehnung, der Diagrid-Reaktivitätsrückwirkung sowie der Reaktivitätsrückwirkung aufgrund thermischer Ausdehnung der Brennelement-Kästen (Wrapper) mit den jeweils berechnete Multiplikationsfaktoren bzw. Reaktivitätseffekten. Die Reaktivitätsrückwirkung aufgrund von Kühlmittelverdrängung (Voiding) wird für die in Tab. 9.3 aufgelisteten 9 verschiedenen Voiding-Szenarien berechnet. Eine Übersicht im Vergleich mit anderen Rechencodes- und Methoden ist in Abb. 9.7 gezeigt. Abb. 9.8 schließlich gibt die berechnete integrale Steuerstabwirksamkeit der CSD-Elemente als Funktion der relativen Einfahrtiefe (bezogen auf die Gesamt-Einfahrtiefe) an.

Ergänzend zu den deterministischen 3D-Kernberechnungen und zur Berechnung kinetischer Parameter wurde zusätzlich ein detailliertes SERPENT-2.1.21-Ganzkernmodell von ASTRID entwickelt. Ein radialer Schnitt innerhalb der axialen aktiven Kernzone ist in Abb. 9.9 zu sehen. Die auf Basis von JEFF-3.1-Punktdateien berechneten Anteile verzögerter Neutronen und Zerfallskonstanten der Mutterkerne sind in Tab. 9.4 angegeben.



**Abb. 9.5** Radiale Leistungsdichteverteilungen in der unteren Brutzone (links) und der unteren Spaltzone (rechts).



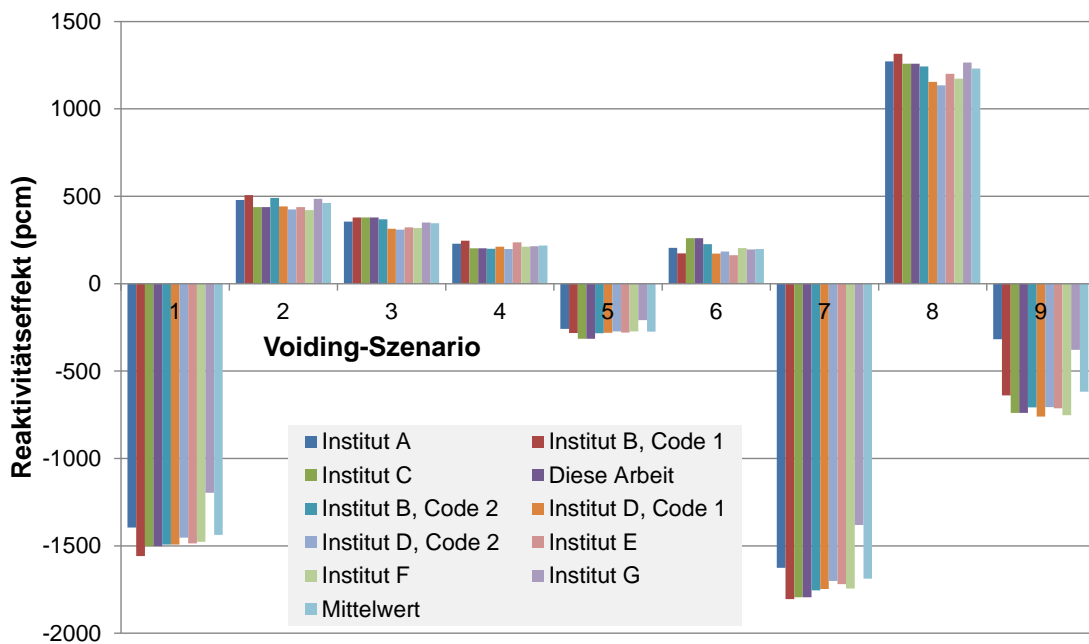
**Abb. 9.6** Radiale Leistungsdichteverteilungen in der inneren Brutzone (links) und der oberen Spaltzone (rechts).

Zustand	T <sub>FUEL</sub>	T <sub>FERT</sub>	T <sub>CLAD</sub>	T <sub>COOL</sub>	T <sub>DIAGRID</sub>	T <sub>WRAP</sub>	CSD-Position	DSD-Position	k <sub>eff</sub>	Δρ (pcm)
SCRAM	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	100%	100%	0,94930	-5805
SCRAM+COLD	473 K	473 K	473 K	473 K	473 K	473 K	100%	100%	0,95659	-5002
DOPPLER1	1200 K	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00596	129
DOPPLER2	1800 K	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00353	-112
DOPPLER3	NOM	600 K	NOM	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00580	113
DOPPLER4	NOM	1200 K	NOM	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00384	-81
CLAD_EXP1	NOM	NOM	NOM+200	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00441	-25
CLAD_EXP2	NOM	NOM	NOM+400	NOM	NOM	NOM	CRITICAL	0%	1,00397	-68
DIAGR_EXP1	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM+200	NOM	CRITICAL	0%	1,00280	-185
DIAGR_EXP2	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM+400	NOM	CRITICAL	0%	1,00080	-384
WRAP_EXP1	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM+200	CRITICAL	0%	1,00497	31
WRAP_EXP2	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM	NOM+400	CRITICAL	0%	1,00518	51

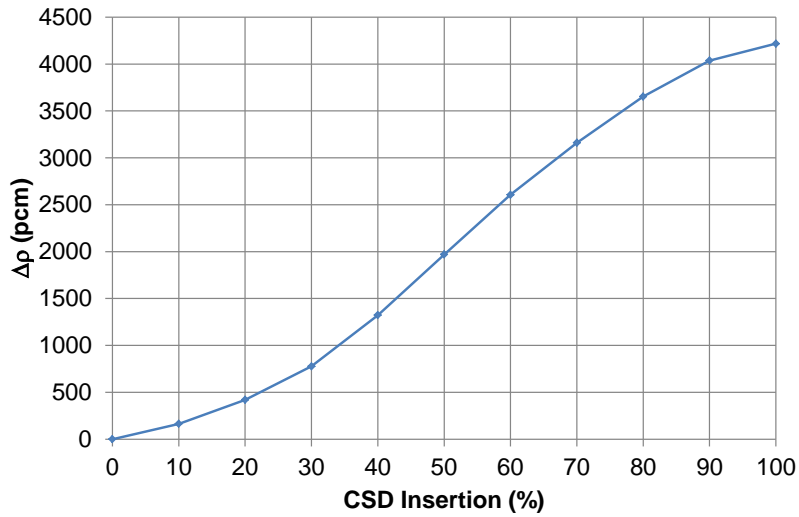
**Tab. 9.2** Für ASTRID zu betrachtende Kernzustände und berechnete Multiplikationsfaktoren bzw. Reaktivitätseffekte. NOM bedeutet Temperatur im Nominalzustand.

Voiding-Szenario	Void effect (pcm)
1. Void everything above inner zone fissile	-1501
2. Void upper fissile region of inner zone only	438
3. Void inner fertile region of inner zone only	379
4. Void lower fissile region of inner zone only	203
5. Void everything above outer zone fissile	-315
6. Void fissile region of outer zone only	261
7. Void everything above inner zone fissile and outer zone fissile	-1794
8. Void lower fissile, upper fissile and inner fertile region of inner zone as well as fissile region of outer zone	1258
9. Void all fuel regions (fissile and fertile) and all regions above, including interassembly gaps	-739

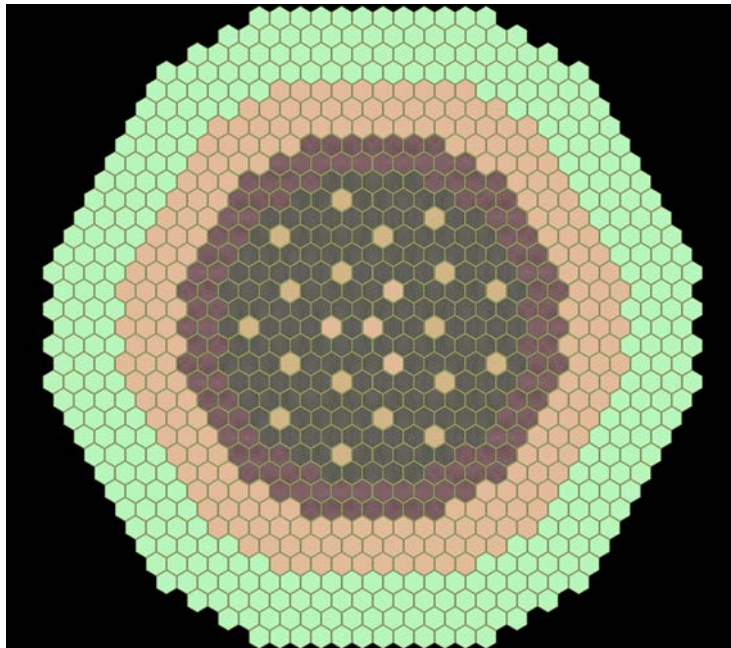
**Tab. 9.3** Für ASTRID zu betrachtende Voiding-Szenarien. (In allen Szenarien außer Nr. 9 verbleibt Kühlmittel zwischen benachbarten Wrappern.)



**Abb. 9.7** Reaktivitätswerte für die verschiedenen Voiding-Szenarien im Vergleich mit den Ergebnissen anderer Codes/Institute.



**Abb. 9.8** Integrale Steuerstabwirksamkeit der CSD-Elemente.



**Abb. 9.9** Radiale Darstellung des SERPENT-Ganzkernmodells von ASTRID in der aktiven axialen Kernregion.

Delayed neutron precursor group	1	2	3	4	5	6	7	8
$\beta$ (pcm)	5.64	58.73	21.27	51.23	113.28	46.49	41.19	19.88
$\lambda$ (1/sec)	0.012467	0.028292	0.042524	0.13304	0.29247	0.66649	1.6348	3.5546

**Tab. 9.4** Mit SERPENT und JEFF-3.1-Punktdateien berechnete Anteile verzögerter Neutronen und Zerfallskonstanten der Mutterkerne für ASTRID.

## 9.1.2 Thermohydraulische Modellierung des Kerns und Primärsystems von ASTRID in ATHLET

### 9.1.2.1 Modellierung der nuklearen Leistungsfreisetzung

Gemäß ESNII+-ASTRID-Spezifikation ist die nukleare Leistungsfreisetzung nach einem Punktkinetikmodell zu bestimmen. Um die in Spalt- und Brutzonen unterschiedlichen Doppler-Rückwirkungskoeffizienten und Bezugstemperaturen berücksichtigen zu können, werden die Brennstäbe durch unterschiedliche HCOs abgebildet. Darüber hinaus ist der Reaktorkern in zwei Neutronenkinetik-(NK-)Sektionen unterteilt, je eine für Spalt- und Brutzonen, und die HCOs sind den diesen beiden NK-Sektionen entsprechend zugeordnet. Somit werden die Rückwirkungen aus Dopplertemperatur, Kühlmitteldichte und Kühlmitteltemperatur für Spalt- und Brutzonen der einzelnen Brennstäbe unabhängig voneinander berechnet, wobei für Kühlmitteltemperatur und -dichte dieselben Rückwirkungskoeffizienten verwendet werden, d.h. keine Unterscheidung zwischen Spalt- und Brutzone getroffen wird.

Das Punktkinetikmodell von ATHLET wurde ursprünglich für die Simulation von Leichtwasserreaktoren entwickelt. Es berücksichtigt daher Rückwirkungen von Dopplertemperatur sowie Temperatur und Dichte des Kühlmittels. Zusätzlich kann ein externes Reaktivitätssignal hinzugefügt werden, welches vom GCSM-Modul von ATHLET geliefert wird. Die Simulation von ASTRID erfordert die Berücksichtigung folgender zusätzlicher Rückwirkungsmechanismen:

- Ausdehnung der Kerngitterplatte,
- axiale Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr sowie
- Ausdehnung des Steuerelementantriebs.

Diese Rückwirkungsmechanismen werden mittels GCSM-Regler implementiert. Dazu werden zunächst die einzelnen Beiträge wie folgt berechnet:

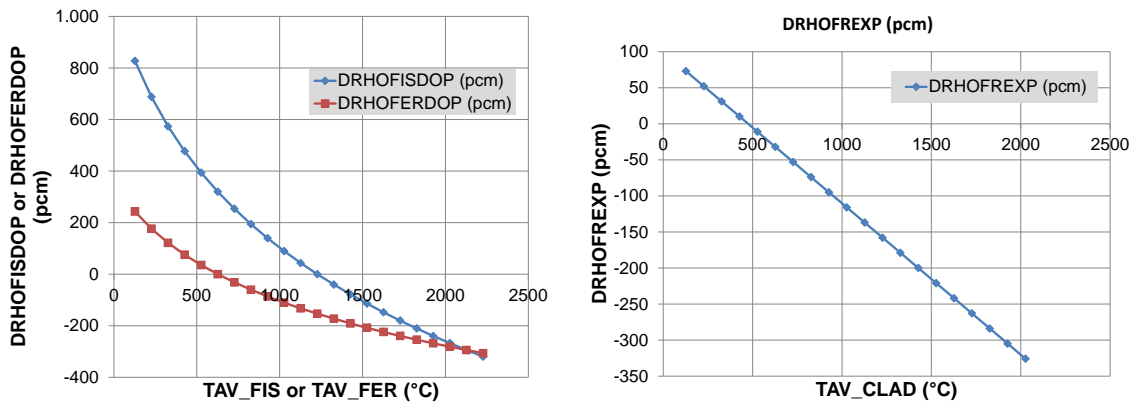
- *Ausdehnung der Kerngitterplatte:* Berechnung aus der aktuellen Temperatur der Kerngitterplatte und der spezifizierten Reaktivitäts-Rückwirkung, die nach der Temperatur tabelliert im ATHLET-Eingabedatensatz angegeben ist; Anwendung auf alle Stäbe gleichermaßen.

- *Axiale Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr*: Berechnung aus dem momentanen Mittelwert der Hüllrohr-Oberflächentemperatur. Dabei werden die Reaktivitäts-Rückwirkungen von Spalt- und Brutzone getrennt aus den Rückwirkungstabellen gemäß Spezifikation berechnet und die Reaktivitäts-Rückwirkungen den Spalt- und Brutzonen der Stäbe getrennt zugeordnet.
- *Ausdehnung des Steuerelementantriebs*: Berechnung aus der aktuellen Temperatur am Kernaustritt und der spezifizierten Reaktivitäts-Rückwirkung; Anwendung auf alle Stäbe gleichermaßen.

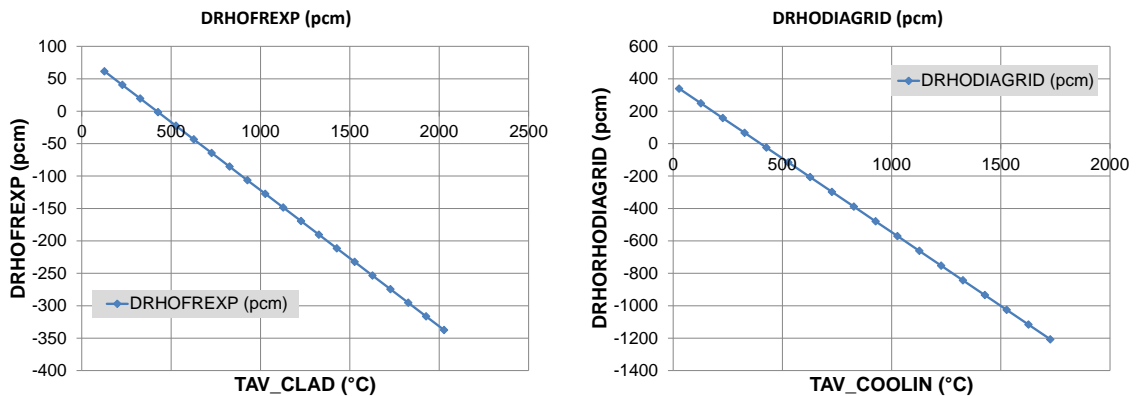
Diese Reaktivitätsrückwirkungsbeiträge werden addiert und als externes Reaktivitätssignal den Stabgruppen nach Spalt- und Brutzone separiert zugeordnet. Es sei erwähnt, dass für die Reaktivitätsrückwirkungen des ATHLET-Punktkinetikmodells (einschließlich den externen Reaktivitäten) am Ende der stationären Rechnung (und der Nulltransiente) jeweils eine Kompensation zu Null berechnet wird, so dass die eigentliche Transiente stets von einem Zustand mit Reaktivität Null startet. Der externe Reaktivitätsbeitrag wird in Summe zu Null kompensiert, nicht dessen einzelne Beiträge.

Die nachfolgenden Abbildungen zeigen die Reaktivitätsrückwirkungen als Funktionen der jeweiligen Temperaturen so, wie sie spezifikationsgemäß den Projektpartnern von ESNII+ Task 6.1.3 zur Verfügung gestellt und im ATHLET-Punktkinetikmodell verwendet wurden. Die Reaktivitätsrückwirkungen der Brennstofftemperatur und der simultanen axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr in der Spaltzone sind in Abb. 9.10 dargestellt. Abb. 9.11 gibt die Reaktivitätsrückwirkungen aus der simultanen axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr in der Brutzone und der Kerngitterplatenausdehnung wieder. Die Reaktivitätsrückwirkungen aus der Kühlmittelausdehnung und der Ausdehnung des Steuerelementantriebs sind schließlich in Abb. 9.12 gezeigt.

