

**Weiterentwicklung der
Rechenmethoden zur
Sicherheitsbewertung
innovativer Reaktorkonzepte
mit Perspektive P&T**

Weiterentwicklung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive P&T

Armin Seubert
Matthias Behler
Jérémy Bousquet
Romain Henry
Joachim Herb
Georg Lerchl
Peter Sarkadi

Oktober 2019

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1547 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

3D neutronics, ADS, ATHLET, CFD, code development, coupled code, fast reactor, liquid metal, OpenFOAM, PARCS, Reactor physics, safety assessment, SFR, sodium, subcritical system, thermal hydraulics

Kurzfassung

Ziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung der reaktorphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive Partitionierung und Transmutation (P&T). Dabei soll auch der Bedeutung von P&T als Form des Umgangs mit radiotoxischen Abfällen aus ausgedienten Kernbrennstoffen Rechnung getragen werden, indem P&T-spezifische Sicherheitsaspekte betrachtet werden. Die Schwerpunkte sind: (a) Weiterentwicklung der reaktorphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethodik zur Sicherheitsbewertung flüssigmetallgekühlter Systeme einschließlich quellgetriebener unterkritischer Konzepte, (b) Sicherheitsaspekte der Prozesse von P&T, (c) Beteiligung an EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA sowie Mitwirkung am FRKP der IAEA. Die Ausgangssituation zu Beginn des Vorhabens ist zunächst dadurch gekennzeichnet, dass im Rahmen des Vorgängervorhabens RS1515 der Neutronenkinetikcode PARCS um die Möglichkeit der Simulation externer zeitabhängiger räumlicher Neutronenquellverteilungen erweitert und zudem die Kopplung von PARCS mit ATHLET vorgenommen worden war. Für den MYRRHA-Kern lagen erste MCNPX-Modelle zur Bestimmung von Spallationsneutronen-Quellverteilungen und 3D-Kernmodelle vor. Darüber hinaus wurden erste Modelle zur räumlich aufgelösten Beschreibung thermo-struktureller Rückwirkungseffekte der Kerngitterplatte und axialer Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung entwickelt. Hinsichtlich der Thermohydraulik verfügte ATHLET zu Beginn des Vorhabens über die Fähigkeit, die flüssigen Metalle Natrium, Blei und LBE einphasig zu modellieren. Im Rahmen des Projekts RS1515 wurde ferner ein erster Versuch an der TALL-Versuchsanlage mit Hilfe der gekoppelten Version von ATHLET-OpenFOAM simuliert und somit gezeigt, dass dreidimensionale Effekte analysiert werden können, die mit Systemcodes allein nicht dargestellt werden können. Bezüglich der *Neutronenphysik der Void-Rückwirkung natriumgekühlter Systeme* wurde anhand des Modellsystems ASTRID durch Vergleich deterministischer Kernberechnungen (PARCS, FEM-Diff-3d) mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen (Serpent) für verschiedene Void-Szenarien festgestellt, dass die Diffusionsnäherung Void-Zustände gut beschreiben kann; Voiding im oberen Plenum führt allerdings zu etwas größeren Abweichungen, die auf die Grenzen der Gültigkeit der Diffusionsnäherung hinweisen können. Zur *Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung* wurde das gekoppelte Codesystem PARCS/ATHLET für stabweise Auflösung erweitert, indem ein einzelnes Brennelement eines natriumgekühlten Reaktors (ASTRID) stab- bzw. unterkanalweise modelliert wird. Die *Erstellung von Kernmodellen ausgewählter Systeme* umfasst neben Kernmodellen für ASTRID auch eines für

Superphénix, dass für PARCS im Rahmen der Beteiligung am EU-Projekt ESFR-SMART entwickelt wurde und als *In-kind-Contribution* Leistungsverteilung und Reaktivitätskoeffizienten liefert. Ferner wurde im Rahmen des IAEA-CRP zu den CEFR-Start-up-Tests ein Monte-Carlo-Modell des CEFR für Serpent erstellt und verschiedene Experimente berechnet. Die *Methodik zur Darstellung der Wirkungsquerschnitte schneller Systeme inklusive Strukturrückwirkungen* wurde dahingehend erweitert, dass die Wirkungsquerschnitte – zusätzlich zu Brennstofftemperatur und Kühlmitteldichte – auch nach Hüllrohrtemperatur und Temperatur der Kerngitterplatte parametrisiert werden und ggf. Void-Anteil als weiteren Parameter erlauben. Die *Modelle zu thermo-strukturellen Ausdehnungseffekten* wurden derart erweitert, dass auch lokal variierenden Kern-Gitterweiten möglich sind. Die Temperatur der Kerngitterplatte wird der ATHLET-Wärmestruktur entnommen, die die Stahlstruktur der Kerngitterplatte beschreibt. Das ebenfalls in Rahmen von RS1515 entwickelte und in PARCS implementierte Modell zur axialen Brennstab-/Hüllrohr-Ausdehnung wurde im Vorgängervorhaben (RS1547) modernisiert, flexibilisiert und überprüft. Die *Untersuchung des Einflusses minorer Aktiniden im Transmutationsbrennstoff anhand von 3D-Kernberechnungen* wurde anhand des ASTRID-Reaktorkerns mittels stationärer deterministischer 3D-Kernberechnungen für verschiedene Arten der Einbringung minore Aktiniden in den Reaktorkern (nur in die äußere radiale Kernzone, nur in die innere radiale Kernzone, innere und äußere radiale Kernzone) und für verschiedene Dopplerszenarien (unterschiedliche Brennstofftemperaturen in Spalt- und Brutzonen) untersucht und mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen verglichen. Im Rahmen der *Betrachtung der Sicherheitsaspekte ausgewählter technologischer Prozesse von P&T* wurden kritische Experimente nachgerechnet und die Sensitivität der Neutronenmultiplikationsfaktoren auf die eingehenden Wirkungsquerschnitte sowie die Unsicherheit der Neutronenmultiplikationsfaktoren aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte bestimmt. Die Ergebnisse geben u. a. Hinweise auf die größeren Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte von Np-237 gegenüber jenen für U-235. Zur Simulation des *Siedens von Natrium* in Kühlkreisläufen wurden in ATHLET druckabhängige Sättigungswerte für Natrium implementiert sowie Stoffwerte für Natriumdampf. Alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase können innerhalb eines Thermofluid-Systems auch als zweiphasige Mehrkomponentenströmung modelliert werden. Zur Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium wurden Experimente (Testreihe KNS-3) der Versuchsanlage Kompakter Natriumsiedekreislauf (KNS) in ATHLET modelliert und erfolgreich nachgerechnet. Um ATHLET für sicherheitsrelevante Fragestellungen von *Salzschmelzsystemen* einsetzen zu können, wurde das Programm erweitert. Es können nun die Salzschmelzen FLNaK (LiF-NaF-KF)

und FLiBe (LiF-BeF₂) als nicht-siedende Arbeitsmedien simuliert werden. Im Rahmen der *Erstellung thermohydraulischer Modelle schneller Systeme* wurde für den Forschungsreaktor Phénix ein ATHLET-Anlagenmodell entwickelt, welches so gestaltet wurde, dass es auch die thermohydraulischen Randbedingungen für gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulationen liefern kann. Mit diesem Modell wurde der sog. Dissymmetric-Test in Phénix erfolgreich nachgerechnet. Ferner wurden für Phénix gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulationen durchgeführt. Dabei wurde die Kopplungsmethode zwischen OpenFOAM und ATHLET weiterentwickelt, die ursprünglich auf der ATHLET-Schnittstelle für die Kopplung mit CFX beruhte und in verschiedenen GRS-Projekten weiterentwickelt wurde. Im Rahmen dieses Projekts wurde insbesondere die Kopplung von mehr als zwei Schnittstellen für einphasige Fluide zwischen ATHLET und OpenFOAM verifiziert. An der *Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP)* Initiative hat sich die GRS u.a. mit Informationen über ihre laufenden Aktivitäten auf dem Gebiet der Weiterentwicklung von Methoden zur Sicherheitsbewertung von schnellen Reaktorsystemen sowie an der Überarbeitung der Fast-Reactor-Taxonomie für die Sharepoint-Site des FRKP durch Einbringung von Vorschlägen für deren Optimierung beteiligt. Ferner konnten die EU-Projekte ESNII+ und MAXSIMA erfolgreich abgeschlossen werden, u. a. durch Veranstaltung eines Workshops zur Sicherheit innovativer Reaktorkonzepte an der GRS. Der vorliegende Bericht dokumentiert die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse im Detail.

Abstract

The aim of this project is the further development of the reactor-physical and thermohydraulic calculation methodology of GRS for the safety assessment of innovative reactor concepts also with partitioning and transmutation (P&T) perspectives. It also considers the importance of P&T as a way of dealing with radiotoxic waste from used nuclear fuel by considering P&T-specific safety aspects. The focus is on: (a) further development of reactor-physical and thermohydraulic computational methods for safety assessment of liquid metal cooled systems including source driven subcritical concepts, (b) safety aspects relevant to P&T, (c) participation in EU projects ESNII+ and MAXSIMA and participation in the FRKP of the IAEA. The initial situation at the beginning of the project is characterized by the fact that in the context of the previous project RS1515 the neutron kinetics code PARCS was extended to simulate external time-dependent spatial neutron source distributions and, in addition, the coupling of PARCS with ATHLET was implemented. First MCNPX models for the determination of spallation neutron source distributions and 3D core models were available for the MYRRHA core. In addition, prototype models for the spatially resolved description of the thermo-structural expansion effects of the diagrid and an axial fuel/cladding expansion model have been developed. Regarding thermal hydraulics, ATHLET had the ability to model single-phase liquid metals sodium, lead and LBE at the beginning of the project. Within the RS1515 project, a simulation of the TALL test facility was done using the coupled version of ATHLET-OpenFOAM, so demonstrating that it can analyze three-dimensional effects that cannot be represented by system codes alone. Concerning the neutron physics of the void effects of sodium-cooled systems, the diffusion approximation was assessed for the model system ASTRID by comparison of deterministic core calculations (PARCS, FEM-Diff-3d) with Monte Carlo reference calculations (Serpent) for different void scenarios which were found to be well described by the diffusion approximation. However, voiding in the upper plenum leads to slightly larger deviations, which may indicate the limits of the validity of the diffusion approximation. For the development and testing of core models with pin-by-pin representation, the coupled code system PARCS/ATHLET was applied to a single fuel element of a sodium-cooled reactor (ASTRID) in pin-cell and subchannel representation. The creation of core models of selected systems, in addition to core models for ASTRID, also includes one for Superphénix, developed for PARCS as part of the EU project ESFR-SMART, which provided power distribution and reactivity coefficients as in-kind contribution. Furthermore, within the framework of the IAEA CRP on the CEFR