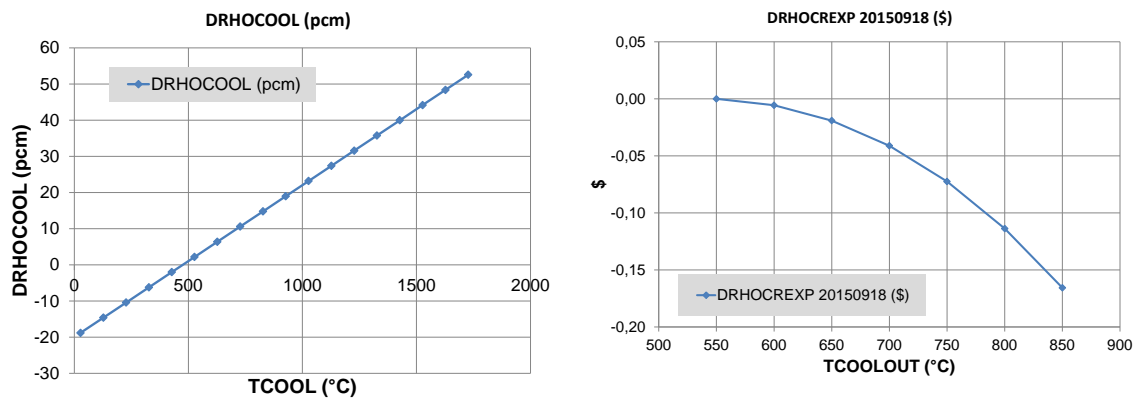




**Abb. 9.10** Links: Brennstofftemperatur-Doppler-Reaktivitäts-Rückwirkung für Spalt- (blau) und Brutzone (rot) als Funktionen der jeweiligen Temperatur. Man beachte die unterschiedlichen Bezugstemperaturen für Spalt- und Brutzone entsprechend den jeweils verschiedenen Nominaltemperaturen. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der axialen Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr (simultan) der Spaltzone.



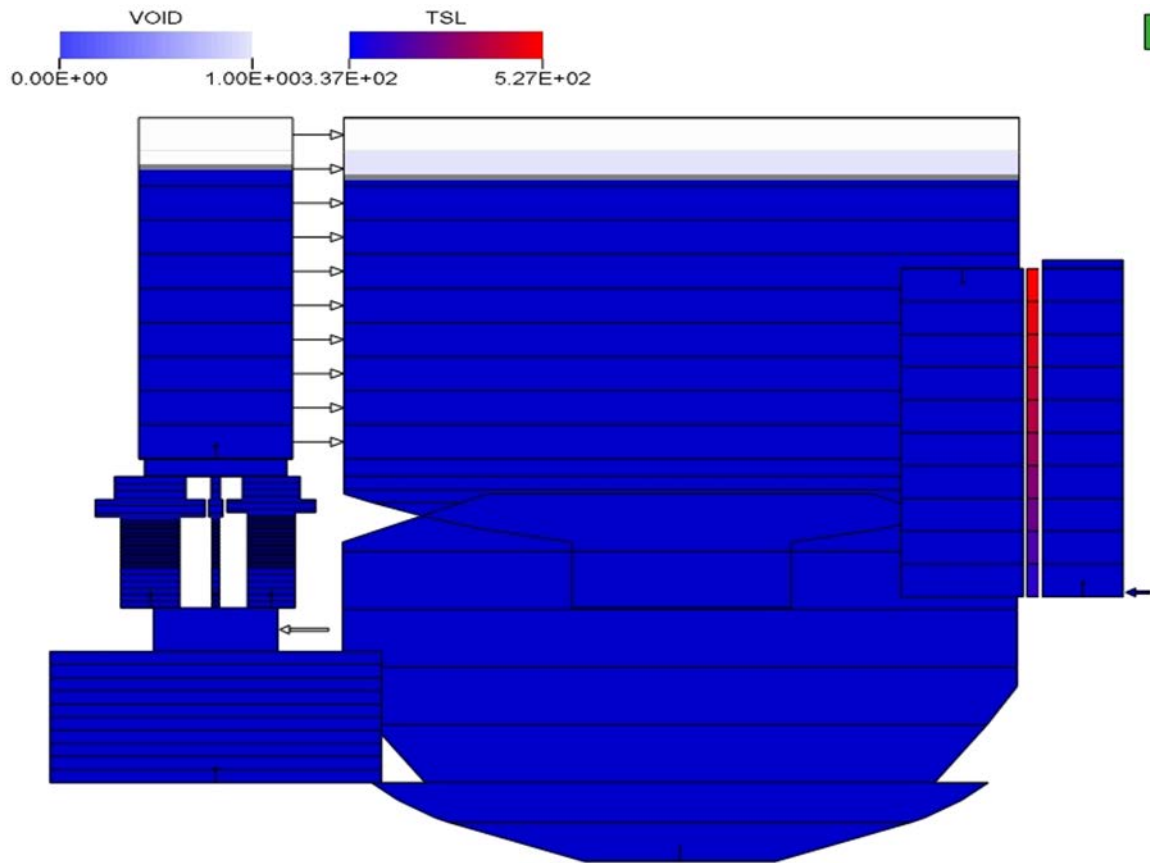
**Abb. 9.11** Links: Reaktivitätsrückwirkung aus der axialen Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr (simultan) der Brutzone. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der radialen Ausdehnung der Kerngitterplatte als Funktion der Kerneintrittstemperatur.



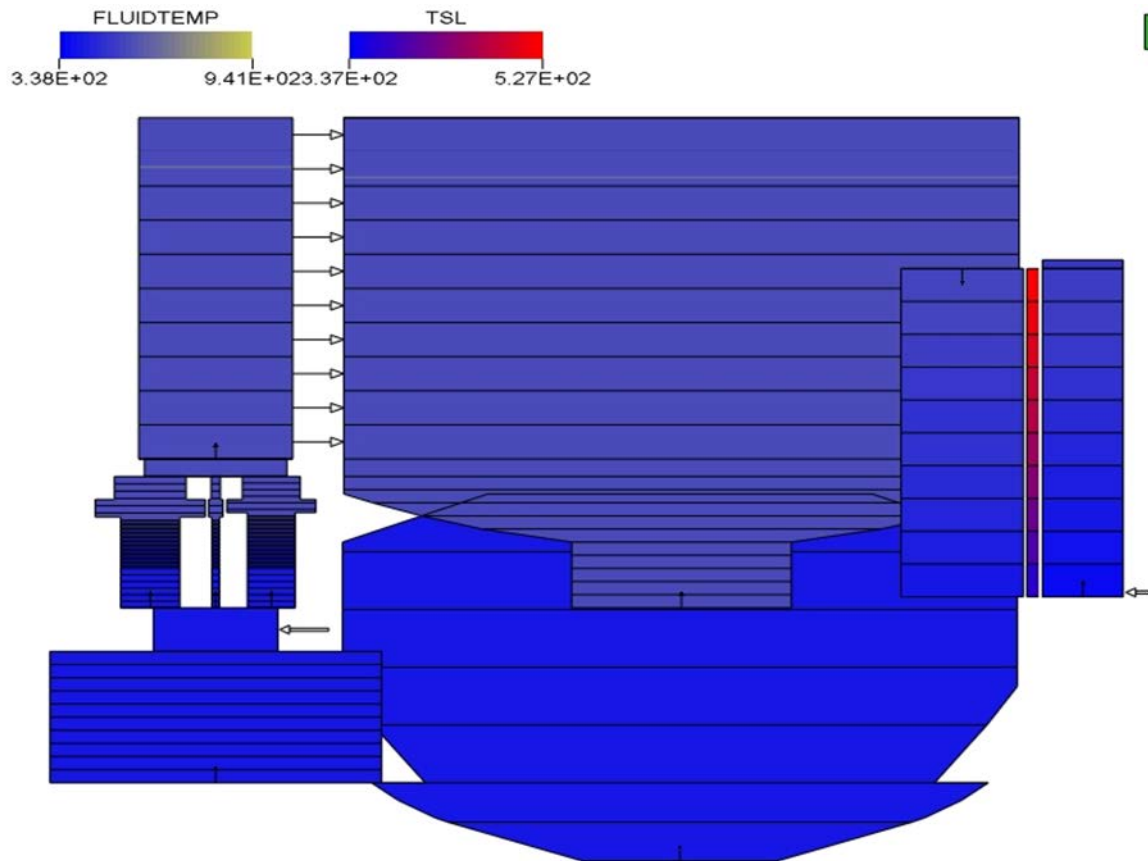
**Abb. 9.12** Links: Reaktivitätsrückwirkung aus der Kühlmittelausdehnung als Funktion der Kühlmitteltemperatur. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der Ausdehnung des Steuerelementantriebs als Funktion der Kernaustrittstemperatur.

### 9.1.2.2 Modellierung der Thermohydraulik des Kühlmittels

Die Nodalisierung des Reaktorbeckens ist in Abb. 6.56 dargestellt. In HOTPOOL und CNTRLPLUG wird ein Mischungsniveau (Mixture Level, ML) mit Argon als Polstergas definiert, siehe Abb. 9.13. Der Gasdruck wird mit ca. 1 bar angegeben. Aufgrund der komplexen stationären Strömungsverteilung (z. B. Querverbindungsobjekt CCO1 zwischen *Control Plug* und *Hot Pool*) wird die Simulation mit stagnierendem Kühlmittel auf der Primärseite bei gleichzeitiger Volllast gestartet. Sekundärseitig wird von nominalen Natrium-Strömungsbedingungen ausgegangen. Nach der stationären Rechnung, die alle thermohydraulischen Zustände des Kühlmittels sowie die Temperaturverteilungen in den Strukturkomponenten (Brennstäbe, Wärmetauscherrohre) initialisiert, wird anschließend eine Nulltransiente zwischen den Zeitpunkten  $-500$  s und  $0$  s gerechnet, und die Umwälzpumpe wird eingeschaltet. Dieser spezielle Simulationsmodus kombiniert eine reguläre transiente Simulation des thermohydraulischen Verhaltens des Kühlmittels und der Strukturmaterialien mit der stationären Betriebsart des Neutronenkinetikmodells, welches die nukleare Leistungserzeugung konstant hält und die Kompensationsterme für die Reaktivitätsrückwirkung berechnet, um später die eigentliche Transiente aus einem stationären Zustand mit verschwindender Reaktivität starten zu können. Abb. 9.14 zeigt die stationäre Verteilung der Kühlmitteltemperatur.



**Abb. 9.13** Von ATHLET berechnete Kühlmittelverteilung im stationären Ausgangszustand von ASTRID (inkl. HTX-Rohrtemperatur TSL).



**Abb. 9.14** Von ATHLET berechnete Temperaturverteilungen im Kühlmittel und HTX im stationären Ausgangszustand von ASTRID.

### 9.1.3 Simulation des Unprotected Loss Of Flow (ULOF) in ASTRID mit ATHLET

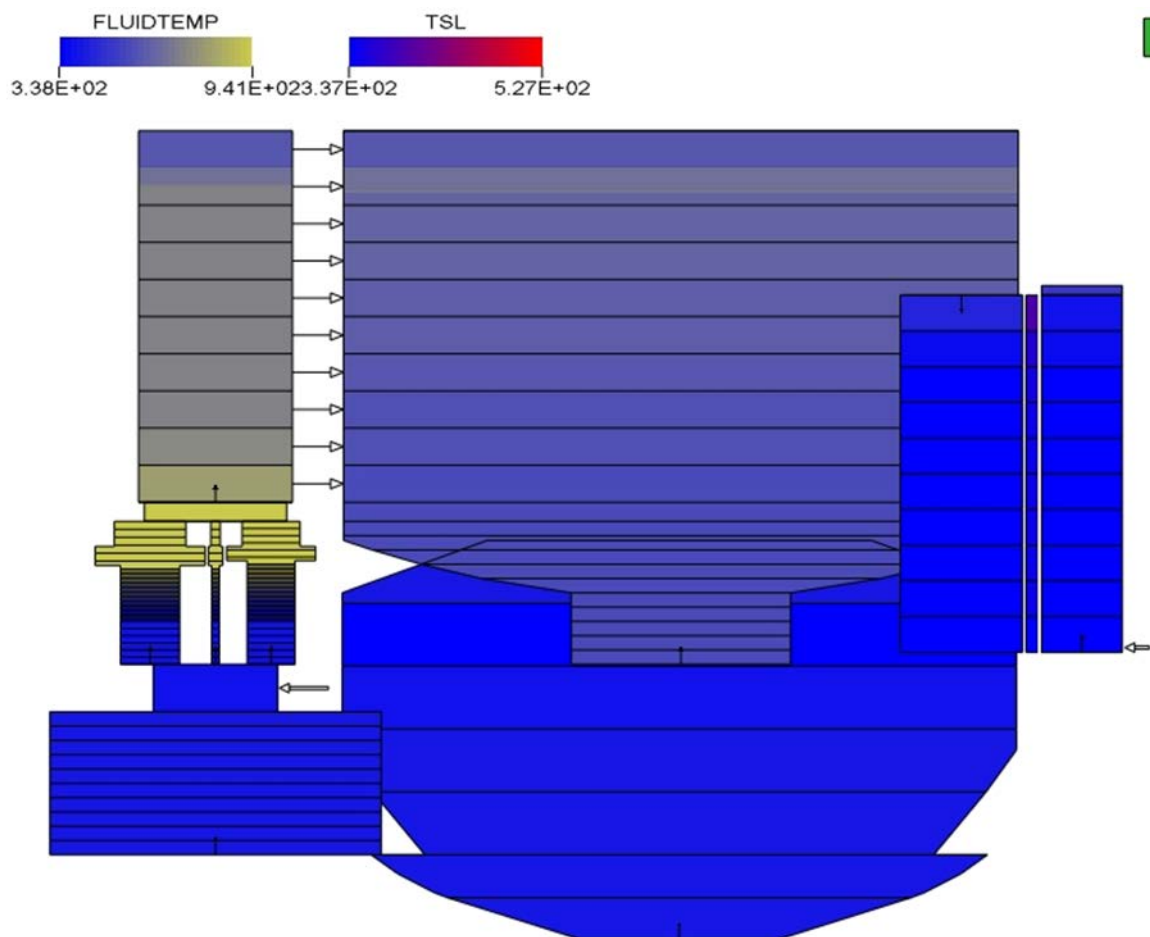
Zum Zeitpunkt  $t = 0$  s beginnt das Auslaufen der Pumpe. Die ESNII+-Spezifikation zu ASTRID gibt nur die zeitliche Entwicklung der Pumpendrehzahl an. Dies ist unbrauchbar, da keine Informationen zur Pumpencharakteristik vorliegen. Daher wurde eine spezielle Pumpensteuerung in ATHLET angewandt, die die zeitabhängige Pumpenförderrhöhe so berechnet, dass hiermit der geforderte Zeitverlauf des Kühlmittelmassenstroms erreicht wird. Die Angaben zur Pumpendrehzahl werden nicht genutzt. Der sekundärseitige Massen und die HTX-Eintrittstemperatur werden stets konstant gehalten.

Die ATHLET-Simulation wird beendet, sobald die Siedetemperatur von Natrium an irgendeiner Stelle im Simulationsmodell überschritten wird. Da die Siedetemperatur von Natrium eine Funktion des Druckes ist, ist es entscheidend, die Rechnung mit dem kor-

rekten primärseitigen Systemdruck zu starten und die Druckverteilung im Reaktorbecken genau zu berechnen. Die Drücke im stationären Zustand sind wie folgt:

Argon-Gas-Zone:	1,06 bar
Diagrid (Kerngitterplatte):	5,1 bar
Kernaustritt:	2 bar
Pumpenförderdruck:	3,5 bar

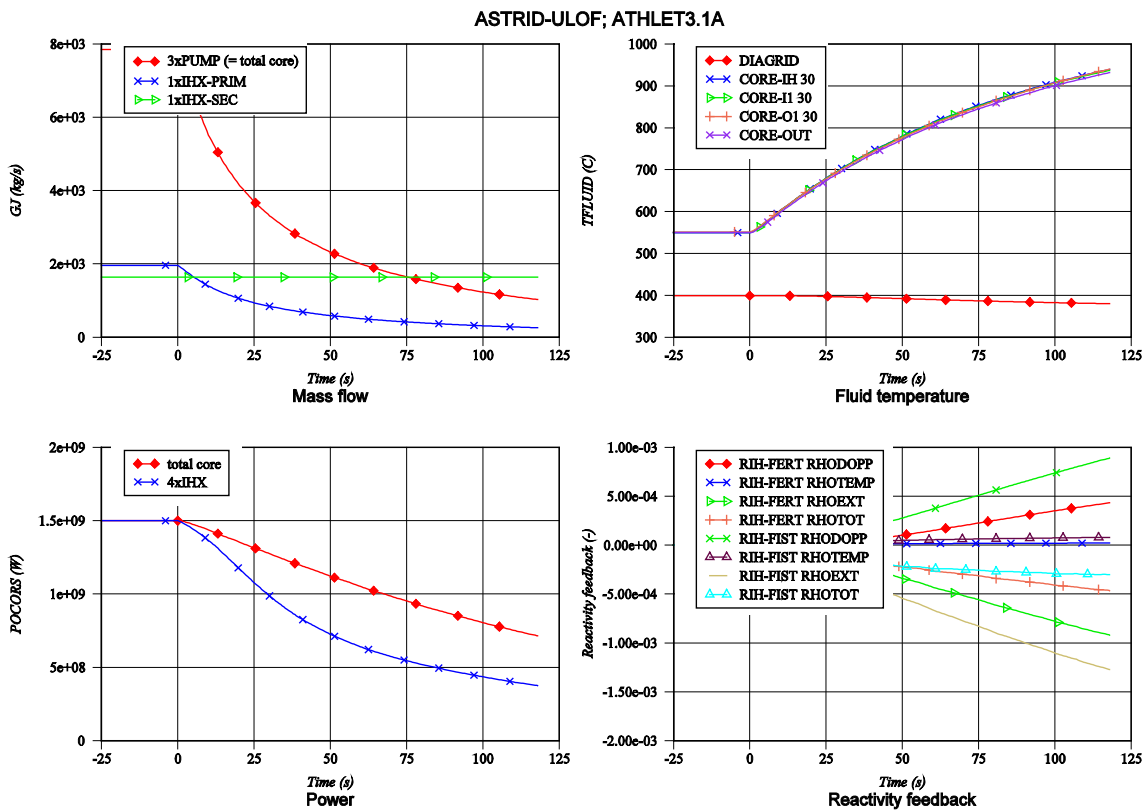
Während der Transiente steigt der Gasdruck geringfügig auf 1,2 bar (Aufheizung von Natrium und Argon), während – aufgrund des Pumpenauslaufens – der Druck am Kernaustritt auf etwa 1,7 bar sinkt. Die Sättigungstemperatur von Natrium beträgt bei 1,7 bar ca. 942 °C. Im ATHLET-Programmcode wurde die Sättigungstemperatur von 883 °C (bei 1,0 bar) auf 942 °C (bei 1,7 bar) geändert. Nach 118 s beginnt das Sieden im inneren Heißkanal. Die Temperaturverteilung zu diesem Zeitpunkt ist in Abb. 9.15 wiedergegeben.

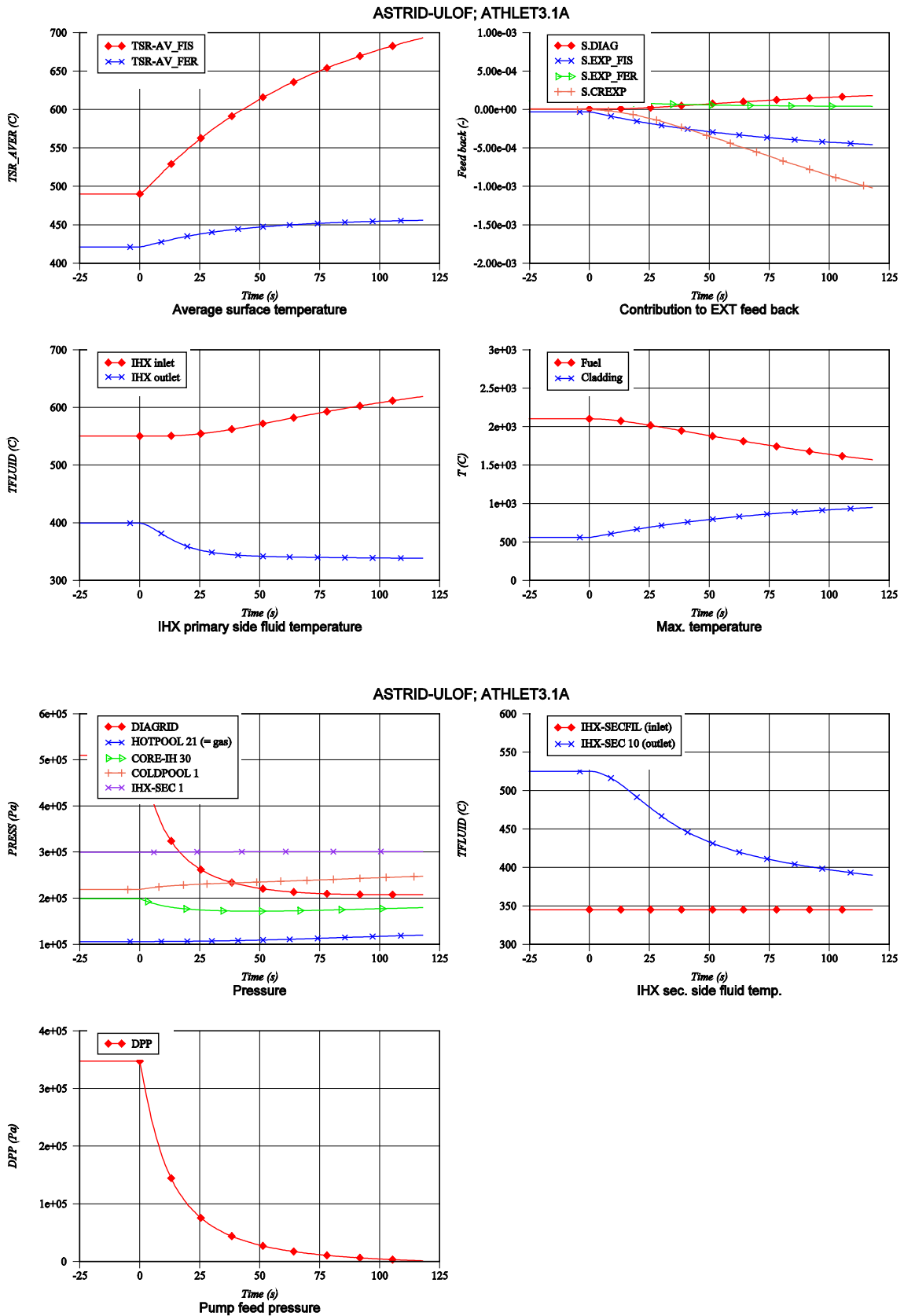


**Abb. 9.15** Von ATHLET berechnete Temperaturverteilungen im Kühlmittel und HTX von ASTRID am Ende der Transiente.

### 9.1.4 Zeitliche Verläufe wichtiger Kenngrößen der ATHLET-Simulation der ULOF-Transiente

Die nachfolgenden Diagramme zeigen die Zeitverläufe der wichtigsten physikalischen Größen während der ULOF-Transiente. Die Legenden enthalten i.d.R. die Namen der TFOs. Sofern sich daran ein Index anschließt, bezieht sich dieser auf die Indizierung im internen TFO-Netzwerk. CORE-IH 30 beispielsweise bedeutet das Kontrollvolumen Nr. 30 im TFO mit Namen CORE-IH (siehe Abb. 6.56).

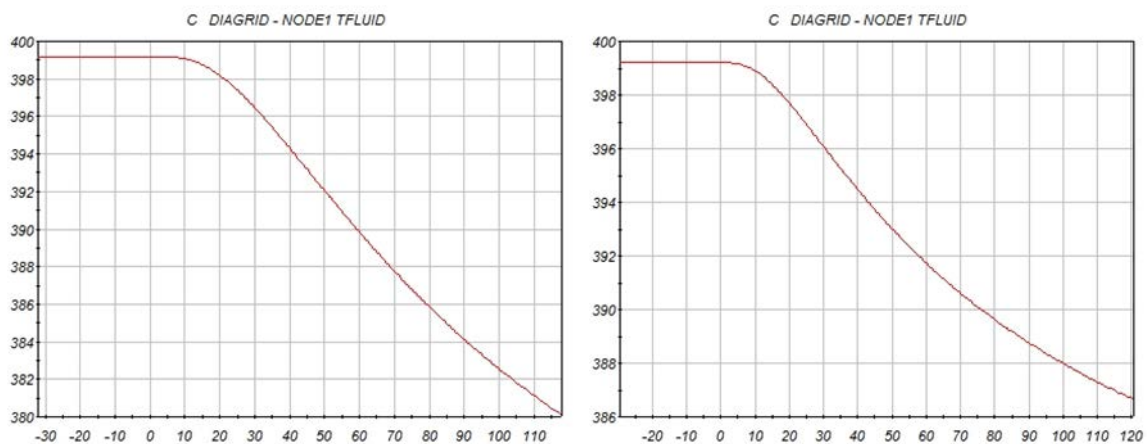




**Abb. 9.16** Zeitliche Verläufe wichtiger Kenngrößen der ATHLET-Simulation der ULOF-Transiente.

### 9.1.5 Anmerkungen zu den Besonderheiten der ATHLET-Simulation

Bei ATHLET handelt es sich bekanntlich um einen eindimensionalen *Lumped-Parameter*-Thermohydraulik-Code, bei dem die internen Strömungsverhältnisse mittels paralleler Kanäle modelliert werden können. Für das vorliegende einfache Simulationsmodell bedeutet dies, dass einige Komponenten des Modells an der Transiente nicht wirklich beteiligt sind, beispielsweise STRONGBACK sowie oberer und unterer Teil des COLDPOOLS. Lediglich die Kontrollvolumina des COLDPOOLS zwischen IHX-Austritt und PUMP-Eintritt weisen einen Kühlmittelstrom auf. Der Verlauf der DIAGRID-Temperatur (und damit der Kerneintrittstemperatur) hängt von der Vermischung des Kühlmittels am IHX-Austritt mit dem (wärmeren) Kühlmittel des COLDPOOL ab. In der Nodalisierung von Abb. 6-56 findet keine Mischung statt. Zum Nachweis dieses Effekts wurde eine weitere Simulation mit einem modifizierten Modell durchgeführt, in dem der COLDPOOL durch nur ein Kontrollvolumen dargestellt wird. Dies bedeutet vollständige Kühlmittel-Durchmischung. Wie erwartet, kühlt sich DIAGRID um 6 K weniger ab als zuvor und die Siedetemperatur von Natrium wird einige Sekunden später erreicht (siehe Abb. 9.17).



**Abb. 9.17** DIAGRID-Temperatur mit feiner (links) und grober (rechts) Nodalisierung des COLDPOOLS.



## 9.2 Das EU-Projekt MAXSIMA

Das belgische nukleare Forschungszentrum SCK'NEN in Mol beabsichtigt den Bau eines Forschungsreaktors mit der Bezeichnung Multi-purpose Hybrid Research Reactor for High-tech Applications (MYRRHA). Dieser Reaktor soll den alternden Multifunktions-Materialforschungs-Reaktor BR2 aus dem Jahr 1962 ersetzen. Der MYRRHA-Reaktor soll als ein "accelerator driven system (ADS)" konzipiert werden. Der typische Aufbau eines ADS besteht aus einem unterkritisch ausgelegten Reaktor mit einem zusätzlichen Beschleuniger. In einem unterkritisch ausgelegten Reaktor ist die Zahl der durch Kernspaltung erzeugten Neutronen nicht ausreichend für eine selbsterhaltende Kettenreaktion. Die Kettenreaktion eines ADS erfordert zusätzliche Neutronen, welche durch Beschuss eines Targets mit Protonen aus einem Beschleuniger und der hierdurch entstehenden zusätzlichen Neutronen aufrechterhalten wird.

Die GRS beteiligt sich am Workpackage WP2 (Safety Analysis in support of MYRRHA) von MAXSIMA, speziell zu Task 2.2 „Transient analyses using system codes“ mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem GRS-Programmsystem SUSA.

Im Rahmen der Phase 1 des Tasks 2.2 des MAXSIMA Projektes konzentrieren sich die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen des MYRRHA (Versionsentwurf 1.4) Designs hauptsächlich auf „Loss-of-flow“ Störfälle. Es wurden zwei Transienten, nämlich „Unprotected Loss of Flow“ (ULOF) und „Protected Loss of Flow“ (PLOF), gerechnet und analysiert.

Am Beginn der ULOF-Transiente werden alle primärseitigen Pumpen abgeschaltet. Für die Analyse wird hierzu unterstellt, dass das sekundäre Wärmeabfuhrsystem im erzwungenen Konvektionsmodus uneingeschränkt funktionstüchtig ist. Es wird zusätzlich das Versagen der Reaktorschnellabschaltung angenommen. Die Pumpenauslaufkurven der Hauptkühlmittelpumpen (oder entsprechenden primärseitigen Massenströme) sind mit RELAP5 von ENEA-Experten berechnet.

Für die PLOF Transiente werden zur Beginn ebenso alle primärseitigen Pumpen abgeschaltet. Das sekundäre Wärmeabfuhrsystem bleibt im erzwungenen Konvektionsmodus uneingeschränkt funktionstüchtig. Die Reaktorschnellabschaltungssystem ist intakt. Das erste RESA-Signal „Elektrische Leistung an den Hauptkühlmittelpumpen niedriger als 50% des nominalen Wertes“ bleibt unwirksam. Das zweite RESA-Signal „Brennelementtemperatur größer als 120 % des nominalen Wertes“ wird ausgelöst. In

diesem Fall wird das RESA-Signal nach 6 s ausgelöst und die Steuerstäbe werden nach 1 s Verzögerung eingeführt.

Es wurden insgesamt 14 potentiell wichtige unsichere Parameter identifiziert und quantifiziert. Die unsicheren Eingabe-Parameter sind in der Tab. 9.5 zusammengestellt.

**Tab. 9.5** Unsicheren Eingangs-Parameter für ULOF (grau) und PLOF Transienten.  
Die uniformen Verteilungen aller Eingangs-Größen sind angenommen

Parameter	Platzhalter	Einheit	Wert	Variation
Mittelwert für die Dicke des Hüllrohroxid-schichtes	#*01R	µm	5.0	± 2
Oxidschichtdicke des heissen Hüllrohres	#*02R	µm	10.0	± 2
Hüllrohroxidschicht-Wärmeleitfähigkeit	#*03R	W/(m*K)	1.0	± 10%
Spalt-Wärmeleitfähigkeit für Heißstab	#*04R	W/(m*K)	0.067	± 0.02
Spaltweite für Heißstab	#*05R	mm	0.012	± 8%
Brennstoff-Wärmeleitfähigkeit	#*06R	W/(m*K)	1.0	± 10%
Brennstoff-Wärmekapazität	#*07R	J/(m <sup>3</sup> *K)	1.0	± 10%
PHX Oxidschichtdicke von LBE Seite	#*08R	µm	40.0	± 2
PHX Oxidschichtdicke von Wasser Seite	#*09R	µm	10.0	± 2
PHX Oxidschicht-Wärmeleitfähigkeit	#*10R	W/(m*K)	1.0	± 10%
Formfaktor für Druckabfall am Kerneintritt	#*11R	-	1.0	± 20%
Sekundärdruck	#*12R	bar	16.0	± 1
RESA-Signal (Temperaturdifferenz)	#*13R	°C	168.0	± 5%
Steuerstabeinfahren-Zeitverzögerung	#*14R	s	1.0	0 ÷ 1

Auf der Basis der spezifizierten Verteilungen der 14 unsicheren Eingangsparameter wurde durch Zufallsauswahl ein Vektor von 100 Kombinationen der 14 Parameterwerte ausgespielt. Diese Werte wurden in die 100 Eingabe-Datensätze übernommen. Für den ULOF Transienten werden nur die ersten 12 Parameter betrachtet. Es sind insgesamt 100 Rechnungen durchgeführt worden.

Insgesamt wurden 17 zeitabhängige Ergebnisgrößen zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgewählt. Sie sind in der Tab. 9.6 aufgelistet.

**Tab. 9.6** Ausgewählte zeitabhängige Ergebnisgrößen

Parameter	Platzhalter	Einheit
Kernmassenstrom	#Out1	kg/s
Gesamtleistung	#Out2	MW
PHX LBE-Massenstrom	#Out3	kg/s
PHX Wasser-Massenstrom	#Out4	kg/s
PHX power	#Out5	MW
Kerneintrittstemperatur	#Out6	°C
Maximale Kühlmitteltemperatur im Kern	#Out7	°C
Temperatur im heißen Plenum	#Out8	°C
Temperatur im kalten Plenum	#Out9	°C
Maximale Brennstofftemperatur	#Out10	°C
Maximale Hüllrohrtemperatur	#Out11	°C
PHX LBE-Eintrittstemperatur	#Out12	°C
PHX LBE-Austrittstemperatur	#Out13	°C
PHX Wasser-Eintrittstemperatur	#Out14	°C
PHX Wasser-Austrittstemperatur	#Out15	°C
Druck im Dampftrommel	#Out16	bar
Gesamte Reaktivität	#Out17	pcm

Alle Projekt-Teilnehmer (ENEA, SCK-CEN, KIT) haben die Rechenläufe durchgeführt und die Ergebnisse wurden für die weitere Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse an die GRS übergeben.

Aus der Gesamtheit der errechneten alternativen Ergebnisse werden quantitative Aussagen zur Unsicherheit der Rechenergebnisse in Form statistischer Mittelwerte und Standardabweichungen zu vorzugebenden Werten des Wahrscheinlichkeitsgehalts ermittelt.

Zusätzlich werden Sensitivitätsmaße berechnet, aus denen die Rangfolge der Beiträge der einzelnen unsicheren Parameter zur Ergebnisunsicherheit ablesbar ist. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zeigen, welche der Eingangsunsicherheiten am meisten zur Ergebnisunsicherheit beitragen. Aufgetragen sind die Spearman-Rangkorrelationskoeffizienten (SRCC) als Sensitivitätsmaße. Positives Vorzeichen be-

deutet, dass Eingangs-Parameterwert und Ergebniswert tendenziell in die gleiche Richtung gehen, d. h. eine Vergrößerung des Eingangs-Parameterwertes bewirkt tendenziell eine Erhöhung des Ergebniswertes und umgekehrt. Bei negativem Vorzeichen gehen Eingangsparameterwert und Ergebniswert tendenziell in die entgegen gesetzte Richtung, eine Vergrößerung des Parameterwertes bewirkt tendenziell eine Verringerung des Ergebniswertes und umgekehrt. Je größer der Betrag des jeweiligen Maßes, desto bedeutsamer ist der Beitrag des Eingangsparameters zur Bandbreite des Ergebnisses. Signifikant ist ein Sensitivitätsmaß oberhalb einer Grenze, die durch das 99%-Quantil der Beta  $(1/2, (N-2)/2)$  – Verteilung gegeben ist, wobei N die Anzahl der Rechenläufe ist.