start-up tests, a Monte Carlo model of the CEFR for Serpent was prepared and various experiments were calculated. The methodology for the representation of the cross sections of fast systems including structural expansion effects has been extended so that the cross sections are parameterized – in addition to the fuel temperature and coolant density – also with respect to the cladding temperature and the temperature of the diaphragm; the void fraction can be added as an optional further parameter. The models of thermo-structural expansion effects were extended in such a way that locally varying core lattice pitches are possible. The temperature of the core lattice plate is taken from the ATHLET heat structure, which describes the steel structure of the core lattice plate. The model for axial fuel/cladding expansion, which was also developed as part of RS1515 and implemented in PARCS, was modernized and tested in the previous project. The investigation of the influence of minor actinides in the transmutation fuel on the basis of 3D core calculations was carried out for the ASTRID reactor core by means of stationary 3D deterministic core calculations for different modes of incorporation of minor actinides in the reactor core (only in the outer radial core zone, only in the inner radial core zone, inner and outer radial core zone) and for different Doppler scenarios (different fuel temperatures in fissile and fertile zones) studied and compared with Monte Carlo reference calculations. In considering the safety aspects of selected P&T technological processes, critical experiments were recalculated and the sensitivity of the neutron multiplication factors to the cross sections and the uncertainty of the neutron multiplication factors due to the uncertainties of the cross sections were determined. The results give, e. g., indications of larger uncertainties of the cross sections of Np-237 over those for U-235. To simulate the boiling of sodium in cooling circuits, ATHLET has implemented pressure-dependent saturation values for sodium as well as material properties for sodium steam. All non-condensing gases available in ATHLET can also be modeled as a two-phase multi-component flow within a thermal fluid system. To test the ATHLET models for describing the sodium boiling, experiments (test series KNS-3) of the KNS compact sodium boiling loop in ATHLET were modeled and successfully recalculated. In order to be able to use ATHLET for safety assessment of molten salt systems, the ATHLET code has been extended. The molten salts FLiNaK (LiF-NaF-KF) and FLiBe (LiF-BeF₂) can now be simulated as non-boiling working fluids. As part of the development of thermohydraulic models of fast systems, an ATHLET plant model was developed for the research reactor Phénix, which was designed so that it can also provide the thermohydraulic boundary conditions for coupled ATHLET OpenFOAM simulations. With this model, the so-called dissymmetric test in Phénix was successfully recalculated. Further-

more, coupled ATHLET/OpenFOAM simulations were performed for Phénix. The coupling between OpenFOAM and ATHLET, which was originally based on the ATHLET interface for coupling with CFX, was further developed. In particular, this project verified the coupling of more than two interfaces for single-phase fluids between ATHLET and OpenFOAM. Contributions to the Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Initiative has been done by information on ongoing GRS activities in the development of methods for the safety assessment of fast reactor systems, as well as on the revision of the Fast Reactor taxonomy for the FRKP Sharepoint site by making suggestions for their optimization. Furthermore, the EU projects ESNII+ and MAXSIMA have been successfully completed, e. g. by organizing a workshop on the safety of innovative reactor concepts at GRS. The present report documents in detail the work carried out and achieved results.

Inhaltsverzeichnis

1	Zielsetzung und Aufgabenstellung.....	1
2	Planung und Ablauf des Vorhabens.....	3
2.1	Ausgangssituation zu Beginn des Vorhabens	4
2.1.1	Reaktorphysik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme einschließlich quellgetriebener unterkritischer Konzepte	4
2.1.2	Thermohydraulik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme	5
2.1.3	Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation.....	6
2.1.4	Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA.....	6
3	AP 1: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme	7
3.1	AP 1.1: Neutronenphysik der Void-Rückwirkung natriumgekühlter Systeme.....	7
3.2	AP 1.2: Sicherheitsaspekte quellgetriebener unterkritischer Systeme.....	9
3.2.1	MCNPX-Modell des Spallationstargets	10
3.2.2	Vergleich verschiedener Spaltungsmodelle von MCNPX.....	11
3.2.3	Spaltungsquellstärke-Verteilung im Target.....	13
3.2.4	Simulation eines Spaltungsneutronenpulses mit PARCS	15
3.3	AP 1.3: Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung.....	16
3.3.1	Modellentwicklung	17
3.3.2	Gekoppelte stationäre PARCS/ATHLET-Simulationen.....	19
3.4	AP 1.4: Erstellung von Wenig-Gruppen- Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	22
3.4.1	Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für ASTRID.....	22
3.4.2	Stabzellweise homogenisierte parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken für ASTRID.....	31
3.4.3	Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für Superphénix.....	31
3.4.4	Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für Superphénix.....	31
3.4.5	Auswertung von Parametern und arithmetischen Formeln im Eingabedatensatz von Serpent.....	37

3.5	AP 1.5: Erstellung von Kernmodellen ausgewählter Systeme	38
3.5.1	Das Reaktorkonzept ASTRID	38
3.5.2	Der Superphénix-Reaktor	40
3.5.3	Der China Experimental Fast Reactor (CEFR).....	46
4	AP 2: Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle.....	51
4.1	AP 2.1: Entwicklung einer Methodik zur Darstellung der Wirkungsquerschnitte schneller Systeme inklusive Strukturrückwirkungen	51
4.2	AP 2.2: Erweiterung der Modelle zu thermo-strukturellen Ausdehnungseffekten	53
4.2.1	Radiales Kernausdehnungsmodell in PARCS.....	53
4.2.2	Axiales Kernausdehnungsmodell in PARCS	54
4.3	AP 2.3: Verifizierung und Validierung.....	58
4.3.1	Radiales Kernausdehnungsmodell.....	58
4.3.2	Axiales Kernausdehnungsmodell.....	62
4.3.3	Gekoppelte 3D-Kernberechnungen zur lokalen Simulation des Siedens von Natrium	64
5	AP 3: Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation	69
5.1	AP 3.1: Untersuchung des Einflusses minorer Aktiniden im Transmutationsbrennstoff anhand von 3D-Kernberechnungen	69
5.2	AP 3.2: Erstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Brennstoffe mit Aktinidenbeladung.....	75
5.3	AP 3.3: Betrachtung der Sicherheitsaspekte ausgewählter technologischer Prozesse von P&T	76
5.3.1	Überblick zur Qualität der verfügbaren nuklearen Daten.....	77
5.3.2	Generische kritische Anordnungen mit minoren Aktiniden	80
5.3.3	Kritische Experimente mit minoren Aktiniden	89
6	AP 4: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme.....	97
6.1	AP 4.1: Weiterentwicklungen in ATHLET	97

6.1.1	Weiterentwicklung des Modellumfangs zur Beschreibung des Siedens von Natrium in Kühlkreisläufen	97
6.1.2	Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium	113
6.1.3	Erweiterungen von ATHLET zur Simulation von Salzschnmelzen in Kühlkreisläufen	125
6.2	AP 4.2: Schnittstelle für Wärmestrukturparameter	141
6.2.1	Übertragung der Hüllrohrtemperaturverteilungen	142
6.2.2	Übertragung der Temperatur der Kerngitterplatte	142
6.3	AP 4.3: Erstellung thermohydraulischer Modelle schneller Systeme	143
6.3.1	ATHLET-Modell für den Reaktor Phénix	143
6.3.2	Der Phénix-Dissymmetric-Test	145
6.4	AP 4.4: Kopplung OpenFOAM mit Systemcodes	149
6.4.1	Test des Gittergenerierungstools snappyHexMesh	150
6.4.2	Gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulation des natriumgekühlten Reaktors Phénix	153
6.4.3	Implementierung eines Turbulenzmodells für Strömungen mit niedrigen molekularen Prandtl-Zahlen	173
7	AP 5: Beteiligung an EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA.....	181
7.1	AP 5.1: ESNII+ (bis 31.08.2017)	181
7.3	AP 5.2: MAXSIMA (bis 31.10.2016)	186
8	AP 6: Mitwirkung am IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal.....	187
8.1	Das Fast Reactor Knowledge Organization System (FR-KOS) der IAEA	187
8.2	Beispiel für das Autotagging einer wissenschaftlichen Publikation	192
9	Zusammenfassung	195
9.1	Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme	195
9.2	Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle	196
9.3	Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation	197

9.4	Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme	198
9.5	Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal.....	200
	Literaturverzeichnis.....	201
	Abbildungsverzeichnis.....	213
	Tabellenverzeichnis.....	221

1 Zielsetzung und Aufgabenstellung

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in der Weiterentwicklung der reaktorphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive Partitionierung und Transmutation (P&T). Der Schwerpunkt liegt auf flüssigmetallgekühlten Systemen mit schnellen Neutronenspektren (z. B. ASTRID, Kühlmittel Natrium) einschließlich quellgetriebener unterkritischer Systeme (z. B. MYRRHA, Kühlmittel Blei-Wismut-Eutektikum). Dabei soll auch der aktuell wachsenden Bedeutung von P&T als Form des Umgangs mit Art und Menge hochradiotoxischer Abfälle aus ausgedienten Kernbrennstoffen, wie sie heute und in naher Zukunft vorliegen, Rechnung getragen werden, indem spezifische Sicherheitsaspekte der involvierten Technologien betrachtet werden. Das Gesamtziel umfasst folgende Eckpunkte:

- Weiterentwicklung der reaktorphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethodik zur Sicherheitsbewertung schneller flüssigmetallgekühlter Systeme einschließlich quellgetriebener unterkritischer Konzepte.
- Sicherheitsaspekte der Prozesse von Partitionierung und Transmutation.
- Beteiligung an laufenden EU-Projekten (ESNII+ und MAXSIMA) sowie Mitwirkung am Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal der IAEA.