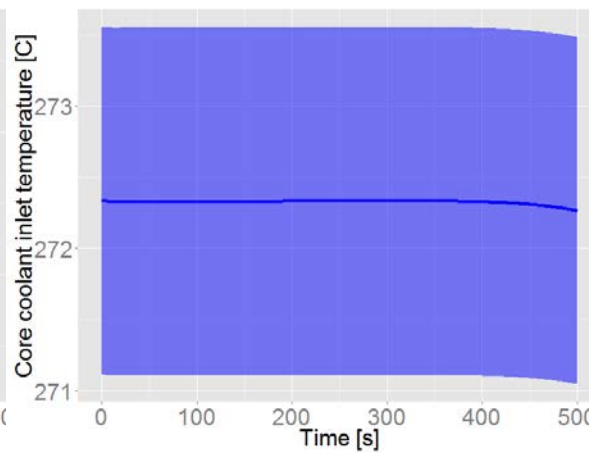
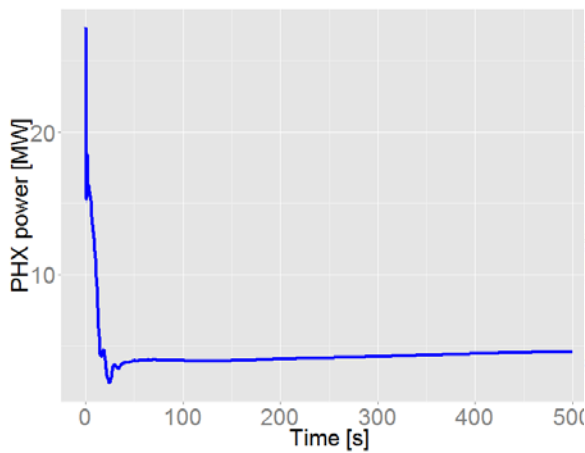
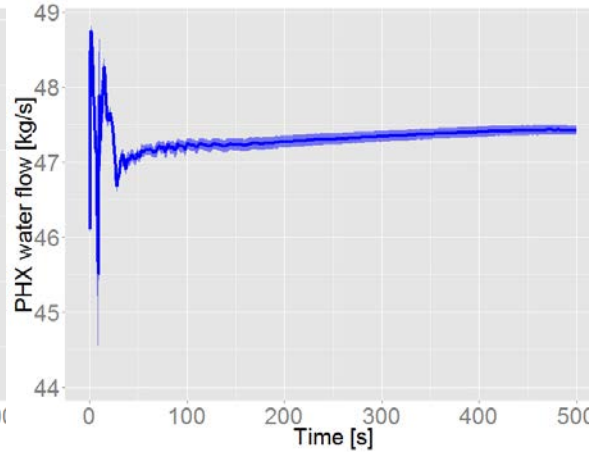
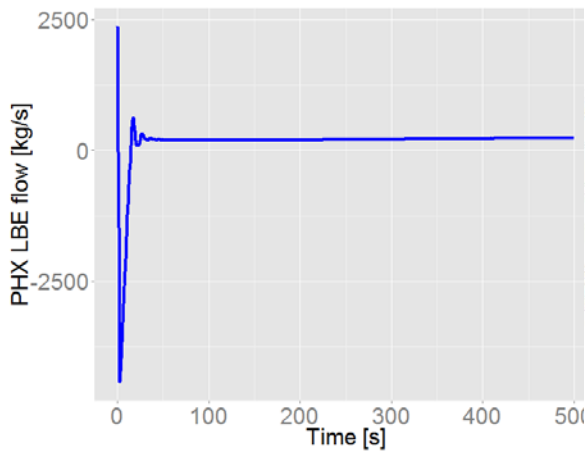
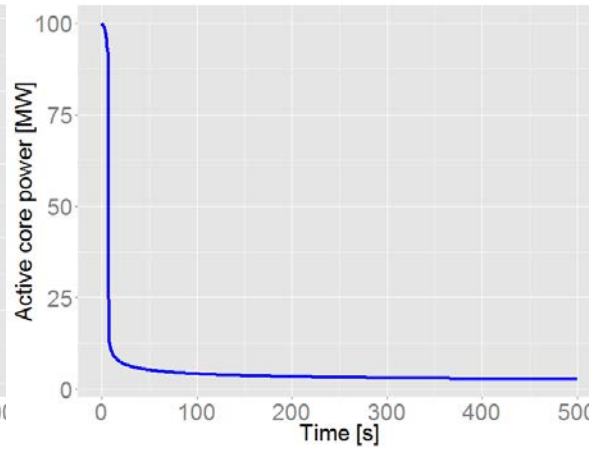
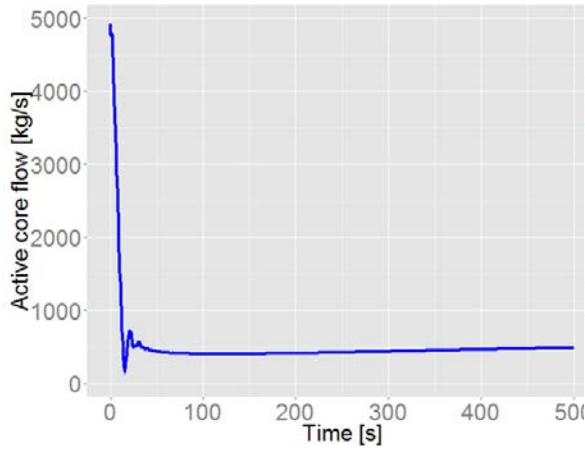
Als Beispiel der Unsicherheitsanalyse sind in Abb. 9-18 die berechneten zeitlichen Verläufe aller Ergebnisgröße in der PLOF-Transiente für ENEA-Berechnungen gezeigt. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für ENEA-PLOF Berechnungen zeigt Abb. 9-19. Alle Akronyme für Sensitivitätsgrößen sind in Tab. 9.7 vorgegeben.

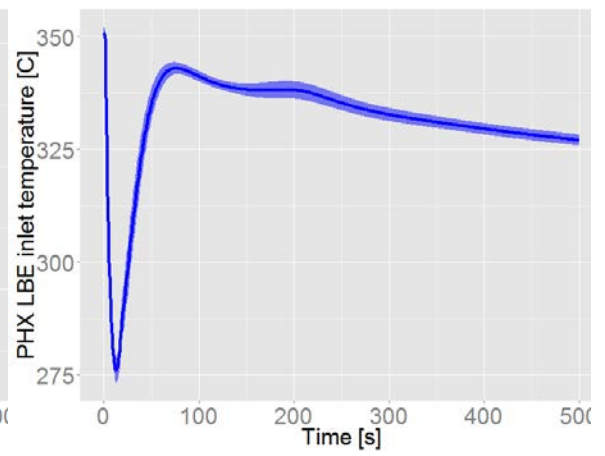
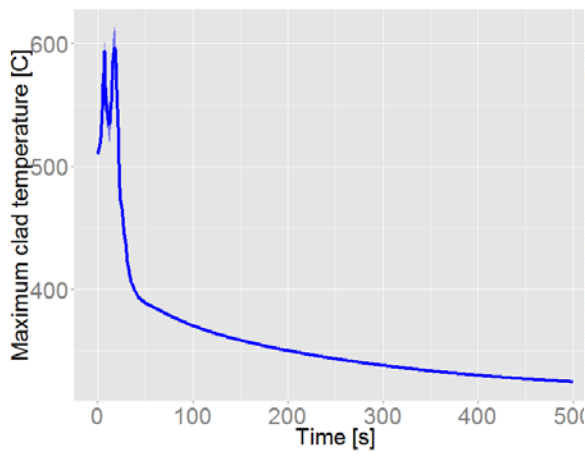
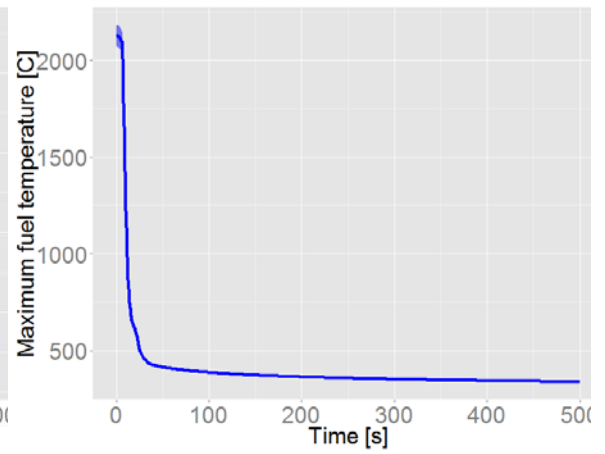
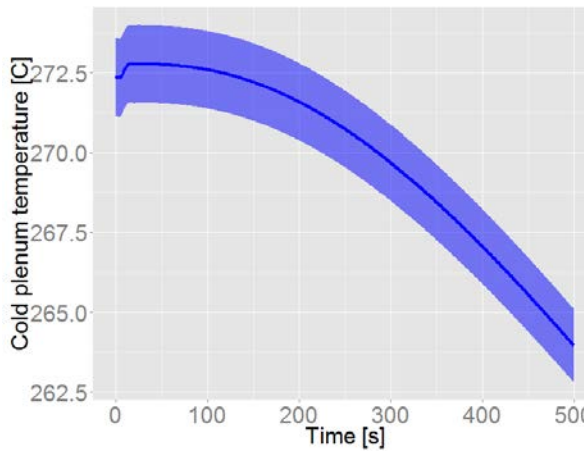
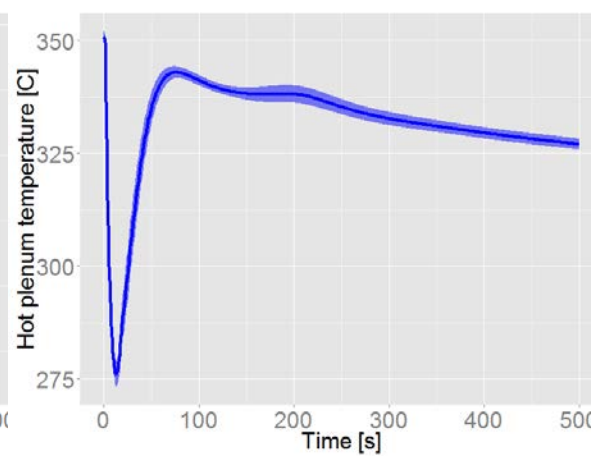
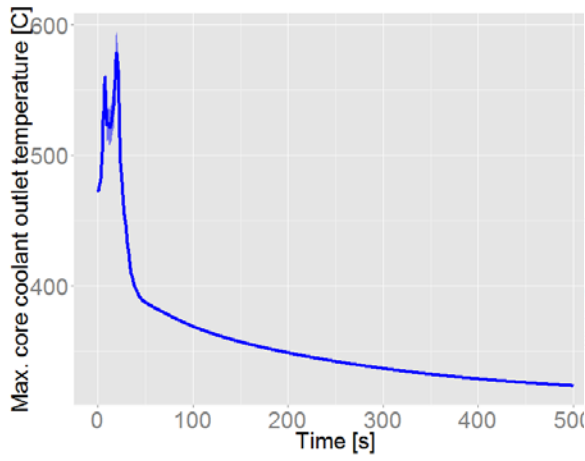
Für den PHX LBE-Massenstrom ist der Parameter "INLET\_PRESDROP", d.h. der Formfaktor für Druckabfall am Kerneintritt, der wichtigste Parameter. Der gleiche Parameter "INLET\_PRESDROP" bestimmt im Wesentlichen auch die gesamte Reaktivität. Die Parameter „SCRAM\_SETPOINT“ und „CR\_DELAY“ haben den größten Einfluss auf die Gesamtreaktivität und auf die Kernleistung. Die Variation des Sekundärdrucks (SEC\_PRESS) hat unmittelbar Einfluss auf alle Temperaturen in der Sekundärschleife und auf den Wärmetausch zwischen Primär- und Sekundärseite.

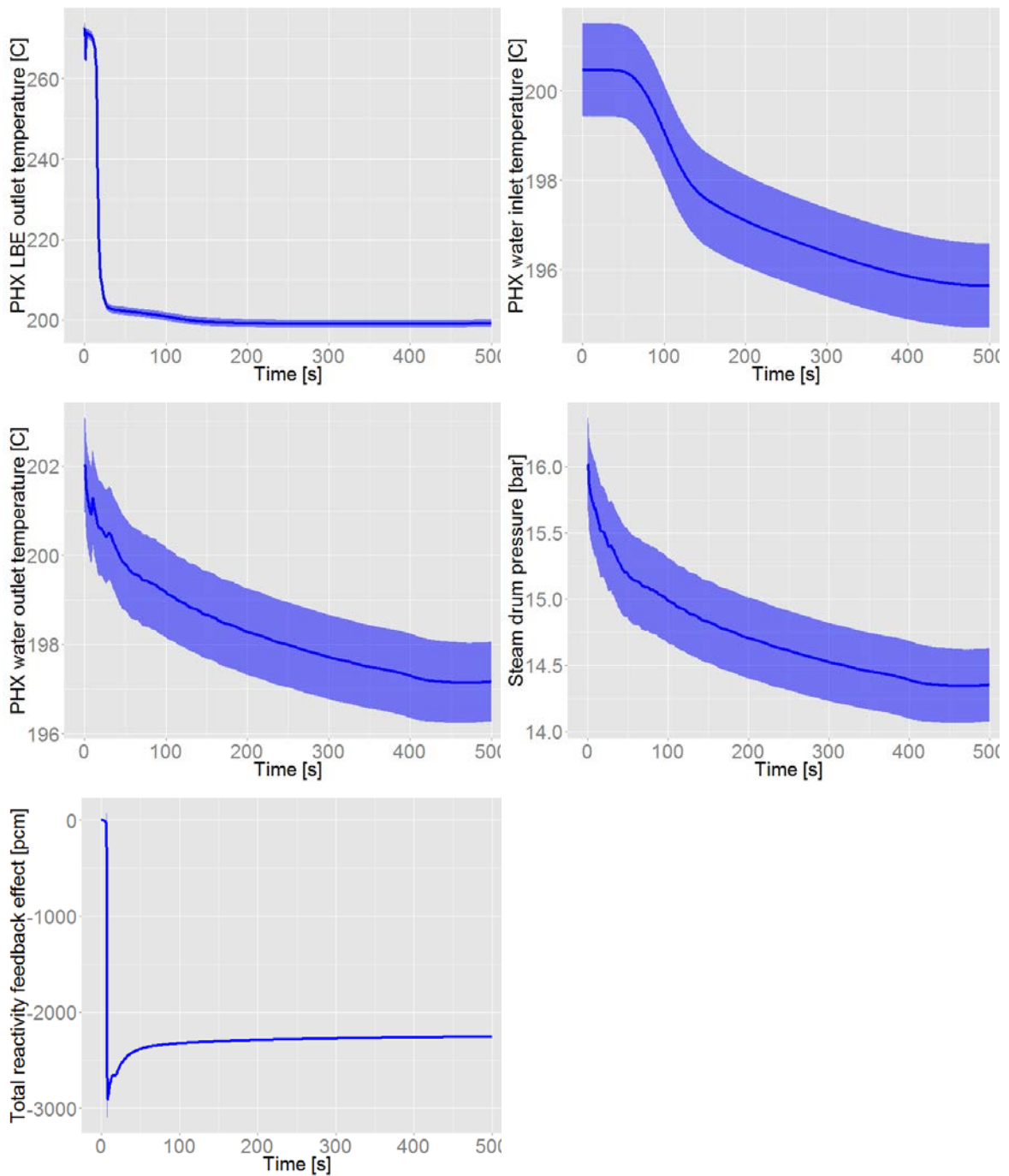
**Tab. 9.7** Akronyme der Eingangsparameter für die Darstellung der SRCC

Parameter	Akronym
Mittelwert für die Dicke des Hüllrohrtoxidschichtes	AVG_COLAYER
Oxidschichtdicke des heißen Hüllrohres	HOT_COLAYER
Hüllrohrtoxidschicht-Wärmeleitfähigkeit	COLAYER_CONDUCT
Spalt-Wärmeleitfähigkeit für Heißstab	PEAKPIN_GAP_CONDUCT
Spaltweite für Heißstab	PEAKPIN_GAP
Brennstoff-Wärmeleitfähigkeit	FUEL_CONDUCT
Brennstoff-Wärmekapazität	FUEL_HEATCAP
PHX Oxidschichtdicke von LBE Seite	PHXLBE_OLAYER
PHX Oxidschichtdicke von Wasser Seite	PHXWATER_OLAYER
PHX Oxidschicht-Wärmeleitfähigkeit	PHXOLAYER_CONDUCT

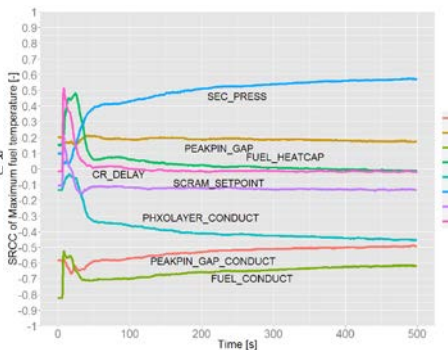
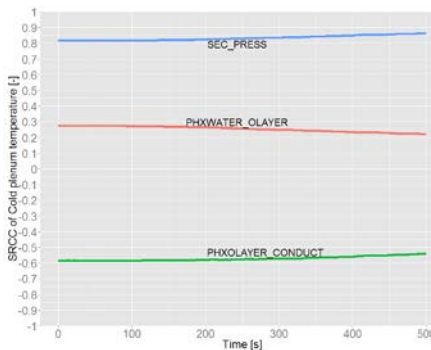
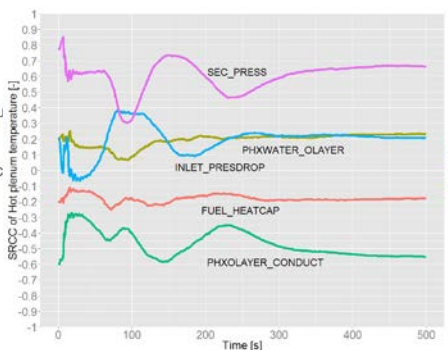
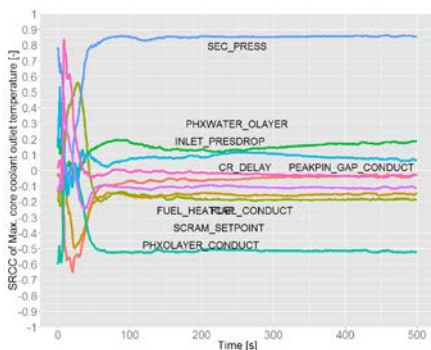
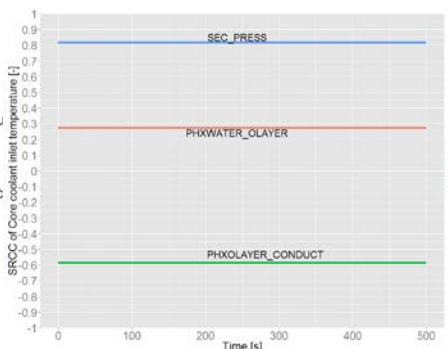
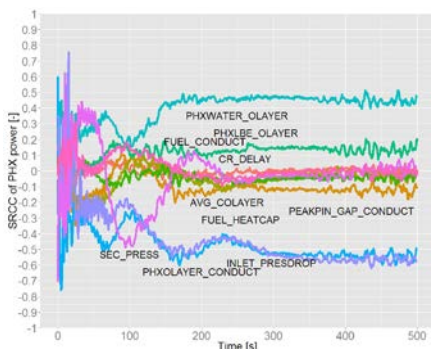
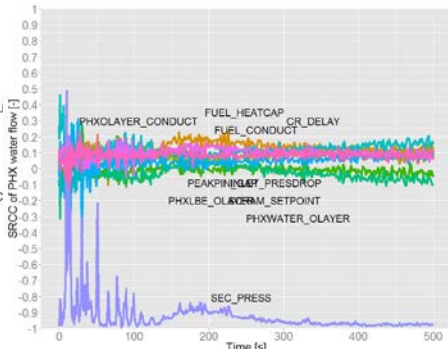
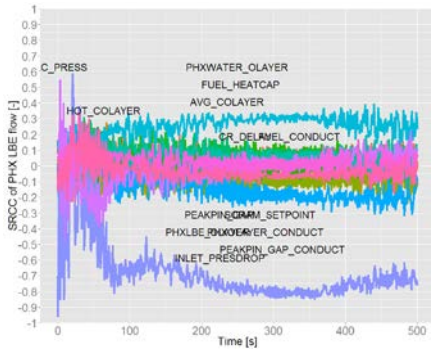
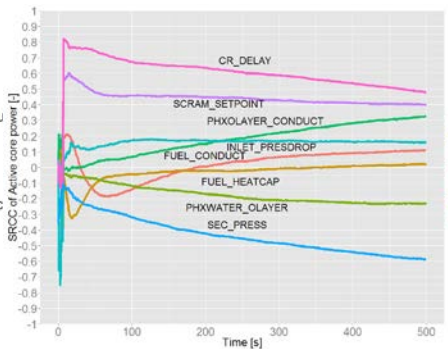
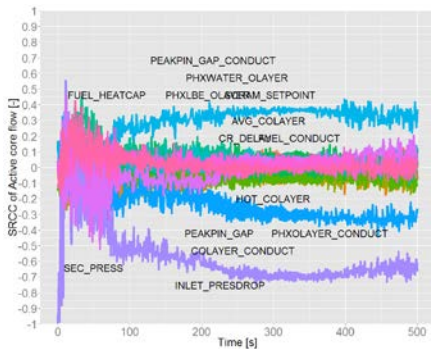
Parameter	Akronym
Formfaktor für Druckabfall am Kerneintritt	INLET_PRESDROP
Sekundärdruck	SEC_PRESS
RESA-Signal (Temperaturdifferenz)	SCRAM_SETPOINT
Steuerstabeinfahren-Zeitverzögerung	CR_DELAY