Das Vorhaben nimmt Bezug auf die im Evaluierungsbericht „Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen“ des Kompetenzverbundes Kerntechnik (KVKT) /KVK 13/ formulierten Themenschwerpunkte zur *Beurteilung höchster Sicherheitsstandards nuklearer Anlagen im Ausland einschließlich neuer Reaktoren (GEN IV, SMR)* mit den Aspekten *Konzeptspezifisches Betriebs- und Störfallverhalten* (Entwicklung thermodynamischer und thermohydraulischer Modelle für neue Kühlmittel, 3D-Reaktorkinetik-Modelle mit geeigneten Wirkungsquerschnitts-Modellen zur Berücksichtigung der speziellen Rückwirkungsmechanismen zwischen der Neutronik, Mechanik und Thermohydraulik, multiskaliger Ansatz in der Thermohydraulik zur direkten Bestimmung lokaler Sicherheitsparameter) und *Transmutationssysteme*. Das Vorhaben orientiert sich dabei an internationalen, insbesondere europäischen Aktivitäten zur Implementierung fortgeschrittener Reaktorkonzepte, wobei primär flüssigmetallgekühlte Systeme der Generation IV gemäß *Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems /GIF 14/* und der *European Sustainable Nuclear Industrial Initiative (ESNII) /ESNII/* im Fokus stehen.

2 Planung und Ablauf des Vorhabens

Aus den obigen Zielsetzungen und Aufgabenstellungen wurde die folgende grobe Projektstruktur für RS1547 mit insgesamt sechs Arbeitspaketen abgeleitet:

- **Arbeitspaket 1:** Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme
- **Arbeitspaket 2:** Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle
- **Arbeitspaket 3:** Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation
- **Arbeitspaket 4:** Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Zwei weitere Arbeitspakete widmen sich Fortführung und Abschluss zweier laufender EU-Projekte sowie der Mitwirkung an der Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP)-Initiative der IAEA:

- **Arbeitspaket 5:** Beteiligung an EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA
- **Arbeitspaket 6:** Mitwirkung am IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal

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

- (a) Die Arbeiten zur Entwicklung elektromagnetischer Pumpen in ATHLET 6.1 (AP 4.1) wurde durch den Beginn einer Ertüchtigung von ATHLET für die Sicherheitsbewertung des Generation-IV-Konzepts der Salzschnmelzreaktorsysteme (MSR, Molten Salt Reactor) ersetzt.
- (b) Die ursprünglich vorgesehene Beteiligung am Coordinated Research Project (CRP) der IAEA zu „Benchmark analysis of a MONJU turbine trip test“, welches während der Laufzeit dieses Vorhabens storniert wurde, wurde durch eine Teilnahme am IAEA-CRP „NEUTRONICS BENCHMARK OF CEFR START-UP TESTS (CRP-I31032)“ ersetzt.

2.1 Ausgangssituation zu Beginn des Vorhabens

In diesem Abschnitt wird die Ausgangssituation bei Beginn des Vorhabens RS1547 im Juni 2016 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.

2.1.1 Reaktorphysik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme einschließlich quellgetriebener unterkritischer Konzepte

Im Rahmen des vom BMWi geförderten Vorgänger-Forschungsvorhabens RS1515 wurde der Neutronenkinetikcode PARCS um die Möglichkeit der Simulation externer zeitabhängiger räumlicher Neutronenquellverteilungen erweitert /SEU 14a/, SEU 15a/. Im Gegensatz zu anderen Codes wie SAS4ADS (Kopplung des Thermohydraulikcodes SAS4 mit dem stationären Diffusionscode CITATION) oder den Kopplungen von DIF3D-K bzw. VARIANT mit SAS4A, bei denen Reaktivitätskoeffizienten und andere Größen der punktkinetischen Gleichungen mit stationären Neutronenkinetikprogrammen berechnet werden, erlaubt die Erweiterung von PARCS, die sich an Vorarbeiten zur direkten Simulation zeitabhängiger externer Neutronenquellverteilungen nach der S_N -Transportmethode in TORT-TD /SEU 09/ orientiert, eine direkte zeitabhängige Simulation quellgetriebener unterkritischer Systeme nach der Diffusionsnäherung. Mittels MCNPX wurde in Anlehnung an die MYRRHA-Spezifikation eine orts aufgelöste Spallationsquellverteilung in mehreren Energiegruppen berechnet und mit PARCS einfache Spallationsquelltransienten simuliert. Zur gekoppelten Simulation flüssigmetallgekühlter Systeme mit hexagonalen Brennelementanordnungen wurde ferner PARCS mit ATHLET /PER 13/ gekoppelt. Im Rahmen eines OECD/NEA-Benchmarks wurden 3D-Kernberechnungen für natriumgekühlte Reaktorkonzepte mittels HELIOS und PARCS durchgeführt /SEU 14b/. Darüber hinaus wurden erste Modelle zur räumlich aufgelösten Beschreibung thermo-struktureller Rückwirkungseffekte der Kerngitterplatte und axialer Brennstoff-/Hüllrohrausdehnung entwickelt /SEU 15b/ und in PARCS implementiert. Als Vorstufe hierzu wurden am Beispiel von mit eutektischer Blei-Wismut-Legierung gekühlten Systemen Untersuchungen zu Reaktivitätsrückwirkungseffekten durchgeführt /SEU 13a/, SEU 13b/. Ferner wurden deterministische 3D-Kernmodelle für MYRRHA für PARCS mit Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten entwickelt und mittels Serpent2 überprüft /BOU 16/.

2.1.2 Thermohydraulik schneller flüssigmetallgekühlter Systeme

Zu Beginn des Vorhabens verfügte ATHLET über die Fähigkeit, die flüssigen Metalle Natrium, Blei und LBE einphasig zu modellieren. Für die Berechnung des Wärmeübergangs zur Wand stehen geeignete Modelle zur Verfügung, die das Verhalten von Flüssigkeiten mit niedriger Prandtl-Zahl berücksichtigen. Neben den Flüssigmetallen können auch alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase, die als Polstergas in LMFR-Anlagen eingesetzt werden (z. B. Argon), modelliert werden. Dabei kann auch das Gemischspiegelmodell eingesetzt werden, das – wie in einem Poolreaktor – die Stoffe separiert, ohne dass künstlich ein zweiphasiger Übergangsbereich eingeführt werden müsste. Darüber hinaus kann auch zweiphasige Strömung simuliert werden, bei Blei und LBE allerdings nur mit den Phasen Flüssigmetall und Gas. Für Natrium kann mit Hilfe eines einfachen Modells das Sieden sowie die zweiphasige Strömung von flüssigem und gasförmigem Natrium (sowie Gas) simuliert werden.

Der GRS-Systemcode ATHLET kann mit den beiden CFD-Programmen ANSYS CFX und OpenFOAM gekoppelt werden. Im Rahmen des Projekts RS1515 wurde dabei ein erster Versuch an der TALL-Versuchsanlage mit Hilfe der gekoppelten Version von ATHLET-OpenFOAM simuliert. Im Rahmen des EU-Projekts THINS wurde dieser Versuch von der GRS auch mit der Kombination ATHLET-ANSYS CFX simuliert /PAP 15b/, BAN 15/. Mit beiden Simulationen konnte gezeigt werden, dass dreidimensionale Effekte analysiert werden konnten, die mit Systemcodes allein nicht dargestellt werden können /HEJ 14/.

2.1.3 Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation

Die GRS war an einer jüngst durchgeführten deutschen Verbundstudie mit dem Titel *Partitionierung und Transmutation – Forschung - Entwicklung - Gesellschaftliche Implikationen* der Deutschen Akademie der Technikwissenschaften /REN 14/ federführend für den Themenkomplex *Darstellung der Sicherheitsaspekte* beteiligt. Ziel dieser Studie war es, sowohl den Stand von Wissenschaft und Technik als auch das Potential sowie die Chancen und Risiken von P&T-Technologien detailliert herauszuarbeiten. Bei der in zwei Teilen angelegten Verbundstudie (Modul A, gefördert vom BMWi im Vorhaben RS1512 /SEU 13c/, und Modul B, gefördert vom BMBF) lieferte die GRS darüber hinaus Beiträge für Modul A zum Stand der Grundlagen- und technologischen Forschung sowie zu den Auswirkungen von Partitionierung und Transmutation auf Endlagerkonzepte und Langzeitsicherheit von Endlagern für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle, die zusammen mit der Darstellung der Sicherheitsaspekte in ihrer Gesamtheit in die Identifizierung von Deskriptoren und Indikatoren zur Szenarienbewertung eingeflossen sind.

2.1.4 Beteiligung an den EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA

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 potenziell wichtige unsichere Parameter identifiziert und quantifiziert.

3 AP 1: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

3.1 AP 1.1: Neutronenphysik der Void-Rückwirkung natriumgekühlter Systeme

In natriumgekühlten Reaktoren kann es unter Störfallbedingungen zum Sieden des Kühlmittels kommen, etwa infolge des Ausfalls der aktiven Kernkühlung beim Unprotected Loss Of Flow (ULOF). Natriumgekühlte Reaktoren sind andererseits sehr sensitiv gegenüber der neutronenphysikalischen Rückwirkung der Kühlmittelverdrängung (Voideffekt) infolge des Siedens, die sowohl positiv (im Kerninneren in den Spaltzonen) als auch negativ (in randnahen Bereichen, insbesondere im oberen Natriumplenum) sein kann. Für kleine oder negative Void-Rückwirkungen nutzen moderne Reaktorkonzepte Neutronen-Leckageeffekte. Die neutronenphysikalische Beschreibung erfordert daher eine genaue Berechnung lokaler Flussgradienten. Das durch Kühlmittelverdrängung entstehende Vakuum jedoch stellt die Gültigkeit der in 3D-Kernmodellen zur Sicherheitsbewertung natriumgekühlter Systeme weit verbreiteten Diffusionsnäherung in Frage, wodurch es zu Fehlern in gekoppelten neutronenkinetisch-thermohydraulischen Simulationen von Transienten und Störfällen mit Siedeereignissen kommen kann.

Zur Klärung der Frage, inwieweit die Diffusionsnäherung zur Beschreibung von Void-Zuständen in natriumgekühlten Reaktorkernen geeignet ist, wurden für das Reaktorkonzept ASTRID verschiedene Void-Szenarien betrachtet, entsprechende 3D-Kernberechnungen durchgeführt und die jeweiligen Ergebnisse mit Resultaten aus dem EU-Projekt ESNII+, die u. a. mit den Monte-Carlo-Codes MCNP6, KENO-VI und Serpent berechnet wurden, verglichen. Da bei PARCS in Einzelfällen Konvergenzprobleme festgestellt wurden, wurden die Berechnungen der verschiedenen Void-Zustände mit dem Finite-Elemente-Diffusionscode FEM-Diff-3d durchgeführt. Die Wirkungsquerschnitte wurden mittels HELIOS in einer für ASTRID optimierten 11-Gruppen-Struktur generiert, die kürzlich publiziert worden war /MAS 17/ und in Tab. 3.1 wiedergegeben ist.

Tab. 3.1 Verwendete optimierte 11-Gruppen-Struktur /MAS 17/

Gruppenindex	Untere Energiegrenze (eV)
1	2.02E+06
2	1.57E+06
3	8.21E+05
4	3.69E+05
5	1.83E+05
6	8.65E+04
7	4.09E+04
8	5.83E+02
9	1.59E+01
10	1.84E-01
11	1.00E-04

Insgesamt wurden die in Abb. 3.1 schematisch dargestellten acht verschiedene Void-Zustände des ASTRID-Kerns betrachtet. Gezeigt sind in einem axialen Schnitt durch den ASTRID-Kern die einzelnen Kernzonen, wobei die im jeweiligen Szenario als Void angenommenen Zonen farblich markiert sind. Die Zonen (Above IF) und (Above OF) entsprechen dabei dem oberen Natriumplenum. Aufgrund der erhöhten axialen Neutronenleckage bei Sieden im oberen Plenum sind für die Szenarien 1, 5 und 7 negative Reaktivitätsrückwirkungen zu erwarten.

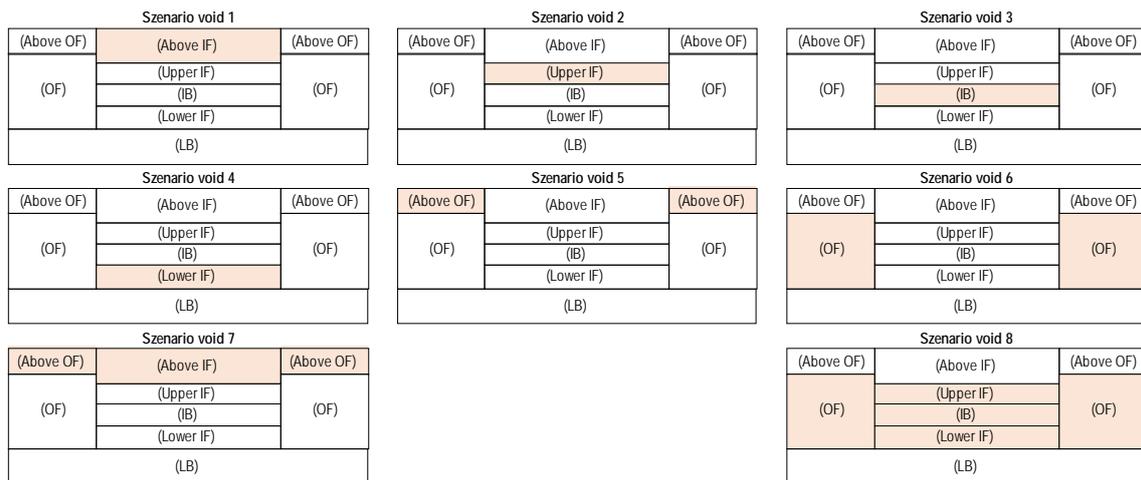


Abb. 3.1 Schematische Darstellung der untersuchten Void-Szenarien

IF = Inner core fissile, OF = Outer core fissile, IB = Inner core blanket, LB = Lower blanket zone

Die mit FEM-Diff-3d und unter Verwendung der mit HELIOS in obiger 11-Gruppen-Struktur generierten Wirkungsquerschnitte erzielten Ergebnisse für die verschiedenen Void-Szenarien sind in Tab. 3.2 dokumentiert. Darin sind in der dritten Spalte die ESNII-Referenzwerte für die Reaktivitätsänderungen der einzelnen Void-Szenarien gegenüber dem Nominalzustand des Kerns angegeben. Die entsprechenden, mit FEM-Diff-3d berechneten Reaktivitätsänderungen sind in der fünften Spalte eingetragen. Erwartungsgemäß liefern die Szenarien 1, 5 und 7 negative und die übrigen Szenarien positive Void-Reaktivitätseffekte. Ferner fällt auf, dass die Abweichungen der Void-Reaktivitätseffekte zwischen FEM-Diff-3d und den ESNII-Referenzergebnissen für alle Szenarien außer 1 und 7 unterhalb 100 pcm liegen (siehe sechste Spalte), für die Szenarien 1 und 7 jedoch über 300 pcm betragen. Da diese beiden Szenarien vollständiges Void im oberen Natriumplenum darstellen, kann dies als Hinweis auf die Grenzen der Gültigkeit der Diffusionsnäherung zur Simulation von Void-Zuständen betrachtet werden.

Tab. 3.2 Ergebnisse der betrachteten Void-Szenarien

Szenario	Von Voiding betroffene Zonen	$\Delta\rho$ (pcm) ESNII	$\Delta\rho$ (pcm) FEM-Diff-3d	Abweichung $\Delta\rho$ (pcm) zu ESNII
Void 1	(Above IF)	-1438	-1116	321
Void 2	(Upper IF)	462	468	6
Void 3	(IB)	346	336	-11
Void 4	(Lower IF)	218	190	-28
Void 5	(Above OF)	-275	-274	0
Void 6	(OF)	198	297	99
Void 7	(Above IF + Above OF)	-1687	-1333	354
Void 8	(Upper IF + IB + Lower IF + OF)	1231	1306	74

3.2 AP 1.2: Sicherheitsaspekte quellgetriebener unterkritischer Systeme

Die Kenntnis der räumlichen Verteilung externer zeitabhängiger Neutronenquellen und ihre Energieabhängigkeit ist für die Sicherheitsbewertung quellgetriebener unterkritischer Systeme (ADS) von großer Bedeutung. Zu diesem Zweck wurden mittels MCNPX unter Verwendung verschiedener in MCNPX verfügbarer Modelle für die Simulation der intranuklearen Kaskade, Gleichgewicht (pre-equilibrium) und Verdampfung (evaporation) Spallations-Neutronen-Verteilungen berechnet und hinsichtlich ihrer energetischen Spektren, der berechneten Neutronenausbeute je Proton und ihrer räumlichen Verteilung im Target verglichen. Um den Einfluss nuklearer Basisdaten zu untersuchen, wurden die Rechnungen sowohl mit MCNPX 2.5 als auch mit der neueren Version 2.7

durchgeführt und die Ergebnisse verglichen. Im Anschluss wurden die berechneten Spallationsneutronenquellverteilungen für den Einsatz PARCS transformiert, um transiente 3D-Kernberechnungen für eine unterkritische Konfiguration des MYRRHA-Kerns unter dem Einfluss eines Spallationsquellpulses durchzuführen. Dazu ist es notwendig, die Spallationsneutronenquellverteilung bezüglich der Energie in eine Wenig-Gruppen-Struktur (hier: 8 Energiegruppen) und bezüglich der räumlichen Abhängigkeit auf die axiale Diskretisierung des Targets in PARCS zu transformieren.

3.2.1 MCNPX-Modell des Spallationstargets

Abb. 3.2 zeigt das MCNPX-Modell des zentralen Spallationstarget-Kanals im Kern von MYRRHA. Rote Bereiche kennzeichnen das LBE-Kühlmittel, das gleichzeitig als Spallationstarget dient. Das Strahlrohr ist weiß dargestellt, in der axialen Darstellung links tritt der Protonenstrahl von oben kommend durch das Strahlrohr auf das Target. Die Neutronsplationsreaktionen finden im Bereich zwischen $z = 100$ cm und $z = 138$ cm statt.

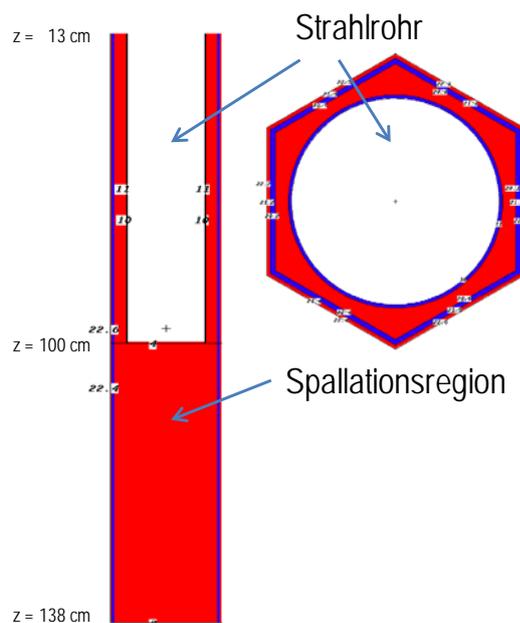


Abb. 3.2 MCNPX-Modell des Spallationstargets im Kern von MYRRHA

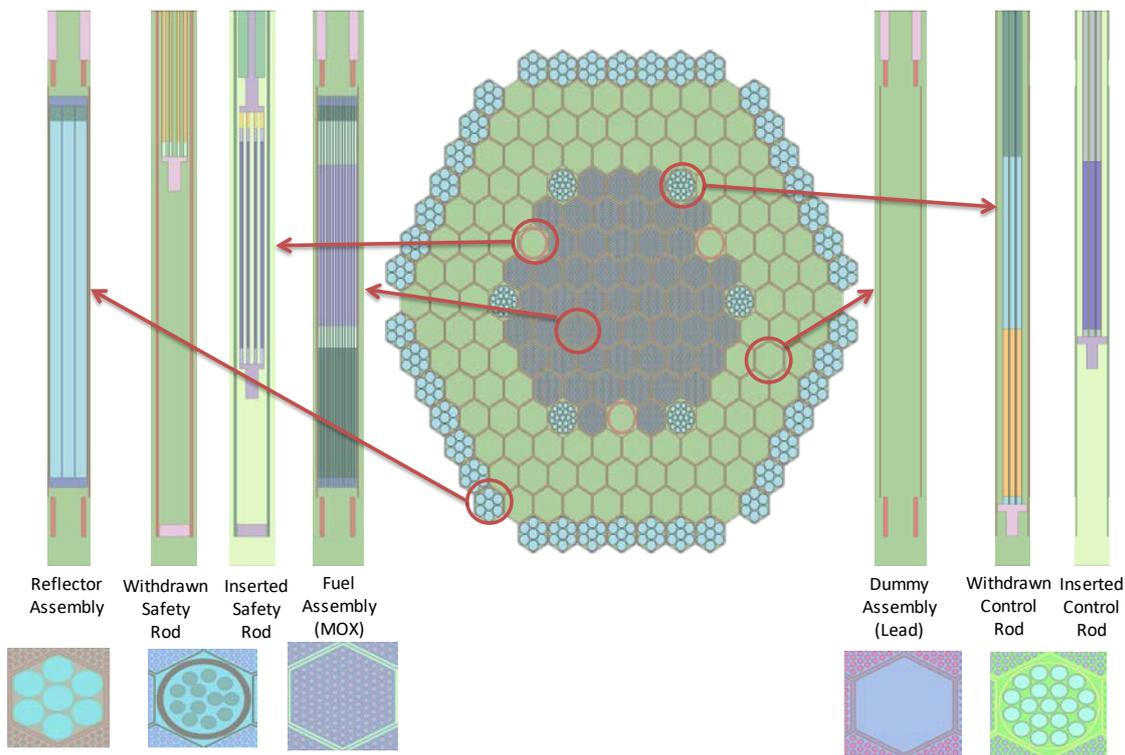


Abb. 3.3 Serpent-Modell des Kerns von MYRRHA /SEU 16/. Der zentrale Kanal enthält das Spallationstarget