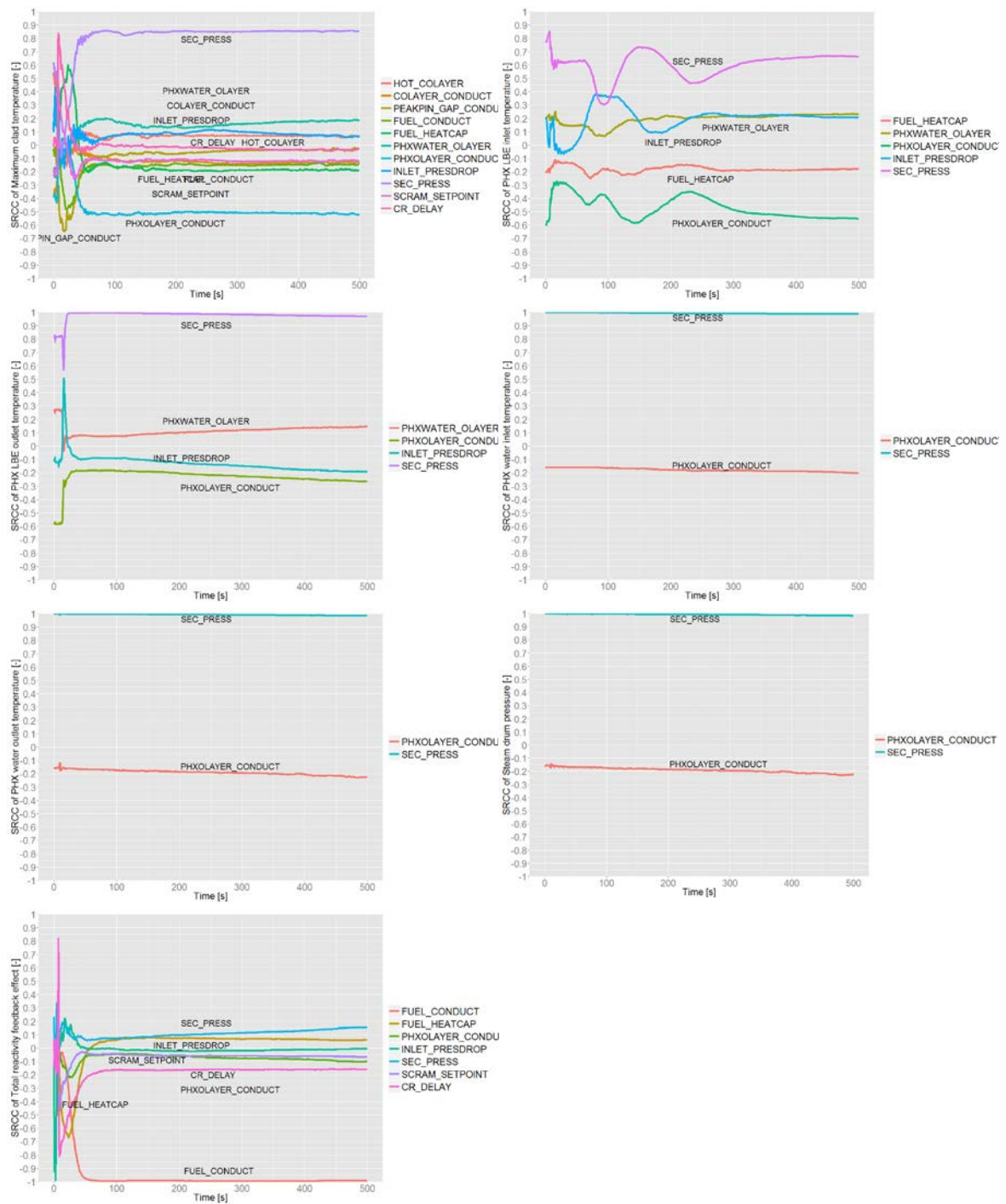




**Abb. 9.18** Berechnete zeitliche Verläufe in der ENEA-PLOF Transiente. Blaue Kurve - Mittelwert, blaues Band – Standardabweichung







**Abb. 9.19** Zeitliche Verläufe der Spearman's Rangkorrelationskoeffizienten in der ENEA-PLOF Transiente

## 10 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht beschreibt die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse zum BMWi-Forschungsvorhaben RS1515 „Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR“. Das Ziel der Arbeiten bestand in der Weiterentwicklung der Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung fortgeschrittener flüssigmetallgekühlter kritischer und unterkritischer Systeme mit externen Neutronenquellen sowie gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren (V/HTR) vom Kugelhaufen- und prismatischen bzw. Block-Typ. Dies umfasste die Weiterentwicklung sowohl der reaktorphysikalischen als auch der thermohydraulischen Rechenmethodik und deren Überprüfung bzw. Anwendung. Die Schwerpunkte der durchgeführten Arbeiten lagen in (a) der 3D-Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien und Modellierung von Spallationsquellen, (b) der Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für flüssigmetallgekühlte Systeme und (c) der Weiterentwicklung von Reaktorphysik und Thermohydraulik für gasgekühlte V/HTR. Darüber hinaus wurden die Arbeiten und Ergebnisse dokumentiert, die durch die Beteiligung an den beiden EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA durchgeführt und erzielt wurden.

### **Neutronenkinetik quellgetriebener unterkritischer Systeme mit komplexen Geometrien**

Wesentliche Ergebnisse dieses Arbeitspunktes sind die Weiterentwicklung von PARCS zur Simulation von Transienten mit zeitabhängigen externen Neutronenquellverteilungen und die detaillierte Überprüfung dieser Erweiterungen durch Vergleiche mit TORT-TD anhand eines OECD-Benchmarks. An PARCS wurden ferner programmtechnische Erweiterungen vorgenommen, die u.a. die Prozessierung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken im NEMTAB-Format und die Berechnung der axialen Leistungsverschiebung ermöglichen. Neben einer Auswertung von Ansätzen zur Modellierung von Spallationsquellen für deterministische Neutronenkinetikprogramme wurden MCNPX-Modelle entwickelt und getestet, anhand derer räumlich und energetisch aufgelöste Spallationsneutronen-Verteilungen berechnet werden können. Als Beispiel dient das LBE-Target von MYRRHA. Über das eigentliche Arbeitspaket hinaus wurden Modelle entwickelt und getestet, die eine Abbildung hexagonaler Kernanordnungen auf äquivalente cartesische und Zylinder-Koordinatensysteme herstellen. Dies ermöglicht den Einsatz von GRS-Rechenprogrammen wie QUABOX-CUBBOX und TORT-TD auf z. B. WWER bzw. schnelle flüssigmetallgekühlte Systeme.

## **Reaktorphysik flüssigmetallgekühlter Systeme**

Zur reaktorphysikalischen Modellierung thermo-struktureller Rückwirkungen, deren Reaktivitätsrückwirkungen bei flüssigmetallgekühlten Systemen relevant sind, wurden erste Modelle zur Simulation radialen Ausdehnung der Kerngitterplatte sowie zur axialen Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr entwickelt und getestet. Das erstgenannte Modell beruht auf eine Koordinatentransformation der Diffusionsgleichung, das andere Modell basiert auf Materialmischungen durch Wirkungsquerschnittsinterpolationen. Beide Modelle bilden das thermisch ausgedehnte System in der Nodalisierung des nicht ausgedehnten Zustands ab und ermöglichen so den Einsatz deterministischer 3D-Kernberechnungsprogramme wie PARCS, bei denen die räumliche Diskretisierung einmal festgelegt wird und nicht mehr geändert werden kann. Ferner wurde der in diesem Vorhaben erweiterte Code PARCS mit der aktuellen ATHLET-Version gekoppelt. Deterministische 3D-Kernberechnungen wurden sowohl für natriumgekühlte Systeme (mit metallischem und Oxid-Brennstoff) als auch für den Kern der geplanten Anlage MYRRHA durchgeführt. Zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten wurden neben den von LWR bekannten 2D-Spektralmodellen im unendlichen Gitter auch vollständige 3D-Monte-Carlo-Modelle mit Serpent entwickelt, die zugleich als Referenz für die deterministischen Kernberechnungen dienen. Es zeigt sich, dass mit 2D-Modellen nicht die Genauigkeit erzielt wird, die die Wirkungsquerschnitte aus den 3D-Modellen bieten. Für gekoppelte neutronenkinetisch-thermohydraulische transiente Kernberechnungen wurde am Beispiel des MYRRHA-Kerns eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek erstellt. In Verbindung mit dem ATHLET-Modell des MYRRHA-Kerns wurden mit PARCS/ATHLET Transientenrechnungen mit zeitlich variierenden externen Neutronenquellen durchgeführt.

## **Reaktorphysik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren**

Für die Simulation von V/HTR des Kugelhaufentyps einschließlich Primärkreis wurde das 3D-Codesystem TORT-TD/ATTICA3D für die gekoppelte neutronenkinetisch-thermohydraulische transiente Kernberechnungen durch Kopplung mit ATHLET erweitert. Dabei wird in ATHLET parallel zu ATTICA3D der Reaktorkern durch ein Parallelkanalmodell mit Querverbindungen dargestellt. Die Untersuchungen zur Erstellung konsistenten Wirkungsquerschnitte für den prismatischen V/HTR wurden mit HELIOS in Verbindung mit DRAGON4 im Rahmen der Teilnahme am OECD-Benchmarks zum MHTGR-350MW-Kerndesign durchgeführt. Dabei wurde zur

Behandlung der doppelten Heterogenität im TRISO-Brennstoff als auch in den Absorberstäben die Reactivity equivalent Physical Transform (RPT) angewandt. Mit einer RPT-Vorausrechnung mit DRAGON4 können Wirkungsquerschnitte prismatischer V/HTR in Supercell-Geometrie mit HELIOS berechnet werden. 3D-Kernberechnungen wurden ebenfalls im Rahmen des OECD-Benchmarks zum MHTGR-350MW-Kerndesign u.a. mit DYN3D durchgeführt. Ferner wurde auf Basis der im Rahmen des LOFC-Projekts vorhandenen Daten ein Monte-Carlo-Modell des HTTR mit Serpent2 erstellt und durch Homogenisierung und Kondensation Wirkungsquerschnitte in 26 Energiegruppen generiert, mit denen ein deterministisches 3D-Kernmodell entwickelt wurde.

### **Thermohydraulik flüssigmetallgekühlter Systeme**

Die Arbeiten zur Thermohydraulik flüssigmetallgekühlter Systeme betreffen zunächst die weitere Ertüchtigung des Codes ATHLET für die Simulation von Transienten in flüssigmetallgekühlten Reaktoren. ATHLET wurde so erweitert, dass Natrium beim Überschreiten der nun druckabhängigen Sättigungstemperatur verdampfen kann. Dazu wurden Korrelationen zur Berechnung der erforderlichen Stoffwerte implementiert sowie. Des Weiteren wurden die entsprechenden Programmteile dahingehend modifiziert, dass Natrium hinsichtlich der Zweiphasenströmung nicht mehr wie Flüssigmetall sondern weitgehend wie Wasser behandelt wird. Für die Modellierung der Zweiphasenströmung werden ausnahmslos die in ATHLET vorhandenen Modelle für Wasser verwendet, lediglich die dabei eingesetzten Stoffgrößen stammen von Natrium. Die Abauffähigkeit der Programmweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse wurden an Hand einfacher Testfälle überprüft. Die weiteren Schwerpunkte in diesem Arbeitspaket sind die Anwendung des CFD-Codes OpenFOAM zur Simulation einzelner Komponenten und spezieller Phänomene in flüssigmetallgekühlten Anlagen sowie die Bereitstellung einer gekoppelten Version ATHLET OpenFOAM für Sicherheitsanalysen vollständiger Reaktorsysteme. Die OpenFOAM-Kompetenz der GRS konnte durch die Arbeiten in diesem Projekt vertieft werden. Dies zeigt sich z. B. darin, dass jetzt auch Rechnungen auf einem nicht-idealen Rechengitter möglich waren, die zuvor noch nicht möglich waren. Für einphasige Strömungen liefert OpenFOAM mittlerweile vergleichbare Ergebnisse wie kommerzielle CFD-Codes. Die Kopplungsmöglichkeit von ATHLET mit CFD-Codes wurde auf eine Kopplung mit OpenFOAM erweitert. Sie wurde mit qualitativ guten Ergebnissen am Beispiel eines Experiments an der TALL-Versuchsanlage validiert. Für ausgewählte flüssigmetallgekühlte Systeme wurden fer-

ner ATHLET-Modelle erstellt. Die Arbeiten konzentrieren sich auf flüssigmetallgekühlte aktueller europäischen Projekte (ASTRID, MYRRHA) für flüssigmetallgekühlte kritische und unterkritische Systeme mit Natrium- bzw. Blei-Wismut-(LBE-)Kühlung.

### **Thermohydraulik gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren**

Ein Schwerpunkt dieses Arbeitspakets ist die Entwicklung geeigneter thermohydraulischer Modelle zur Simulation des Reaktorkerns von V/HTR mit dem Systemcode ATHLET und damit verbundene Weiterentwicklungen von ATHLET. Dabei wurde sowohl der Kugelhaufen- als auch der prismatische Typ betrachtet, wobei die Herausforderungen u.a. in den mehrdimensionale Wärmetransportprozessen besteht. Für den prismatischen V/HTR wurde ein äquivalentes ATHLET-Modell für die Wärmeleitung im Graphitblock entwickelt und durch Beteiligung am laufenden OECD-Benchmark zum MHTGR-350MW-Kerndesign durch Vergleich mit anderen Rechencodes überprüft. Zur Kern- und Primärkreissimulation mit ATHLET wurde ein Primärkreismodell u. a. mit Gasturbine und Kompressor entwickelt. Als Grundlage wurde das PBMR-400-Kerndesign herangezogen.

### **Weiterverfolgung des superkritischen LWR und anderer Generation-IV-Konzepte sowie Small Modular Reactors**

Zur Simulation überkritischer LWR wurde zunächst die Stoffwertberechnung in ATHLET in der Umgebung des kritischen Punktes verbessert. Bei ATHLET-Simulation, die die Umgebung des kritischen Punktes durchlaufen, zeigten die Ergebnisse ein verstärkt oszillatorisches Verhalten. Als Ursache dafür gilt der weite Übergangsbereich (22.0 bis 22.5 MPa) die Stoffwertverläufe über Druck und Temperatur zwischen unter- und überkritischem Wasser, der im Vergleich mit der Realität deutlich abflacht und dort die Konsistenz von Stammfunktion und partieller Ableitung verringert. Mit den durchgeführten Arbeiten wurde nun die Stoffwertberechnung näher an die Realität herangeführt. Der wesentliche Unterschied besteht darin, den Einsatzbereich des überkritischen Stoffwertpakets bis nahe an den kritischen Druck auszudehnen und den Übergangsbereich auf jetzt 21.9 bis 22.12 MPa zu verringern und in Richtung unterkritisch zu verschieben. In ATHLET wurde ferner die Korrelation nach Philippeoneau /PHI92/ implementiert, die die Wärmeleitfähigkeit von MOX-Brennstoff als Funktion der Temperatur und des Abbrands berechnet. Bei Reaktoren der Generation IV sind Reaktivitätsrückwirkungen zu modellieren, die im LWR keine Bedeutung haben, etwa thermisch bedingte Strukturrückwirkungen. Um die erforderlichen thermohydraulischen

schen Daten (etwa Hüllrohrtemperatur) abgreifen zu können, wurde ein neues GCSM-Prozesssignal definiert, das für den gesamten Kern oder Teile davon die mittlere Hüllrohroberflächentemperatur gewichtet bestimmt.

### **Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA**

Das letzte Kapitel dieses Berichts dokumentiert die im Rahmen der Beteiligung an zwei EU-Projekten durchgeführten Arbeiten. Im EU-Vorhaben ESNII+ ist die GRS im Workpackage 6 (Core Safety) an der Task 6.1 (Core safety calculations for the ESNII reactors) beteiligt und bearbeitet darin die Subtasks 6.1.2 (ASTRID core safety coefficients) und 6.1.3 (ASTRID core behaviour under design-basis accident conditions). Es werden die Modellentwicklungen zu ASTRID ausgehend von der Reaktorphysik der Wirkungsquerschnittserzeugung über stationäre 3D-Kernberechnungen bis zur thermohydraulischen ATHLET-Modellierung und Simulation der ULOF-Transiente beschrieben. Die GRS beteiligt sich am Workpackage WP2 (Safety Analysis in support of MYRRHA) von MAXSIMA, speziell zu Task 2.2 „Transient analyses using system codes“ mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem GRS-Programmsystem SUSA. Im Rahmen der Phase 1 der Tasks 2.2 des MAXSIMA Projektes konzentrieren sich die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen des MYRRHA-Designs (Versionsentwurf 1.4) hauptsächlich auf „Loss-of-flow“ Störfälle. Es wurden zwei Transienten, nämlich „Unprotected Loss of Flow“ (ULOF) und „Protected Loss of Flow“ (PLOF), gerechnet und analysiert. Es wurden insgesamt 14 potentiell wichtige unsichere Parameter identifiziert und quantifiziert. Die Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen werden im Detail beschrieben.



## Literaturverzeichnis

- /AGO03/ S. Agostinelli et al., GEANT4 – a simulation toolkit, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 506 (2003) 250-303.
- /ARG95/ J. K. Fink, L. Leibowitz, Thermodynamic and Transport Properties of Sodium Liquid and Vapor, Reactor Engineering Division, Argonne National Laboratory, ANL/RE-95/2; January 1995.
- /AUS13/ H. Austregesilo et al., „Validierung von Rechenprogrammen zur Simulation von Stör- und Unfällen im Reaktorkühlsystem“, GRS-A-3706, Juli 2013
- /BLA11/ D. Blanchet, L. Buiron, N. Stauff, T. K. Kim, T. Taiwo, Sodium Fast Reactor Core Definitions, September 2011;  
<http://www.oecd-nea.org/science/wprs/sfr-taskforce>.
- /BRO92/ C.H.M. Broeders, Entwicklungsarbeiten für die neutronenphysikalische Auslegung von Fortschrittlichen Druckwasserreaktoren (FDWR) mit kompakten Dreiecksgittern in hexagonalen Brennelementen, KFK-5072, August 1992.
- /CAH94/ J. E. Cahalan et al., Advanced LMR Safety Analysis Capabilities in the SASSYS-1 and SAS4A Computer Codes, Proceedings of the International Topical Meeting on Advanced Reactors Safety, Pittsburgh, PA, April 17-21, American Nuclear Society, 1994.
- /CAH00/ J. E. Cahalan, T. Ama, G. Palmiotti, T. A. Taiwo, W. S. Yang, Development of a Coupled Dynamics Code with Transport Theory Capability and Application to Accelerator-Driven Systems Transients, Physor 2000, Pittsburgh, PA, USA, May 7-11.
- /CAS92/ J. J. Casal, R. J. J. Stamm'ler, E. A. Villarino, A. A. Ferri, HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-Assembly Program, Proc. Int. Top. Mtg. Adv. Math. Comp. React. Phys., Pittsburg, PA, USA, Vol. II, Sect. 10.2.1, 1-13 (1992).



- /CHO01/ Jin Young Cho, Han Gyu Joo, Byung-Oh Cho, Sung Quun Zee, Hexagonal CMFD Formulation Employing Triangle-Based Polynomial Expansion Nodal Kernel, M&C 2001 Salt Lake City, Utah, USA, September 2001.
- /COD89/ J. D. Cox, D. D. Wagman, and V. A. Medvedev, CODATA Key Values for Thermodynamics, Hemisphere Publishing Corp., New York (1989).
- /COL70/ W. A. Coleman, T. W. Armstrong, The Nucleon-Meson Transport Code NMTC, ORNL Report 4606 (1970).
- /COM01/ M. Cometto, B.-C. Na, P. Wydler, Comparison Calculations for an Accelerator-driven Minor Actinide Burner, NEA/NSC/DOC(2001)13.
- /DAG02/ R. Dagan, C. H. M. Broeders, D. Struwe, W. Pfrang, SAS4ADS- 3D Space Time Dynamic Code System for ADS, Jahrestagung Kerntechnik 2002, Stuttgart.
- /DUP14/ M. Duponcheel et al., “Assessment of RANS and improved near-wall modeling for forced convection at low Prandtl numbers based on LES up to  $Re_{\tau} = 2000$ ”, International Journal of Heat and Mass Transfer 75, pp. 470–482, 2014.
- /ESN13/ ESNII+ – Preparing ESNII for HORIZON 2020, FP7-Fission-2013.
- /FER05/ A. Ferrari et al., FLUKA: a multi-particle transport code (program version 2005), CERN 2005-10 (2005), INFN/ TC 05/11, SLAC-R-773.
- /FOW71/ T.B. Fowler et.al., Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION, ORNL-TM2496, Rev.2, 1971.
- /FRI13/ E. Fridman, E. Shwageraus, Modeling of SFR cores with Serpent–DYN3D codes sequence, Annals of Nuclear Energy 53 (2013) 354–363.
- /FUR13/ S. Furuhashi, <http://msgpack.org/>

- /FZR03/ G. Grunwald, T. Höhne, S. Kliem, H.-M. Prasser, U. Rohde, Forschungs- und Entwicklungsvorhaben des SA "Anlagentechnik" - "Experimentelle Untersuchung der Kühlmittelvermischung unter den Bedingungen wiederanlaufenden Naturumlaufes", VGB-Kennziffer: SA "AT" 29/01.
- /GIE80/ P. Gierszewski, B. Mikic, N. Todreas, Property Correlations for Lithium, Sodium, Helium, FLIBE and Water, Fusion Blanket and Structure Group, MIT, PFC-RR-80-12, August 1980.
- /GLA12/ H. Glaeser et al., Thermohydraulische Rechenmethoden zu Transienten und Störfällen im Reaktorkühlkreislauf unter besonderer Berücksichtigung mehr-dimensionaler Strömungen (ATHLET, FLUBOX, CFX), GRS-A-3644, Februar 2012
- /GRI15/ D. Grishchenko et al., "The TALL-3D facility design and commissioning tests for validation of coupled STH and CFD codes", Nuclear Engineering and Design 290, pp. 144–153, 2015
- /GRU00/ Grundmann, U., Rohde, U., Mittag, S., DYN3D – three-dimensional core model for steady-state and transient analysis of thermal reactors. In: Proc. PHYSOR 2000, Pittsburgh, Pennsylvania, USA.
- /GUE15/ J. Guerrero, A crash introduction to turbulence modelling in OpenFOAM®, Introductory OpenFOAM® Course, University of Genoa, From 13th to 17th July, 2015
- /HEB08/ A. Hébert, A Raviart-Thomas-Schneider solution of the diffusion equation in hexagonal geometry, Ann. Nucl. Energy 35 (2008) 363.
- /HEB87/ A. Hébert, TRIVAC, a Modular Diffusion Code for Fuel Management and Design Applications, Nucl. J. of Canada, 1 No. 4 (1987) 325.
- /HEJ13/ J. Herb, CFD simulations of the PKL-ROCOM experiments with ANSYS CFX, The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal - Hydraulics, NURETH-15, NURETH15-237, 2013

- /HTT11/ Report 1.2 - HTTR Description & data for LOFC analyses, LOFC Project - PRG/MB Information Website, <https://www.oecd-nea.org/download/lofc/>
- /IAE03/ International Atomic Energy Agency, Evaluation of high temperature gas cooled reactor performance: Benchmark analysis related to initial testing of the HTTR and HTR-10, IAEA-TECDOC-1382, November 2003.
- /IAE13/ International Atomic Energy Agency, Evaluation of High Temperature Gas Cooled Reactor Performance: Benchmark Analysis Related to the PBMR-400, PBMM, GT-MHR, HTR-10 and the ASTRA Critical Facility, IAEA-TECDOC-1694, Vienna, 2013.
- /IAP97/ W. Wagner, A. Kruse, "The Industrial Standard IAPWS-IF97: Properties of Water and Steam", Springer Verlag, Berlin, 1998.
- /IMA14/ iMatix Corporation, <http://zeromq.org/>
- /JOO98/ H. G. Joo, D. Barber, G. Jiang, T. J. Downar, "PARCS, A Multi-Dimensional Two-Group Reactor Kinetics Code Based on the Nonlinear Analytic Nodal Method," PU/NE-98-26, Sept. 1998
- /KEN05/ S. Kenjeres, S. B. Gunarjo, K. Hanjalic, "Contribution to elliptic relaxation modelling of turbulent natural and mixed convection", International Journal of Heat and Fluid Flow, Volume 26, pp. 569-586, 2005
- /KIM05/ Yonghee Kim, Kang-Seog Kim, Jae Man Noh, Reactivity-Equivalent Physical Transformation for Homogenization of Double-Heterogeneous Fuels, Transactions of the Korean Nuclear Society Autumn Meeting, Busan, Korea, October 27-28, 2005.
- /KIM12/ T. K. Kim, 2nd Meeting of the WPRS/EGRPANS/Sodium Fast Reactor Task Force (SFR), NEA Headquarters, Issy-les-Moulineaux, France, 2012.
- /KLI12/ S. Kliem, R. Franz, OECD PKL2 Project – Final Report on the ROCOM Tests, Institute Report, HZDR\FWO\2012\03, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., July 2012

- /KLI15/ S. Kliem, R. Franz, "ROCOMPKLIIT2.3 – Format of the measurement data", 12.11.2015
- /KOZ06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark, NEA Nuclear Science Committee, Working Party on Scientific Issues of Reactor Systems, NEA/NSC/DOC(2006)20.
- /LAN97a/ Langenbuch S., K.-D. Schmidt, K. Velkov, W. Zwermann Reaktorphysik - Kopplung des 3D-Neutronenkinetikmodells QUABOX/CUBBOX mit ATHLET, Abschlussbericht GRS-A-2515, Oktober 1997.
- /LAN97b/ Langenbuch S., K.-D. Schmidt, K. Velkov Reaktorphysik – Die Kopplung des 3D-Neutronenkinetikmodells QUABOX/CUBBOX mit ATHLET, Programmtechnische Beschreibung GRS-A-2514, Oktober 1997
- /LER07/ Erweiterung des Anwendungsbereiches von ATHLET auf überkritischen Druck, Technische Notiz, TN-LER-01/07, März 2007
- /LER11/ G. Lerchl, ATHLET-Erweiterungen zur Simulation von flüssigem Blei, Blei-Wismut eutektisch und Natrium in Kühlkreisläufen, Technische Notiz, TN-LER-11/04, November 2011
- /MAH07/ J. Mahaffy et al., "Best Practice Guidelines for the use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications", Organisation for Economic Co-operation and Development, NEA/CSNI/R(2007)5, Mai 2007.
- /MAN15/ S. Manservigi, F. Menghini, "CFD simulations in heavy liquid metal flows for square lattice bare rod bundle geometries with a four parameter heat transfer turbulence model", Nuclear Engineering and Design 295, pp. 251–260, 2015
- /MAR94/ G. Marleau, R. Roy, A. Hébert, DRAGON: A Collision Probability Transport Code for Cell and Supercell Calculations, Report IGE-157, Institut de génie nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Québec, 1994.
- /MER09/ L. Mercatali, Report on GUINEVERE Safety Studies (Deliverable 2.13, EUROTRANS contract n. FI6W-CT-2004-216529), 2009.

- /MUE10/ A. Mueller, H. Abderrahim, Transmutation von radioaktivem Abfall, Physik-Journal 11 (2010) 33–38.
- /OEC07/ OECD , “Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-hydraulics and Technologies”, NEA No. 6195, 2007
- /OEC15/ OECD , “Handbook on Lead-bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-hydraulics and Technologies”, NEA No. 7268, 2015
- /OPE15/ OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox – User Guide, Version 3.0.1, December 2015
- /ORJ13/ Ortensi, Javier et al., Prismatic coupled neutronics/thermal fluids transient benchmark of the MHTGR-350 MW core design; Benchmark definition, 2013.
- /PAL95/ G. Palmiotti, E. E. Lewis, C. B. Carrico, VARIANT: VARIational Anisotropic Nodal Transport for Multidimensional Cartesian and Hexagonal Geometry Calculation, ANL-95/40, Argonne National Laboratory, October, 1995.
- /PAP15a/ A. Papukchiev, S. Buchholz, “Validation of ANSYS CFX for Gas and Liquid Metal Flows with great Conjugate Heat Transfer within the European Project THINS”, NURETH-16, International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, August 30-September 4, Chicago, 2015
- /PAP15b/ A. Papukchiev et al., "Multiscale Analysis of Forced and Natural Convection including Heat Transfer Phenomena in the TALL-3D Experimental Facility", NURETH-16, International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, August 30-September 4, Chicago, 2015
- /PAU12/ A. Pautz, Y. Perin, I. Pasichnyk, K. Velkov, W. Zwermann, A. Seubert, M. Klein, L. Gallner, B. Krzyczacz-Hausmann, Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen, GRS-A-3661, 2012.

- /PEL05/ D. B. Pelowitz et al., MCNPX Users's manual. Version 2.5.0, LANL report LA-CP-05-0369 (2005).
- /PEL13/ D. B. Pelowitz (Hrsg.), MCNP6 User's Manual Version 1.0, Los Alamos Report LA-CP-13-00634, Rev. 0 (2013).
- /PFR08/ W. Pfrang, D. Struwe, SAS-SFR Ref 2008 Rel 1.0 Input Data Documentation (August 2008), 2008.
- /PHI92/ Y. Philipponneau; Thermal Conductivity of (U, Pu)O<sub>2</sub>-x Mixed Oxide Fuel Journal of Nuclear Materials 188 (1992) 194-197
- /PRA89/ R. E. Prael, H. Lichtenstein, User Guide to LCS: The LAHET Code System, LANL report LA-UR-89-3014 (1989).
- /REI13/ F. Reitsma et al., "PBMR Coupled Neutronics/Thermal-hydraulics Transient Benchmark, the PBMR-400 Core Design, Volume1 – The Benchmark Definition", NEA/NSC/DOC(2013)10, July 17, 2013.
- /RHO12/ Rohde, U., Baier, S., Duerigen, S., Fridman, E., Kliem, S., Merk, B., Development and verification of the coupled 3D neutron kinetics/thermal-hydraulics code DYN3D-HTR for the simulation of transients in block-type HTGR. Nuclear Engineering and Design, 251 (2012) 358.
- /RIC77/ Radiation Shielding Information Center HETC Monte Carlo High-Energy Nucleon-Meson Transport Code, ORNL Report CCC-178 (1977).
- /RIV14/ J. Rivero Pérez-Aradros, "Test and Validation of the coupling between ATHLET and OpenFOAM using the example of Liquid Metal Cooling Systems", Master Thesis, Technische Universität München, Februar 2014
- /RIN06/ A. Rineiski, W. Maschek, Dynamics and Reactivity Control in ADS for Nuclear Waste Burning, Nuclear Energy (2006) S. 94 – 95.
- /ROH07/ U. Rohde et al., "Fluid mixing and flow distribution in a primary circuit of a nuclear pressurized water reactor – Validation of CFD codes", Nuclear Engineering and Design **237** (2007), pp 1639 – 1655.

- /ROE15/ F. Roelofs et al., "Status and perspective of turbulence heat transfer modeling for the industrial application of liquid metal flows", Nuclear Engineering and Design 290, pp. 99–106, 2015
- /RUG06/ J.-M. Ruggeri et al., ERANOS 2.1: the international code system for GEN-IV fast reactor analysis. In: Proc. ICAPP 2006, Reno, Nevada, USA, 2006.
- /SAR14/ M. Sarotto et al., Deliverable D2.1 Possible working range of the MYRRHA core and basic neutronic parameters for safety analyses, 06/10/2014, MAXSIMA project.
- /SET16/ D. Setyawan et al., ATHLET Modelling of the HTR-10 in Full Power Initial Core, zur Veröffentlichung in Vorbereitung, 2016.
- /SEU12/ A. Seubert, A. Sureda, J. Lapins, J. Bader, E. Laurien, The Transient 3-D Transport Coupled Code TORT-TD/ATTICA3D for High-Fidelity Pebble-Bed HTGR Analyses, Transport Theory and Statistical Physics **41** (2012) 133.
- /SEU13/ A. Seubert, 3-D few-group unstructured geometry finite element diffusion solver, GRS development.
- /SEU14a/ A. Seubert, M. des Bosc, K. Velkov, Modeling of the OECD/NEA Benchmark Medium Size Oxide Core with HELIOS and PARCS, Jahrestagung Kerntechnik, Frankfurt a.M., 2014.
- /SEU14b/ A. Seubert, K. Velkov, Stand-alone Neutronic Solutions of the OECD/NEA MHTGR-350 MW Core Design Benchmark, Jahrestagung Kerntechnik, Frankfurt a.M., 2014.
- /SEU14c/ A. Seubert, Report on Phase III modeling and results, MHTGR-350MW Benchmark, 2nd Workshop, Anaheim (CA, USA), 13.-14. November 2014.
- /SIG16/ Special Interest Group Nuclear Simulations,  
[https://openfoamwiki.net/index.php/SIG\\_Nuclear / Publications](https://openfoamwiki.net/index.php/SIG_Nuclear/Publications)

- /SIK01/ W. Schikorr, Assessment of the Kinetic and Dynamic Transient Behavior of Sub-Critical Systems (ADS) in Comparison to Critical Reactor Systems, Nucl. Eng. Design, 210 (2001) 95 – 123.
- /SPLINE/ SPLINE - Interpolation and Approximation of Data  
[http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f77\\_src/spline/spline.html](http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/f77_src/spline/spline.html)
- /STR09/ Stainsby, R. et al., Investigation of Local Heat Transfer Phenomena in a Prismatic Modular Reactor Core; NR001/RP/001 R02, AMEC NSS Limited. 2009.
- /TAI91/ T. A. Taiwo, H. S. Khalil, The DIF3D Nodal Kinetics Capability in Hexagonal-Z Geometry: Formulation and Preliminary Tests, Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, American Nuclear Society, Pittsburgh, Pennsylvania, April 28-May 2, Vol. 5, 1991.
- /VAN14/ M. Vanderhaegen, A. Le Belguet, A Review on Sodium Boiling Phenomena in Reactor Systems, Nuclear Science and Engineering, 176, 115-137 (2014).
- /VDC15/ von der Cron, D., Hristo, H.V., Seubert, A., Modeling of the Thermal Hydraulics of Very-High-Temperature Reactors with the System Code ATHLET; NURETH-16, Chicago, IL, 30. August – 4. September 2015.
- /VER07/ H. K. Versteeg, W. Malalasekera, “An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The Finite Volume Method”, 2<sup>nd</sup> edition, Pearson Education Limited, 2007.
- /WAG97/ W. Wagner, A. Pruss: Die neue Internationale Zustandsgleichung für Wasser für den allgemeinen und wissenschaftlichen Gebrauch; Jahrbuch 97, VDI-Verlag, Düsseldorf (1997).
- /WAL12/ A. E. Waltar, D. R. Todd, P. V. Tsvetkov, Fast spectrum reactors, Springer-Verlag, 2012.