3.2.2 Vergleich verschiedener Spaltungsmodelle von MCNPX

Zur Berechnung der Neutronenspaltungsreaktion werden in MCNPX der Transport von Neutronen, Protonen, Photonen und geladenen Pionen simuliert. Für die Simulation der Spaltungsreaktionen werden im Folgenden vier verschiedene Modelle in MCNPX verwendet und die Ergebnisse (Spaltungsneutronen-Energiespektren und Neutronenausbeuten je Proton) miteinander verglichen. Im ersten Modell wird das Modell LAHET für den Protonentransport verwendet, und Nukleon-Pion-Wechselwirkungen werden mittels LAHET und der intranuklearen Kaskadenmodell (INC = Intra Nuclear Cascade) nach Bertini simuliert. Im zweiten Modell erfolgt die Simulation von Neutronen, Protonen und Pionen nach dem CEM-Modell von MCNPX, welches ein eigenes Verdampfungsmodell (GEM) enthält. Im dritten Modell wird die Simulation der INC durch das INCL4-Modell in Verbindung mit Verdampfungsmodell ABLA vorgenommen. Das vierte Modell schließlich verwendet zur Simulation der Nukleon-Pion-Wechselwirkungen das Intranukleare-Kaskaden-Modell ISABEL.

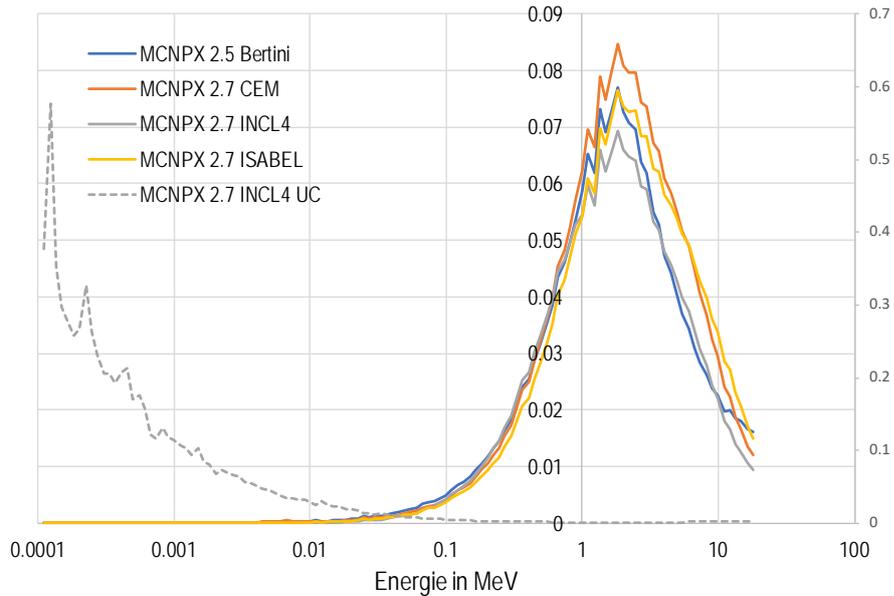


Abb. 3.4 Vergleich der Spallationsneutronenenergiespektren, berechnet mit verschiedenen Modellen und nuklearen Daten

Gestrichelte Linie: Statistische Unsicherheit am Beispiel des INCL4-Modells.

Abb. 3.4 zeigt die mit den verschiedenen Modellen berechneten Spallationsneutronen-Energiespektren. Die gestrichelte Linie gibt die statistische Unsicherheit als Funktion der Energie am Beispiel des INCL4-Modells an. Die Unterschiede resultieren sowohl aus den verschiedenen Spallationsmodellen als auch in unterschiedlichen nuklearen Daten (Versionen 2.5 und 2.7 von MCNPX) und manifestieren sich – wie weiter unten gezeigt werden wird – auch in der 3D-Neutronenkinetiksimulation eines Spallationsquellpulses mittels PARCS. Erwartungsgemäß unterscheiden sich auch die Neutronenausbeuten je Proton für die untersuchten MCNPX-Modelle, die zwischen 18,41 und 19,76 liegen (siehe Tab. 3.3). Bezieht man sich auf das INCL4-Modell, welches die niedrigste Ausbeute liefert, so liefert das CEM-Modell eine um mehr als 7 % höhere Ausbeute; die Modelle Bertini und ISABEL weichen mit 1,5 % bzw. 1,3 % geringfügiger vom INCL4-Modell ab. Angaben zur statistischen Unsicherheit bezüglich der Neutronenausbeute je Proton liefert MCNPX nicht explizit; eine obere Schranke für die relative statistische Unsicherheit der Ausbeuten ist durch den Kehrwert der Wurzel aus der Anzahl der simulierten Neutronenschicksale gegeben, der bei den hier simulierten 20.000 Schicksalen bei ca. 0,7 % liegt.

Tab. 3.3 Vergleich der Neutronenausbeute je Proton, berechnet mit verschiedenen Modellen und nuklearen Daten

Code und Modell	Neutronenausbeute je Proton	Rel. Abweichung bzgl. INCL4
MCNPX 2.5 Bertini	18.69	+ 1.5%
MCNPX 2.7 CEM	19.76	+ 7.3%
MCNPX 2.7 INCL4	18.41	--
MCNPX 2.7 ISABEL	18.64	+ 1.3%

3.2.3 Spallationsquellstärke-Verteilung im Target

Neben der Energieabhängigkeit ist die Bestimmung der räumlichen Verteilung der Spallationsneutronen im Target von Bedeutung, um die Simulation von Spallationsneutronenpulse seitens der 3D-Neutronenkinetik durchführen zu können. Dazu wurde in MCNPX das TMESH-Tally verwendet, welches eine räumlich und energetisch aufgelöste Auswertung des Neutronenflusses ermöglicht. Die räumliche Struktur entspricht dabei der axialen Diskretisierung des zentralen Targetkanals in PARCS, die Energieauflösung der in PARCS verwendeten 8-Energiegruppen-Struktur.

Die räumliche Verteilung der Spallationsneutronen-Quellstärke in axialer Richtung zeigt Abb. 3.5. Deutlich ist zu erkennen, dass die Spallationsneutronenquelle in einer Tiefe von etwa 23 cm am intensivsten ist; dahinter fällt sie steil ab. Wie die Unterschiede in den Neutronenausbeute je Proton erwarten lassen, variiert auch die Spallationsneutronenquellstärkeverteilung vom in MCNPX jeweils benutzten Spallationsmodell ab. Dies wird anhand der in Abb. 3.6 und Abb. 3.7 dargestellten Vergleiche deutlich.

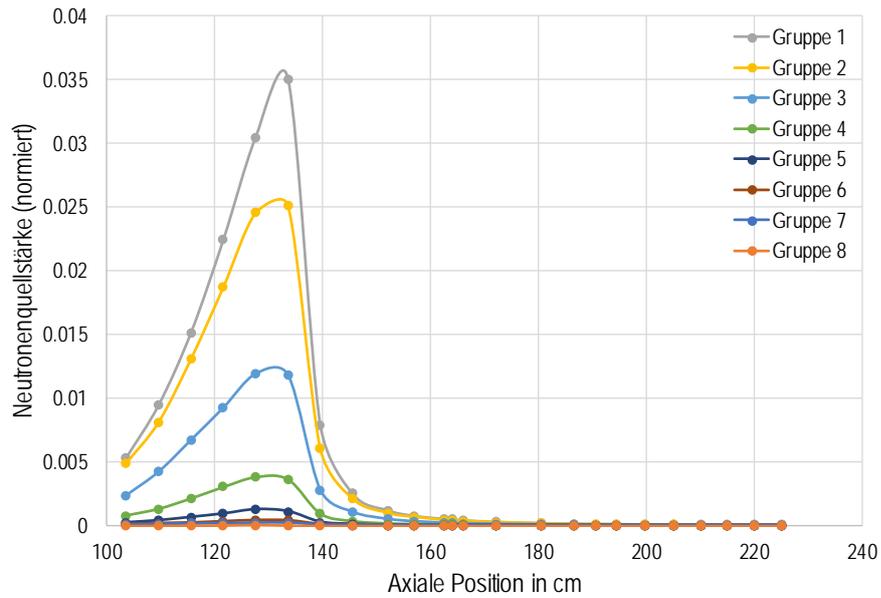


Abb. 3.5 Axiales Spallationsneutronen-Quellstärkeprofil in der 8-Energiegruppe Struktur für das MYRRHA-Target, simuliert mit MCNPX 2.7 CEM

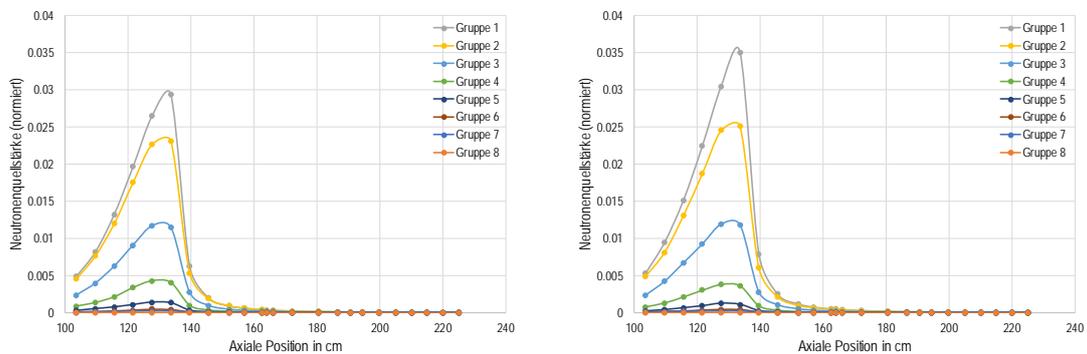


Abb. 3.6 Vergleich der axialen Spallationsneutronen-Quellstärkeprofile von MCNPX 2.5 (links) und MCNPX 2.7 CEM (rechts)

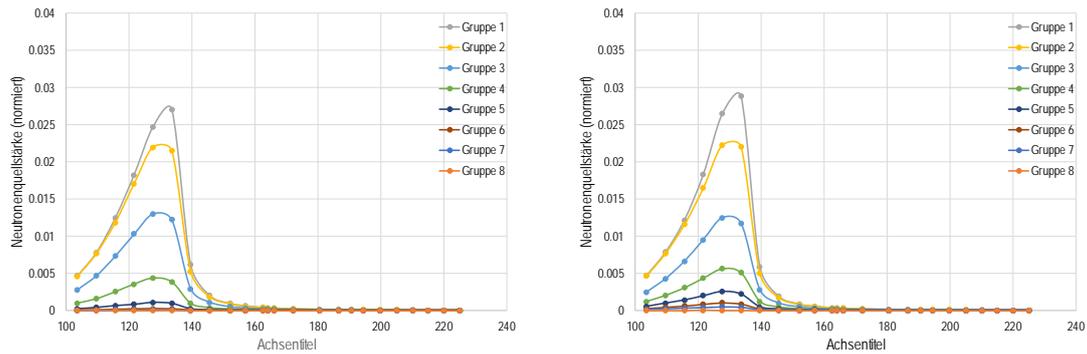


Abb. 3.7 Vergleich der axialen Spallationsneutronen-Quellstärkeprofile von MCNPX 2.7 INCL4 (links) und MCNPX 2.7 ISABEL (rechts)

3.2.4 Simulation eines Spallationsneutronenpulses mit PARCS

Die in acht Energiegruppen und in die axiale Diskretisierung des PARCS-Modells des MYRRHA-Kerns transformierten Spallationsneutronen-Quellverteilungen wurden dazu benutzt, 3D-Neutronenkinetiksimulationen eines 4,5 Sekunden dauernden, rechteckförmigen Spallationsneutronenpulses mit PARCS durchzuführen. Die Leistungsverläufe für die vier verschiedenen Spallationsneutronenquellverteilungen sind in Abb. 3.8 wiedergegeben. Die nach dem CEM-Modell berechnete Quellverteilung ergibt erwartungsgemäß das größte Leistungsmaximum, das INCL4-Modell führt zum geringsten Leistungsanstieg. Die relative Differenz zwischen den Leistungsmaxima von immerhin 12,9 % zeigt den Einfluss der Rechenmodelle, die zur Simulation der Spallationsprozesse eingesetzt werden.

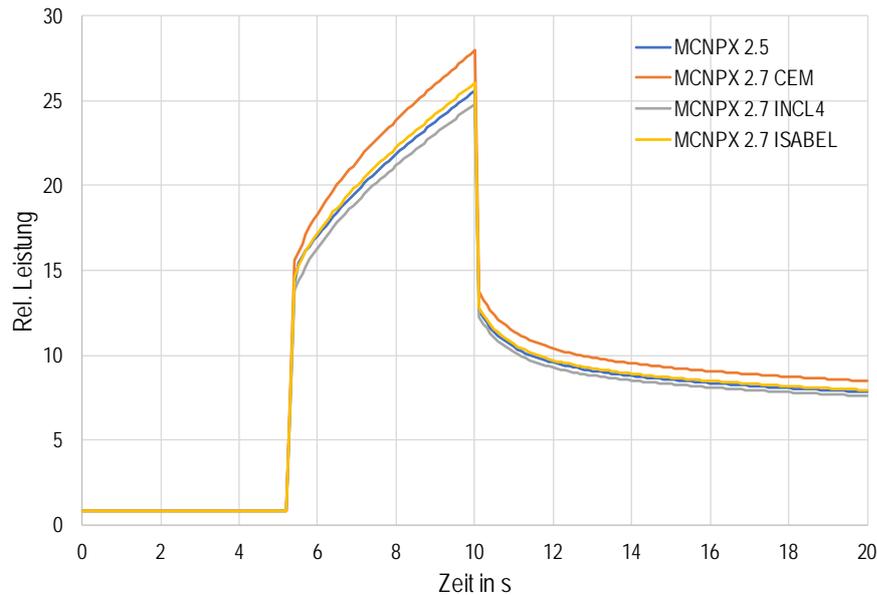


Abb. 3.8 Mit PARCS berechnete Leistungsverläufe als Antwort auf einen 5-sekündigen Spallationsquellpuls, generiert mit den verschiedenen MCNPX-Modellen

3.3 AP 1.3: Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung

Die Bewertung von Reaktivitätsstörfällen erfordert eine genaue Kenntnis der stabweisen (engl. Pin-by-pin-)Leistungsverteilung, um verlässliche Aussagen zu Sicherheitsmargen, Brennstabintegrität und Kernkühlbarkeit treffen zu können. Für die Sicherheitsbewertung von LWR existieren stabweise aufgelöste deterministische Rechenverfahren in der GRS nach der Diffusions- und Transportmethode, auch in Kopplung mit thermohydraulischen Unterkanalmodellen wie z. B. TORD-TD/COBRA-TF /CHR 10/ oder QUABOX-CUBBOX/COBRA-TF /PER 10/. Diese Rechenverfahren sind jedoch nicht direkt verwendbar für natriumgekühlte schnelle Systeme, da die Natriumeigenschaften nicht in COBRA-TF /AVR 16/ implementiert sind und TORD-TD /SEU 08/ und QUABOX-CUBBOX /LAN 77/ keine hexagonalen Kernanordnungen behandeln können. Die aktuellen Rechenverfahren in der GRS für schnelle Systeme bestehen aus den gekoppelten nodalen 3D-Codesystemen ATHLET31/PARCS /BOU 18/ und ATHLET31/DYN3D-MG /IVA 18/. Derart brennelementweise durchgeführte Simulationen liefern nur brennelementgemittelte Werte. Da die Sicherheitsparameter jedoch lokale Größen sind, sind stab- bzw. unterkanalweise Rechnungen anzustreben. Außerdem gibt es Hinweise da-

rauf, dass ein signifikanter Anteil des Brennelement-Kühlmittelstroms Rand- und Eckbereiche des Brennelements durchsetzt und somit zu einem ausgeprägten radialen Temperaturprofil und in der Folge zu lokalem Voiding führen kann.

3.3.1 Modellentwicklung

Zur Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung wurde folgender Testfall definiert, mit Serpent, PARCS und ATHLET modelliert und mit PARCS/ATHLET simuliert. Er besteht aus einem einzelnen Brennelement (mit SA1 bezeichnet) im unendlichen Gitter aus dem ASTRID-Kern (siehe Abb. 3.9 links; weitere Details siehe Abschnitt 3.5). In PARCS wird dieses Brennelement unter Verwendung des TPEN-Solvers als Mini-Kern gebaut: Jeder Stab ist als hexagonale Zelle mit Vakuum-Rahmbedingungen in axialer Richtung modelliert, wie in siehe Abb. 3.9 rechts gezeigt. Radial herrschen reflektierende Randbedingungen. Limitierungen der Modellierung von PARCS für hexagonale Geometrie erzwingen die Benutzung eines regelmäßigen hexagonalen Gitters. Diese Näherung ist jedoch fraglich bezüglich der Stäbe, die am Rand des Brennelements liegen (rote Zellen in Abb. 3.9) und zugleich Brennelementkasten und Kühlmittelspalt zum Nachbarbrennelement abbilden, da auf diese Weise keine Änderung der Spaltbreite möglich sind.

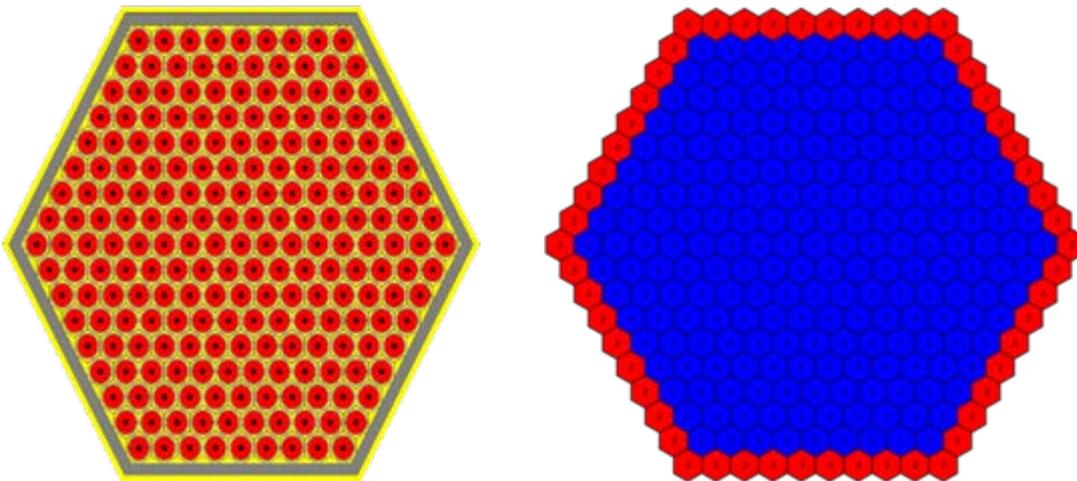


Abb. 3.9 Querschnitte stabweisen Modell eines ASTRID Brennelements in Serpent (links) und PARCS (rechts)

Parametrisierte Wirkungsquerschnitte wurden für jede Stabzelle mit einem 3D-Modell des Brennelements mit dem Monte-Carlo Code Serpent /LEP 15/ erzeugt. Näheres hierzu ist in Abschnitt 3.4.2 beschrieben. Das SFR-Modul von KMACS erzeugt in Verbindung mit definierten thermischen Ausdehnungskorrelationen anhand vorgegebener Materialtemperaturen automatisch Serpent-Eingabedatensätze, die die jeweiligen temperaturabhängigen Materialdichten und geometrischen Abmessungen beschreiben. Ebenso werden ATHLET-Eingabedatensätze für ein Brennelement mit einem (stabzentrierten) thermalhydraulischen Kanal pro Stab modelliert. Alle Kanäle sind oben und unten mit Branch-Objekten verbunden (s. Bezeichnungen INLET und OULET in Abb. 3.10). Wärme- und Massenaustausch sind durch Querverbindungen (Cross-Connection-Objekte) in ATHLET (s. Abb. 3.10) dargestellt. Die Nutzung des neuen Toolkits NuT /STE 18/ in ATHLET ist erforderlich, um ATHLET auszuführen.