/WEN13/ S. Wenzel, „Numerische Simulation von Flüssigmetallströmungen unter Wärmeeintrag mit OpenFOAM“, Diplomarbeit, Hochschule Zittau/Görlitz , August 2013

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abb. 3.1</b>	Berechnung des axialen Leistungsversatzes mit PARCS im Vergleich zu FEM-Diff-3D am Beispiel des MHTGR-350-MW-Benchmarks.....	15
<b>Abb. 3.2</b>	Mit MCNPX berechnetes Spallationsspektrum für das LBE-Target.....	20
<b>Abb. 3.3</b>	Axiales Quellstärkeprofil der Spallationsquelle in einer 8-Energiegruppen-Struktur für das MYRRHA-Target. Unten: axiale Zonen des Targetelements. ....	21
<b>Abb. 3.4</b>	Seitenansicht des ADS-Kerns mit minoren Actiniden im Brennstoff. ....	23
<b>Abb. 3.5</b>	Geometrie- und Materialverteilung (linke Spalte) und Reaktionsratenplots (rechte Spalte) des SERPENT-Modells in radialem (oben) und axialem Schnitt (unten).....	24
<b>Abb. 3.6</b>	Mit SERPENT berechnete radiale (rot) und axiale (blau) Leistungsprofile des ADS-Kerns im Zustand BOL.....	25
<b>Abb. 3.7</b>	Mit SERPENT berechnete energieintegrierte radiale (rot) und axiale (blau) Neutronenflussprofile des ADS-Kerns im Zustand BOL. ....	25
<b>Abb. 3.8</b>	Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-Rechnung in Diffusionsnäherung und 8 Energiegruppen im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.....	28
<b>Abb. 3.9</b>	Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-SN-Rechnung in 8 Energiegruppen mit $S_4$ - (links) und $S_{12}$ -Quadraturordnung (rechts) und im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.....	29
<b>Abb. 3.10</b>	Axiale und radiale Neutronenflussprofile der TORT-TD-Rechnung in 23 Energiegruppen mit Diffusionsnäherung (links) und $S_{12}$ -Quadraturordnung (rechts) und im Vergleich mit der SERPENT-Lösung.....	30
<b>Abb. 3.11</b>	Schema der Transformation vom zylindrischen zum hexagonalen Modell.....	31
<b>Abb. 3.12</b>	Zum zylindrischen Modell äquivalentes hexagonales Modell .....	32

<b>Abb. 3.13</b>	Vergleich der axialen Profile von Neutronenfluss (links) und Leistung (rechts) zwischen hexagonalem PARCS-Modell (rot) und ursprünglichem Zylindermodell in TORT-TD (blau).....	33
<b>Abb. 3.14</b>	Links: Ursprüngliches Spallationsspektrum in 122 Energiegruppen. Rechts: axiale Verteilung der Quelle entlang des Targets.....	34
<b>Abb. 3.15</b>	Zeitlicher Verlauf der Gesamtquellstärke. ....	34
<b>Abb. 3.16</b>	Zeitverläufe der mit PARCS und zum Vergleich mit TORT-TD gerechneten Quelltransiente zusammen mit den Abweichungen zwischen PARCS und TORT-TD. ....	35
<b>Abb. 4.1</b>	Brennelement einschließlich halben Zwischenraums zu den sechs Nachbarelementen im nicht deformierten Ausgangszustand (links) und im Zustand mit ausgedehnter Kerngitterplatte (rechts). Die hellgrau dargestellte Vergrößerung des Zwischenraums ist mit $\delta V$ bezeichnet. Die Abmessung des Wrappers (schwarz) ist unverändert. ....	41
<b>Abb. 4.2</b>	HELIOS-Modelle für ein Brennelement (links) und ein Steuerelement (rechts) einschließlich benachbarter halber Brennelemente.....	43
<b>Abb. 4.3</b>	Ausgewählte Brennelementpositionen, für die axiale Leistungsdichteprofile ausgewertet werden. ....	46
<b>Abb. 4.4</b>	Durchgezogene Linien: Mit dem radialen Ausdehnungsmodell für $T_{\text{diagrid}} = 1000 \text{ °C}$ berechnete axiale Leistungsdichteprofile in den ausgewählten Brennelementpositionen. Gestrichelte Linien: Leistungsdichteprofile des Referenzzustands ( $T_{\text{diagrid}} = 400 \text{ °C}$ ) zum Vergleich. ....	46
<b>Abb. 4.5</b>	Relative Abweichung der genähert berechneten axialen Leistungsdichteprofile von der exakten Rechnung für $T_{\text{diagrid}} = 1000 \text{ °C}$ in den ausgewählten Brennelementpositionen. ....	47
<b>Abb. 4.6</b>	Abweichungen der axialen Leistungsdichteprofile zwischen radial ausgedehntem und Referenz-Kernzustand.....	47
<b>Abb. 4.7</b>	Schema des Modells zur Beschreibung axiale Ausdehnungseffekte am Beispiel eines aus vier Materialzonen bestehenden axialen Abschnitts. ....	49

<b>Abb. 4.8</b>	Gruppenweise axiale Neutronenflussprofile für das generische ASTRID-Modell in einem zentralen Brennelement. Jede Markierung kennzeichnet einen nodalen Flussmittelwert, die Geraden dazwischen entsprechen einem linearen Flussverlauf zwischen zwei Nodes. ....	50
<b>Abb. 4.9</b>	Graphische Darstellung der Ergebnisse von Tab. 4.1. ....	54
<b>Abb. 4.10</b>	Konfiguration des Medium Size Oxide Core. Das Rechteck kennzeichnet das radiale Reflektormodell, siehe hierzu Abb. 4.12. ....	55
<b>Abb. 4.11</b>	HELIOS-Modelle eines Driver-Elements (links) und eines Steuer-Elements (rechts).....	58
<b>Abb. 4.12</b>	HELIOS-Modell für den radialen Reflektor mit drei verschiedenen Homogenisierungsgebieten. ....	58
<b>Abb. 4.13</b>	Radiale Kernanordnung des Medium-Size-Metallic-Kerns. ....	59
<b>Abb. 4.14</b>	Abmessungen und axiale Zonen von Brennelement und Brennstab sowie hexagonales Stabgitter im Brennelementkasten. ....	61
<b>Abb. 4.15</b>	Mit SERPENT berechnetes Neutronenspektrum für das Brennelement der inneren Kernzone. ....	63
<b>Abb. 4.16</b>	Radiale Kernanordnung des Minimum-critical-Kerns /SAR14/. ....	65
<b>Abb. 4.17</b>	2D-Superzell-Spektralmodelle in SERPENT für radialen Reflektor, Abschaltetelement und unteren Reflektor (v.l.n.r.) von MYRRHA. ....	66
<b>Abb. 4.18</b>	Mit PARCS berechnete ringweise radiale Leistungsverteilung für den Medium-Size-Oxide-Kern (rot) im Vergleich mit der FEM-Lösung (blau). ....	69
<b>Abb. 4.19</b>	Ergebnisse anderer Rechencodes für die ringweise radiale Leistungsverteilung des Medium-Size-Oxide-Kerns /KIM12/. ....	69
<b>Abb. 4.20</b>	Radiale Leistungsdichteverteilung des Medium-Oxide-Kerns in der axialen Mittelebene der aktiven Kernzone aus der FEMDiff3D-Rechnung mit 54 Prismen je hexagonalen Node. ....	70
<b>Abb. 4.21</b>	SERPENT-Ganzkernmodell des Medium-Size-Oxide-Kerns. Mitte: radiale Kernanordnung, Rand: axiale Schnitte der 5 Elementtypen. ....	71

<b>Abb. 4.22</b>	Stabzelle für die Vergleichsstudie von HELIOS-1.12 mit SERPENT. Grün: Kühlmittel (Natrium), gelb: Brennstoff, grau: Hüllrohr, weiß: leer. ....	74
<b>Abb. 4.23</b>	Vergleich der Multiplikationsfaktoren für Brennstoff der Kerninnenzone. ....	76
<b>Abb. 4.24</b>	Vergleich der Multiplikationsfaktoren für Brennstoff der Kernaußenzone. ....	76
<b>Abb. 4.25</b>	SERPENT-Modell der radialen Kernanordnung des Minimum- critical-Kerns (Mitte) mit axialen Schnitten der verschiedenen Elementtypen (Ränder). Näheres siehe Text. ....	77
<b>Abb. 4.26</b>	Reaktivitätsunterschiede zwischen den beiden PARCS-Modellen und dem SERPENT-Ganzkernmodell für die verschiedenen Zustände des Minimum-critical-MYRRHA-Kerns.....	79
<b>Abb. 4.27</b>	Mit PARCS berechnete Reaktivitätswirksamkeiten der Steuer- und Abschaltelemente nach Methode 1 und 2 im Vergleich zu den SERPENT-Ganzkern-Referenzrechnungen. ....	80
<b>Abb. 4.28</b>	Prozentuale Abweichung der brennelementweisen Leistungsverteilung von der SERPENT-Referenzlösung für die PARCS-Rechnung nach Methode 1.....	81
<b>Abb. 4.29</b>	Prozentuale Abweichung der brennelementweisen Leistungsverteilung von der SERPENT-Referenzlösung für die PARCS-Rechnung nach Methode 2.....	82
<b>Abb. 4.30</b>	Ringweise radiale Leistungsverteilungen von PARCS im Vergleich mit der SERPENT-Referenzlösung. ....	82
<b>Abb. 4.31</b>	Rechteckförmiger Zeitverlauf für die externe Neutronenquelle in der PARCS/ATHLET-Simulation für MYRRHA.....	83
<b>Abb. 4.32</b>	Zeitliche Verläufe von Gesamtleistung (blau) und mittlerer Kühlmitteltemperatur (rot) während des Neutronenquellpulses. ....	84
<b>Abb. 4.33</b>	Zeitliche Verläufe von Gesamtleistung (blau) und mittlerer Brennstofftemperatur (rot) während des Neutronenquellpulses. ....	84

<b>Abb. 4.34</b>	Abbildung des hexagonalen auf ein cartesisches Gitter (orange Linien).....	85
<b>Abb. 4.35</b>	Materialverteilung im hexagonalen (links) und äquivalenten cartesischen Modell (rechts).....	86
<b>Abb. 4.36</b>	Leistungsdichteverteilung im hexagonalen (links) und äquivalenten Cartesischen Modell (rechts).....	87
<b>Abb. 5.1</b>	Schema der Kopplung zwischen TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET (oben). Das Bild unten zeigt die in TORT-TD/ATTICA3D realisierte interne Kopplung.....	90
<b>Abb. 5.2</b>	ATHLET-Modell des Kerns des PBMR-400-Designs. ....	91
<b>Abb. 5.3</b>	TORT-TD-Modell des Kerns des PBMR-400-Designs mit eingezeichneter Zuordnung zu den 17 thermohydraulischen Kanälen. ....	92
<b>Abb. 5.4</b>	Von TORT-TD/ATTICA3D/ATHLET berechnete Zeitverläufe von Reaktorgesamtleistung (blau) und Nachzerfallsleistung (rot) für eine Druckentlastungstransiente. ....	92
<b>Abb. 5.5</b>	Superzellmodell für prismatischen V/HTR /ORJ13/. Zwei der sechs FBP-Positionen sind markiert.....	94
<b>Abb. 5.6</b>	Superzell-Modell in DRAGON4.....	95
<b>Abb. 5.7</b>	DRAGON4-Testrechnung für die Superzelle mit eingesetzten Absorberstäben. ....	96
<b>Abb. 5.8</b>	Schema der RPT-Methode /KIM05/. ....	96
<b>Abb. 5.9</b>	DRAGON4-Modell des Absorberstabs (mittig), links explizite Modellierung mittels BIHET, rechts RPT-Modell mit reduziertem Homogenisierungsvolumen. ....	97
<b>Abb. 5.10</b>	HELIOS-1.12-Modell der Superzelle, hier mit abbrennbaren Neutronenabsorbern. Die Vergrößerung rechts zeigt einen Ausschnitt mit den geometrischen Details.....	100
<b>Abb. 5.11</b>	Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands ohne (2a, blau) und mit (2b, rot) eingesetzten Absorberstäben. ....	101

<b>Abb. 5.12</b>	Relative $^{10}\text{B}$ -Konzentration als Funktion des Abbrands für die beiden FBP-Positionen 1 (links) und 103 (rechts).....	101
<b>Abb. 5.13</b>	Makroskopischer Absorptions-Wirkungsquerschnitt als Funktion des Abbrands für schnelle (links) und thermische Gruppe (rechts).....	101
<b>Abb. 5.14</b>	Makroskopischer Spalt-Produktions-Wirkungsquerschnitt als Funktion des Abbrands für schnelle (links) und thermische Gruppe (rechts). ....	102
<b>Abb. 5.15</b>	Radiale und axiale Kernanordnung des MHTGR-350 /ORJ13/ Hellblaue Markierung links: Positionen der teilweise eingefahrenen Steuerstabgruppe. ....	103
<b>Abb. 5.16</b>	Radial integrierte axiale Leistungsdichteprofile für das hexagonale Steuerelement-Modell in PARCS (rot) und FEM-Diff-3D (blau). ....	105
<b>Abb. 5.17</b>	Radial integrierte axiale Leistungsdichteprofile für das triangulare Steuerelement-Modell (durchgezogene Linie) im Vergleich zum hexagonalen Modell (gestrichelte Linie).....	106
<b>Abb. 5.18</b>	Radiale Neutronenflussverteilung in Energiegruppe 26 für das triangulare Modell in Höhe 1039,42 cm für ausgefahrene (links) und eingefahrene (rechts) Steuerelemente. (Rechnung mit FEM-Diff-3D.) .....	106
<b>Abb. 5.19</b>	Vertikale Ansicht des HTTR /HTT11/. ....	107
<b>Abb. 5.20</b>	Radiale Kernanordnung des HTTR mit Darstellung einer Graphitsäule mit Brennstoffblöcken /HTT11/. ....	108
<b>Abb. 5.21</b>	Serpent-Modelle der Brennstoff-Blöcke mit 31 (links) und 33 (rechts) Bohrungen für Brennstoff-Compacts. In zwei der drei kleinen Bohrungen sind Absorberstäbe (Burnable Poison rods, BP) eingesetzt. ....	109
<b>Abb. 5.22</b>	Serpent-Modelle des austauschbaren Reflektors mit 31 (links) und 33 (rechts) Bohrungen und umgebenden Brennstoffblöcken. ....	109
<b>Abb. 6.1</b>	Sättigungswerte als Funktion des Drucks (1). ....	118
<b>Abb. 6.2</b>	Sättigungswerte als Funktion des Drucks (2). ....	119
<b>Abb. 6.3</b>	Sättigungswerte als Funktion des Drucks (3). ....	120

<b>Abb. 6.4</b>	Sättigungsstoffwerte als Funktion der Temperatur (1).....	120
<b>Abb. 6.5</b>	Sättigungsstoffwerte als Funktion der Temperatur (2).....	121
<b>Abb. 6.6</b>	Sättigungsstoffwerte als Funktion der Temperatur (3).....	121
<b>Abb. 6.7</b>	Thermodynamische Flüssigkeitsstoffwerte als Funktion der Temperatur.....	122
<b>Abb. 6.8</b>	Thermodynamische Dampfstoffwerte als Funktion der Temperatur.....	122
<b>Abb. 6.9</b>	Natrium-Transportgrößen (1).....	123
<b>Abb. 6.10</b>	Natrium-Transportgrößen (2).....	124
<b>Abb. 6.11:</b>	Nodalisierung des Testfalls PIPE.....	127
<b>Abb. 6.12</b>	Kühlmitteltemperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE .....	128
<b>Abb. 6.13</b>	Schemazeichnung der ROCOM-Versuchsanlage /FZR03/ .....	132
<b>Abb. 6.14</b>	Position der Messflächen in der ROCOM-Versuchsanlage.....	133
<b>Abb. 6.15</b>	Abhängigkeit der Dichte von der Temperatur für Wasser bei 39 bar (Die blaue Kurve wurde nach /IAP97/ berechnet, die schwarze Gerade ist die lineare Näherung).....	134
<b>Abb. 6.16</b>	Unteres Plenum und Teile des Downcomers sowie der Kernkanäle für das mittlere Rechengitter (links); unterschiedliche Geometrien an den RDB-Eintrittsstutzen (rechts).....	139
<b>Abb. 6.17</b>	Vergleich der Temperatur zwischen Experiment und CFD Simulationen zu unterschiedlichen Zeiten im Downcomer (jeweils oben 15 s, Mitte 30 s, unten 70 s; jeweils innere/äußere Messebene: links oben Versuch, rechts oben OpenFOAM 1. Ordnung mit eckigen RDB Stutzen, links unten OpenFOAM 1. Ordnung mit runden RDB Stutzen, rechts unten OpenFOAM 2. Ordnung mit runden RDB Stutzen).....	142
<b>Abb. 6.18</b>	Molekulare Prandtl-Zahl für verschiedene Flüssigmetalle als Funktion der Temperatur /OEC15/.....	147



<b>Abb. 6.19</b>	Grenzschichtdicken (der Geschwindigkeit und der Temperatur) für verschiedene Prandtl-Zahlen /OEC15/.....	147
<b>Abb. 6.20</b>	Zusammenhang der mittleren turbulenten Prandtl-Zahl $Pr_{tm}$ mit der molekularen Prandtl-Zahl $Pr$ für verschiedene Stoffe /WEN13/, /OEC07/.....	148
<b>Abb. 6.21</b>	Kopplungsoptionen und die Austauschgrößen für einphasige Simulationen bei der Kopplung zwischen ATHLET und einem externen Solver (oben: erste Kopplungsart, unten: zweite Kopplungsart). .....	151
<b>Abb. 6.22</b>	Typische Solverstruktur eines transienten OpenFOAM Solvers auf Basis des PIMPLE Algorithmus. ....	152
<b>Abb. 6.23</b>	Architektur der semi-impliziten Kopplung zwischen OpenFOAM und ATHLET.....	153
<b>Abb. 6.24</b>	Änderungen, um buoyantPimpleFoam um die Kopplung mit ATHLET zu erweitern .....	155
<b>Abb. 6.25</b>	Beispiel für einen ATHLET-Eingabedatensatz für zwei Kopplungsschnittstellen. ....	158
<b>Abb. 6.26</b>	Beispiel für einen OpenFOAM-Eingabedatensatz für zwei Kopplungsschnittstellen für das Feld $p\_rgh$ .....	158
<b>Abb. 6.27</b>	Beispiel für den Eingabedatensatz des Python-Wrappers der Kopplungsschnittstelle (Restart-ID ist auskommentiert, es wird deshalb kein Restartlauf durchgeführt) .....	160
<b>Abb. 6.28</b>	Beispiel für den Eingabedatensatz der Kopplungsschnittstelle für OpenFOAM .....	162
<b>Abb. 6.29</b>	Beispiel für die Entwicklung der Residuen zu Beginn einer Simulation.....	162
<b>Abb. 6.30</b>	Beispiel für die Entwicklung der Residuen, nachdem beide Solver einen annähernd stabilen Zustand erreicht haben. ....	163
<b>Abb. 6.31</b>	Beispiel für die Unterrelaxation des Massenflusses vor der Übergabe der Kopplungswerte an ATHLET /RIV14/. ....	164