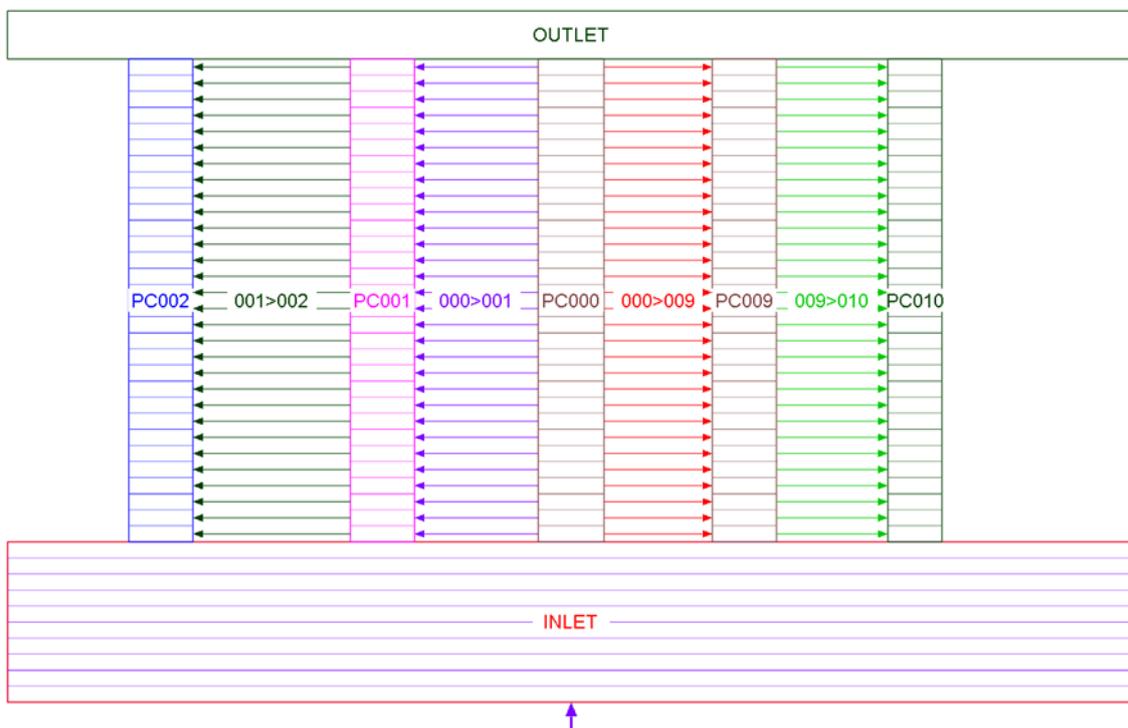


Abb. 3.10 Stabweises ATHLET-Modell mit Querverbindungen eines ASTRID Brennelements

3.3.2 Gekoppelte stationäre PARCS/ATHLET-Simulationen

Radiale Leistungsverteilung

Zunächst wurde eine Referenzrechnung des Brennelements mit Serpent zum nominalen Zustand (d. h. Kühlmitteltemperatur 748 K, Brennstofftemperatur 1.500 K) und mit reflektiven Randbedingungen in radialer Richtung und Vakuum-Randbedingungen in axialer Richtung durchgeführt. Abb. 3.11 zeigt die so erhaltene, auf 1 normierte radiale Leistungsverteilung. Infolge des Gitters aus identischen Stäben und der reflektierenden Randbedingungen ist sie sehr flach: die Abweichung von 1 liegt bei unter 0.3 %. Die nicht ideal symmetrische Verteilung ist auf die verbleibenden statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo-Simulation und auf die Tatsache zurückzuführen, dass die Ergebnisse mit drei Nachkommastellen dargestellt werden. Die Darstellung der Ergebnisse mit nur zwei Dezimalstellen würde überall 1.00 zeigen.

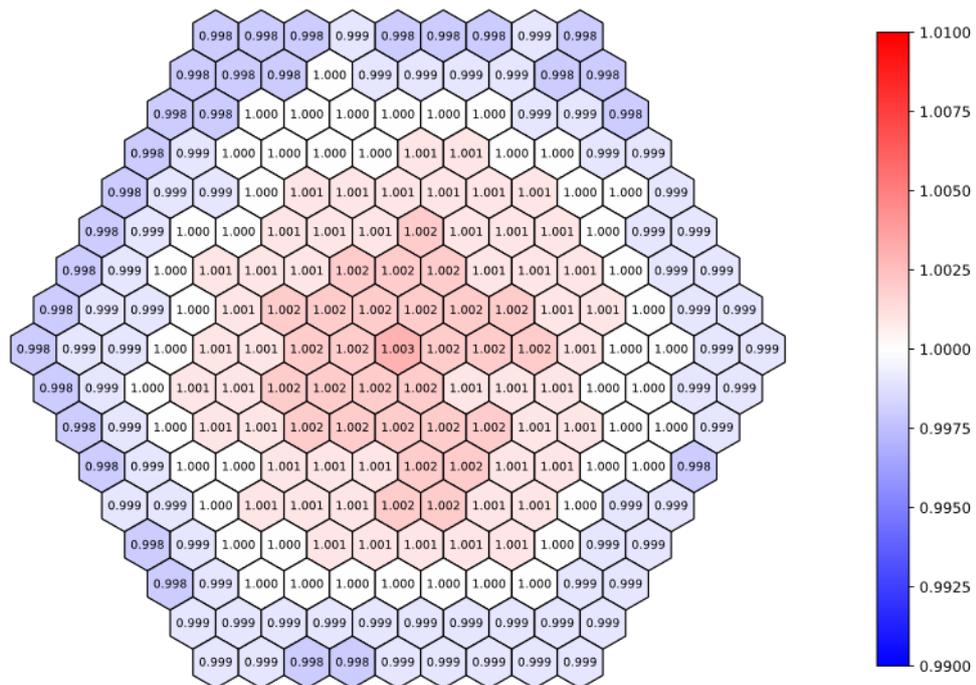


Abb. 3.11 Mit Serpent berechnete radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements

Im zweiten Schritt wurde ein PARCS-Standalone-Modell mit den mit Serpent generierten Wirkungsquerschnitten entwickelt. Der Zweck dieses Schrittes ist die Erprobung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek durch Vergleich mit dem oben beschriebenen Serpent-Referenzmodell. Abb. 3.12 zeigt die mit PARCS berechnete radiale Leistungsverteilung. Wie zu erwarten, ist die Leistungsverteilung sehr flach, die Abweichung zu 1 liegt bei unter 0.4 %. Das zeigt, dass das PARCS-Modell und die Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten prinzipiell korrekt sind.

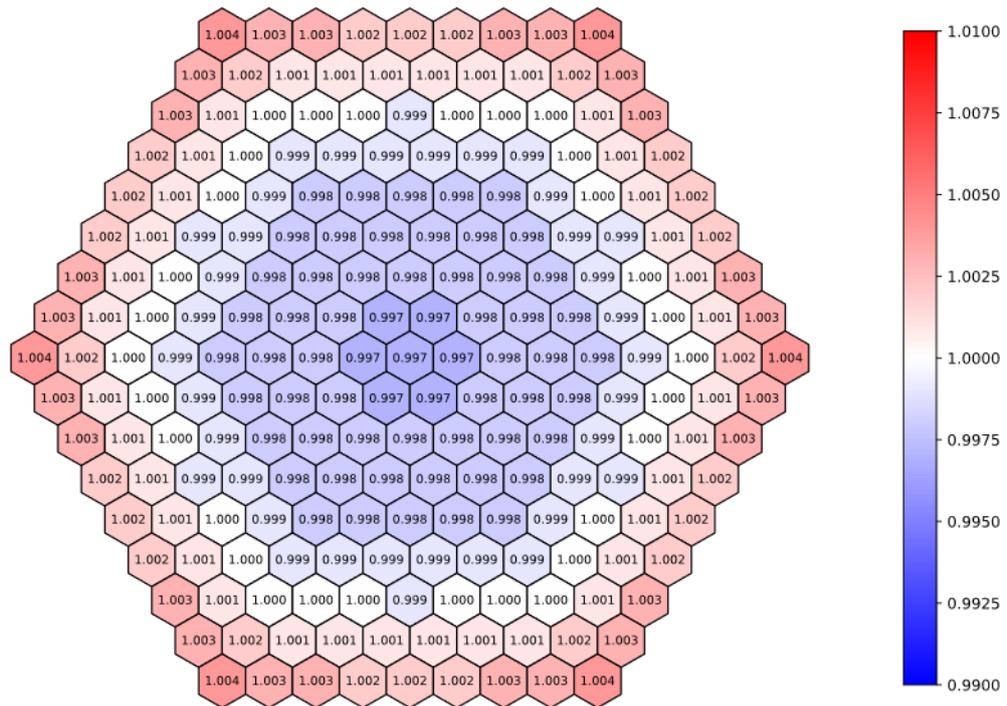


Abb. 3.12 Mit PARCS berechnete radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements

Im dritten und letzten Schritt wurden gekoppelte PARCS/ATHLET-Simulationen des stationären Zustands durchgeführt. Ziel ist es, die thermohydraulischen Rückwirkungen zu erfassen und so eine Vorstellung von den Temperaturverteilungen innerhalb eines Brennelements zu erhalten. Abb. 3.13 zeigt die mit PARCS/ATHLET berechnete, normierte stationäre radiale Stab-Leistungsverteilung im Brennelement, welche wiederum sehr flach ausfällt.