<b>Abb. 6.32</b>	Beispiel für die Entwicklung der Residuen, nachdem beide Solver einen annähernd stabilen Zustand erreicht haben. ....	164
<b>Abb. 6.33</b>	Rechengitter für den von OpenFOAM simulierten Teil des Strömungsgebiets. ....	165
<b>Abb. 6.34</b>	Massenstrom in PIPE1 und PIPE2 (ATHLET bzw. ATHLET-OpenFOAM). ....	166
<b>Abb. 6.35</b>	Geschwindigkeitsprofile an der Kopplungsschnittstelle zu PIPE1 (links) und PIPE2 (rechts). ....	166
<b>Abb. 6.36</b>	Schematischer Aufbau der gekoppelten Simulation mit einem geschlossenen Kreislauf. ....	167
<b>Abb. 6.37</b>	Schematischer Aufbau der gekoppelten Simulation mit einem geschlossenen Kreislauf. ....	167
<b>Abb. 6.38</b>	Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten in PIPE1 und PIPE2 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung. ....	168
<b>Abb. 6.39</b>	Vergleich der Drücke in PIPE1 und PIPE2 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung. ....	169
<b>Abb. 6.40</b>	Vergleich der Drücke in PIPE1 für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung bei stationären Randbedingungen ....	170
<b>Abb. 6.41</b>	Vergleich der Gesamtmasse im System für die gekoppelte und die ungekoppelte Rechnung. ....	171
<b>Abb. 6.42</b>	TALL-3D Primärkreis (links) und 3D-Teststrecke (rechts) /PAP15b/. ....	172
<b>Abb. 6.43</b>	Messstellen im Experiment /PAP15a/. ....	173
<b>Abb. 6.44</b>	Die Geometrie /PAP15b/ der Simulationen mit ATHLET bzw. des ATHLET-Anteils in der gekoppelten Simulation mit ATHLET und OpenFOAM. ....	174
<b>Abb. 6.45</b>	Rechengitter für Simulationen mit der 1°-Geometrie (links) und Geschwindigkeitsfeld während der erzwungenen Strömung (rechts) für die aktuelle Simulation. ....	175

<b>Abb. 6.46</b>	Rechengitter für Simulationen mit $\frac{1}{4}$ Zylindergeometrie (links) und Geschwindigkeitsfeld während der erzwungenen Strömung (rechts) /RIV14/ .....	176
<b>Abb. 6.47</b>	Massenstrom in der Teststrecke.....	176
<b>Abb. 6.48</b>	Temperatur am Auslass des Main Heater.....	177
<b>Abb. 6.49</b>	Temperatur am Ein- und Auslass der Teststrecke. ....	178
<b>Abb. 6.50</b>	Temperatur (in K) in der 3D Testregion nach Einsetzen des Naturumlaufs (t = 3000 s). ....	179
<b>Abb. 6.51</b>	Temperatur am Auslass des Wärmetauschers. ....	179
<b>Abb. 6.52</b>	Temperatur an der Bodenplatte des 3D-Testregion. ....	180
<b>Abb. 6.53</b>	Temperatur innerhalb der 3D-Testregion. ....	181
<b>Abb. 6.54</b>	Temperaturen an der Innenseite der Seitenwand der 3D-Testregion.....	182
<b>Abb. 6.55</b>	Temperaturen an der Unterseite der Prallplatte in der 3D-Testregion. ....	182
<b>Abb. 6.56</b>	Schema des ATHLET-Simulationsmodells für ASTRID.....	184
<b>Abb. 6.57</b>	Modellierung und Nodalisierung des Reaktorkernbereichs von ASTRID .....	185
<b>Abb. 6.58</b>	Schema des ATHLET-Simulationsmodells für den Kern der Anlage MYRRHA.....	187
<b>Abb. 7.1</b>	Prismatischer Brennelementblock im Querschnitt (modifiziert nach /STR09/) und hexagonale Einheitszelle .....	189
<b>Abb. 7.2</b>	Modellierung einer Einheitszelle mittels eines Hohlzylinders (links) oder durch eine Kombination aus einem Hohl- und zwei Vollzylindern (rechts) .....	190
<b>Abb. 7.3</b>	Berechnete Temperaturprofile mit den in <b>Abb. 7.1</b> beschriebenen Modellen im Vergleich zur FEM-Simulation einer Einheitszelle. Bei 300 s ist der stationären Zustand erreicht. ....	191

<b>Abb. 7.4</b>	MHTGR-350 Kern.Layout (modifiziert nach ORJ13) .....	192
<b>Abb. 7.5</b>	Mit ATHLET berechnete axiale Druckverteilung im MHTGR-Kern .....	193
<b>Abb. 7.6</b>	Axiale Temperaturverteilung im zentralen Reflektor, in den Brennstäben und im Helium.....	194
<b>Abb. 7.7</b>	Vertikaler (links) und horizontaler Schnitt (rechts) durch den Reaktorkern des HTR-10. ....	195
<b>Abb. 7.8</b>	Strömungspfade, Massenstromverteilung, Materialverteilung, Abmessungen und Positionen der Thermoelemente im HTR-10- Kern.....	196
<b>Abb. 7.9</b>	Vorgegebene Leistungsverteilung in $W/cm^3$ für den HTR-10. ....	197
<b>Abb. 7.10</b>	Schema des ATHLET-Modells des HTR-10 einschließlich Nodalisierung.....	198
<b>Abb. 7.11</b>	Radiale Richtungen (rote Pfeile), für die die Wärmeleitung in ATHLET modelliert wurde.....	198
<b>Abb. 7.12</b>	Von ATHLET für die vorgegebene Leistungsverteilung errechnete stationäre Temperaturverteilung des HTR-10 für die beiden Wärmetransportpfade. ....	199
<b>Abb. 7.13</b>	ATHLET-Ergebnisse für die radiale Temperaturverteilung in der Höhe $z = - 80$ cm und Messwerte $x(1)$ bis $x(6)$ . ....	200
<b>Abb. 7.14</b>	ATHLET-Ergebnisse für die radiale Temperaturverteilung in der Höhe $z = - 170$ cm und Messwerte $x(7)$ bis $x(12)$ . ....	200
<b>Abb. 7.15</b>	ATHLET-Ergebnisse für die Temperaturen in unterem und oberem Reflektor im Vergleich mit den Messwerten. ....	201
<b>Abb. 7.16</b>	Wärmeschaltbild des ATHLET-Kreislaufmodells mit wichtigen Systemparametern im simulierten stationären Zustand.....	202
<b>Abb. 7.17</b>	PBMR-400-Primärkreismodell in ATHLET .....	202
<b>Abb. 8.1</b>	Sättigungswerte bzw. pseudokritische Werte für Temperatur, spez. Enthalpie und Dichte mit A3.0A berechnet. Mit _PC werden die mit dem EQT-Programm ermittelten Sättigungs- bzw. pseudokritischen	

	Werte bezeichnet (s. Text oben), mit SAT die mit dem alten ATHLET Stoffwertprogramm berechneten.....	208
<b>Abb. 8.2</b>	Sättigungswerte bzw. pseudokritische Werte für Temperatur, spez. Enthalpie und Dichte mit A3.0B berechnet. Mit _PC werden die mit dem EQT-Programm ermittelten Sättigungs- bzw. pseudokritischen Werte bezeichnet (s. Text oben), mit SAT die mit dem neuen ATHLET Stoffwertprogramm berechneten. ....	209
<b>Abb. 8.3</b>	Spezifische Enthalpie und Dichte, Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B.....	213
<b>Abb. 8.4</b>	Partielle Ableitungen $\partial h \partial T$ und $\partial h \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B.....	214
<b>Abb. 8.5</b>	Partielle Ableitungen $\partial v \partial T$ und $\partial v \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B.....	215
<b>Abb. 8.6</b>	Partielle Ableitungen $\partial h \partial T$ und $\partial h \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 1).....	216
<b>Abb. 8.7</b>	Partielle Ableitungen $\partial v \partial T$ und $\partial v \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 1).....	217
<b>Abb. 8.8</b>	Partielle Ableitungen $\partial h \partial T$ und $\partial h \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 2).....	218
<b>Abb. 8.9</b>	Partielle Ableitungen $\partial v \partial T$ und $\partial v \partial p$ , Vergleich von EQT, A3.0A und A3.0B (gezoomt 2).....	219
<b>Abb. 8.10</b>	Pipe mit Drucktransiente; Vergleich von A3.0A (oben) mit A3.0B (oben).....	221
<b>Abb. 8.11</b>	Beheiztes Pipe bei 24 MPa: Ortsprofil von Fluidtemp. (links) und spez. Wärmekapazität (rechts); Vergleich von A3.0A (oben) mit A3.0B (unten) .....	222
<b>Abb. 9.1</b>	Radiale (links) und axiale (rechts) Kernkonfiguration von ASTRID gemäß der Spezifikation von ESNII+ .....	226
<b>Abb. 9.2</b>	HELIOS-Modelle für Brennelemente von ASTRID, links z. B. für die Spaltzone der inneren Kernzone und rechts für die untere axiale Brutzone. ....	227

<b>Abb. 9.3</b>	HELIOS-Superzell-Modelle für Nicht-Brennelemente, links z. B. für das CSD-Steurelement und rechts für das DSD-Abschaltelement. ....	227
<b>Abb. 9.4</b>	Materialverteilung des deterministischen Kernmodells von ASTRID in einer Höhe von 120 cm im Nominalzustand mit den Steuerelementen in Parkpositionen. ....	228
<b>Abb. 9.5</b>	Radiale Leistungsdichteverteilungen in der unteren Brutzone (links) und der unteren Spaltzone (rechts).....	230
<b>Abb. 9.6</b>	Radiale Leistungsdichteverteilungen in der inneren Brutzone (links) und der oberen Spaltzone (rechts).....	230
<b>Abb. 9.7</b>	Reaktivitätswerte für die verschiedenen Voiding-Szenarien im Vergleich mit den Ergebnissen anderer Codes/Institute.....	232
<b>Abb. 9.8</b>	Integrale Steuerstabwirksamkeit der CSD-Elemente. ....	233
<b>Abb. 9.9</b>	Radiale Darstellung des SERPENT-Ganzkernmodells von ASTRID in der aktiven axialen Kernregion.....	233
<b>Abb. 9.10</b>	Links: Brennstofftemperatur-Doppler-Reaktivitäts-Rückwirkung für Spalt- (blau) und Brutzone (rot) als Funktionen der jeweiligen Temperatur. Man beachte die unterschiedlichen Bezugstemperaturen für Spalt- und Brutzone entsprechend den jeweils verschiedenen Nominaltemperaturen. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der axialen Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr (simultan) der Spaltzone.....	236
<b>Abb. 9.11</b>	Links: Reaktivitätsrückwirkung aus der axialen Ausdehnung von Brennstab und Hüllrohr (simultan) der Brutzone. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der radialen Ausdehnung der Kerngitterplatte als Funktion der Kerneintrittstemperatur. ....	236
<b>Abb. 9.12</b>	Links: Reaktivitätsrückwirkung aus der Kühlmittelausdehnung als Funktion der Kühlmitteltemperatur. Rechts: Reaktivitätsrückwirkung aus der Ausdehnung des Steuerelementantriebs als Funktion der Kernaustrittstemperatur. ....	237
<b>Abb. 9.13</b>	Von ATHLET berechnete Kühlmittelverteilung im stationären Ausgangszustand von ASTRID (inkl. HTX-Rohrtemperatur TSL).....	238

<b>Abb. 9.14</b>	Von ATHLET berechnete Temperaturverteilungen im Kühlmittel und HTX im stationären Ausgangszustand von ASTRID. ....	239
<b>Abb. 9.15</b>	Von ATHLET berechnete Temperaturverteilungen im Kühlmittel und HTX von ASTRID am Ende der Transiente.....	240
<b>Abb. 9.16</b>	Zeitliche Verläufe wichtiger Kenngrößen der ATHLET-Simulation der ULOF-Transiente.....	242
<b>Abb. 9.17</b>	DIAGRID-Temperatur mit feiner (links) und grober (rechts) Nodalisierung des COLDPOOLS.....	243
<b>Abb. 9.18</b>	Berechnete zeitliche Verläufe in der ENEA-PLOF Transiente. Blaue Kurve - Mittelwert, blaues Band – Standardabweichung .....	250
<b>Abb. 9.19</b>	Zeitliche Verläufe der Spearman's Rangkorrelationskoeffizienten in der ENEA-PLOF Transiente .....	252

## Tabellenverzeichnis

<b>Tab. 4.1</b>	Ergebnisse des in PARCS implementierten Modells zur axialen Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung im Vergleich zur exakten Rechnung. $\Delta\rho$ ist die Reaktivitätsdifferenz bezüglich <i>keffexact</i> . ....	52
<b>Tab. 4.2</b>	Ergebnisse des in PARCS implementierten Modells zur axialen Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung im Vergleich zur exakten Rechnung (feste Materialdichten) für lineare und quadratische intranodale Flussinterpolation. $\Delta\rho$ ist die Reaktivitätsdifferenz bezüglich <i>keffexact</i> .....	53
<b>Tab. 4.3</b>	Ausgewählte Kenngrößen des Medium Size Oxide Kerns. ....	56
<b>Tab. 4.4</b>	Energiegrenzen der 23-Gruppen-Struktur.....	57
<b>Tab. 4.5</b>	Nuklidzusammensetzung des Brennstoffs in Kern-Innen- und Außenzone. ....	60
<b>Tab. 4.6</b>	Für die Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten verwendete Gruppenstrukturen (untere Energiegrenzen in eV). ....	62
<b>Tab. 4.7</b>	Parameter und Stützstellen für die Erstellung der parametrisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek. ....	67
<b>Tab. 4.8</b>	Multiplikationsfaktoren der SERPENT-Ganzkernrechnungen mittels ENDF/B-VII.0 bzw. JEFF-3.1 und im Vergleich mit den jeweiligen Mittelwerten der Benchmarkteilnehmer und der zugehörigen Standardabweichung. ....	71
<b>Tab. 4.9</b>	Deterministische 3D-Kernberechnungen des Medium-Size-Metallic-Kerns mit PARCS und DYN3D mit SERPENT-Weniggruppendaten. ....	72
<b>Tab. 4.10</b>	Deterministische 3D-Kernberechnungen des Medium-Size-Metallic-Kerns mit PARCS und DYN3D mit HELIOS-Weniggruppendaten.....	73
<b>Tab. 4.11</b>	Geometrie und Materialzusammensetzung der Stabzelle. ....	74
<b>Tab. 4.12</b>	Multiplikationsfaktoren von SERPENT und PARCS für die vier betrachteten Zustände des Minimum-critical-MYRRHA-Kerns.....	78



<b>Tab. 4.13</b>	Vergleich der Multiplikationsfaktoren für hexagonale und Cartesische Modelle. ....	86
<b>Tab. 5.1</b>	Multiplikationsfaktor als Funktion des RPT-Radius für die Absorberzelle. $\Delta\rho$ ist die Reaktivitätsdifferenz zum Multiplikationsfaktor des expliziten Modells. ....	98
<b>Tab. 5.2</b>	Multiplikationsfaktor als Funktion des RPT-Radius für die TRISO-Compact-Zelle. $\Delta\rho$ ist die Reaktivitätsdifferenz zum Multiplikationsfaktor des expliziten Modells. ....	99
<b>Tab. 5.3</b>	Ergebnisse für globale Parameter. ....	104
<b>Tab. 5.4</b>	Energiegrenzen der 26-Energiegruppen-Struktur. ....	110
<b>Tab. 6.1</b>	Anzahl der Messstellen in den verschiedenen Messfläche. ....	135
<b>Tab. 6.2</b>	Verwendetes Rechengitter (mit runden Stützen). ....	138
<b>Tab. 6.3</b>	Minima und Maxima der Temperatur im Experiment bzw. in den Simulationen im quasistationären Zustand (in °C) im Zeitintervall 0 bis 75 s. ....	141
<b>Tab. 6.4</b>	Kopplungsschnittstellentypen in OpenFOAM für die unterstützten Felder. ....	157
<b>Tab. 7.1</b>	Wesentliche Kenngrößen des HTR-10. ....	195
<b>Tab. 9.1</b>	Energiegrenzen der 8-Gruppen-Struktur. ....	226
<b>Tab. 9.2</b>	Für ASTRID zu betrachtende Kernzustände und berechnete Multiplikationsfaktoren bzw. Reaktivitätseffekte. NOM bedeutet Temperatur im Nominalzustand. ....	231
<b>Tab. 9.3</b>	Für ASTRID zu betrachtende Voiding-Szenarien. (In allen Szenarien außer Nr. 9 verbleibt Kühlmittel zwischen benachbarten Wrappern.) ....	232
<b>Tab. 9.4</b>	Mit SERPENT und JEFF-3.1-Punktdateien berechnete Anteile verzögerter Neutronen und Zerfallskonstanten der Mutterkerne für ASTRID. ....	233

<b>Tab. 9.5</b>	Unsicheren Eingangs-Parameter für ULOF (grau) und PLOF Transienten. Die uniformen Verteilungen aller Eingangs-Größen sind angenommen.....	245
<b>Tab. 9.6</b>	Ausgewählte zeitabhängige Ergebnisgrößen .....	246
<b>Tab. 9.7</b>	Akronyme der Eingangsparameter für die Darstellung der SRCC.....	247

**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](http://www.grs.de)