Neben der Leistungsverteilung ist die stabweise Brennstofftemperaturverteilung von Interesse. Abb. 3.14 zeigt die mit PARCS/ATHLET berechnete stationäre radiale Brennstofftemperaturverteilung in jener axialen Position im Brennelement, an der die Temperatur ihren Maximalwert erreicht („upper fissile zone“). Für nicht am Rand liegende Stäbe unterscheiden sich die Stabtemperaturen mit Werten zwischen 1.733 °C und 1.735 °C nur geringfügig. Dagegen ist die Brennstofftemperatur für Stäbe, die am Rand und an den Ecken des Brennelements liegen, mit ca. 1.597 °C (Randstäbe) und 1.511 °C (Eckstäbe) deutlich niedriger. Dieser Umstand ist der besseren Kühlung der Rand- und Eckstäbe infolge der dort – im Gegensatz zu den innenliegenden Stäben – größeren Strömungsquerschnitte geschuldet. Die Brennstofftemperaturen der Rand- und Eckstäbe liegen somit ca. 8 % bzw. 13 % unterhalb derjenigen der innenliegenden Stäbe. Die radiale Temperaturabhängigkeit fällt für Brennelemente im unendlichen Gitter somit relativ moderat aus. Es ist jedoch zu erwarten, dass für heterogene Kernanordnungen größere Variationen der stabweisen Leistungs- und Brennstofftemperaturverteilungen auftreten. Dies kann in zukünftigen Untersuchungen z. B. anhand von Minikernanordnungen studiert werden.

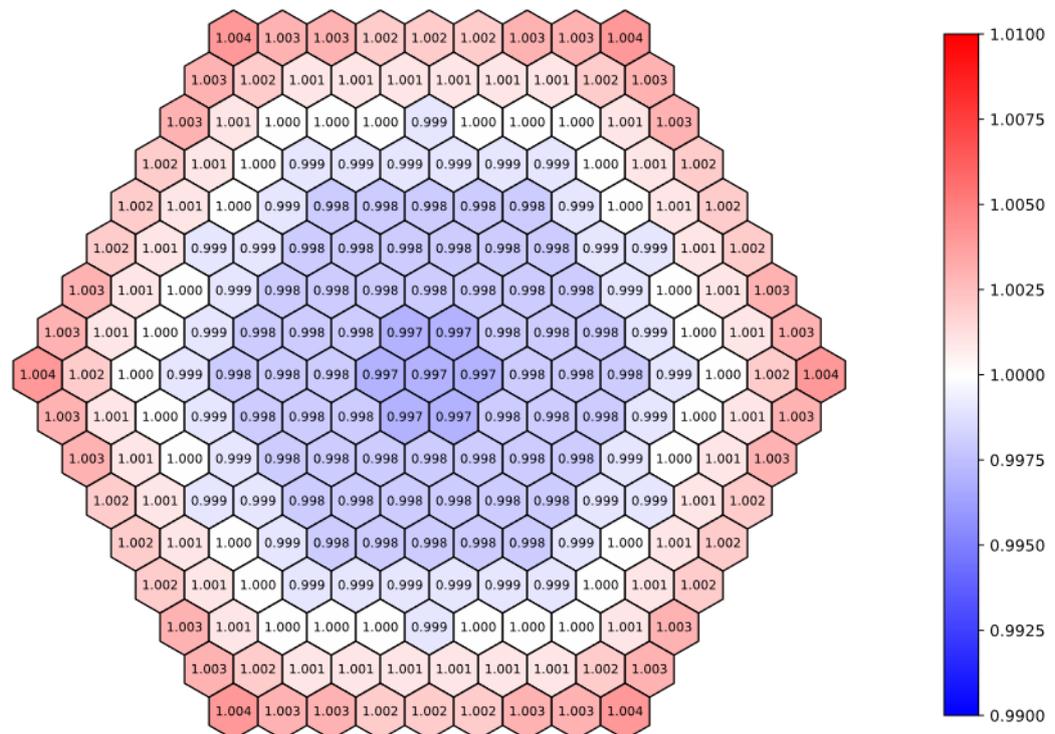


Abb. 3.13 Mit PARCS/ATHLET berechnete stationäre radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements

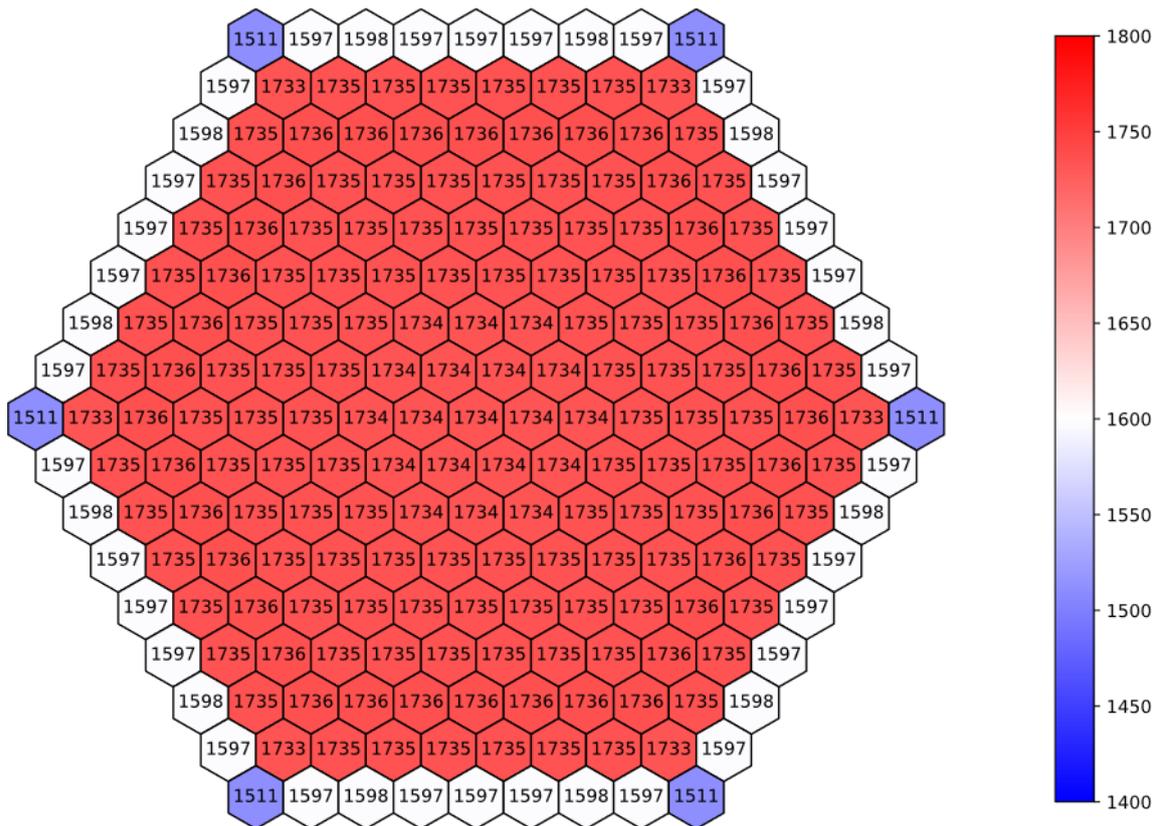


Abb. 3.14 Mit PARCS/ATHLET berechnete stationäre radiale Brennstofftemperaturverteilung (°C) des ASTRID-Brennelements

3.4 AP 1.4: Erstellung von Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken

3.4.1 Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für ASTRID

Für die Erstellung von Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für schnelle System hat sich der Monte-Carlo Transport Code Serpent /LEP 15/ etabliert (siehe z. B. /FRI 13/). Gegenüber deterministischen 2D-Lattice-Codes wie NEWT aus dem SCALE-Paket /REA 17/ oder HELIOS /WEM 08/, welche in erster Linie für Leichtwasserreaktoren angepasste Multigruppen-Daten auf Basis der ENDF-B-VII-Bibliothek verwenden, bietet Serpent den Vorteil, dass er – wie jede Monte-Carlo-Methode – nukleare Punktdaten verschiedener Evaluationen (z. B. ENDF-B-VII.0 oder JEFF-3.1.1) nutzen kann und darüber hinaus die detailgetreue geometrische Modellierung auch in drei Dimensionen ermöglicht. Zudem erlaubt die Recheneffizienz von Serpent in zunehmendem Maße auch die Erstellung parametrisierter Wirkungsquerschnittsbibliotheken.

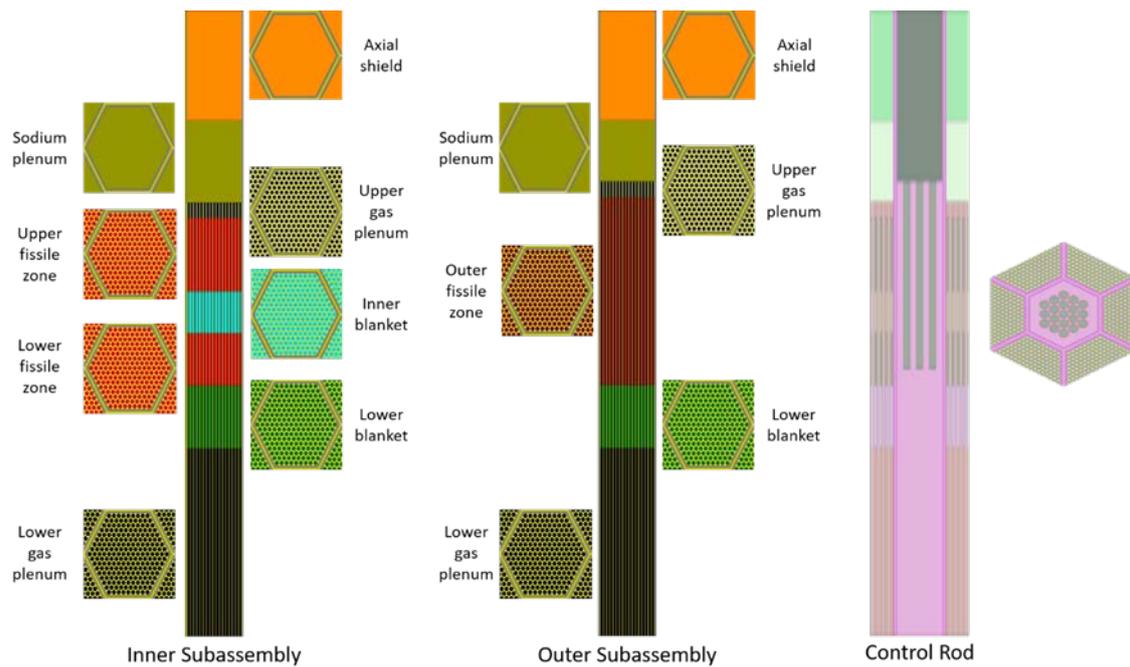


Abb. 3.15 Serpent-3D-Modelle verschiedener Brennelemente und eines Steuerelements (rechts) für die Erstellung von Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Die hier beschriebenen Ansätze für die Erstellung von Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken bestehen aus 3D-Modellen ganzer Brennelemente (s. Abb. 3.15), wobei in radialer Richtung ein unendliches Gitter (reflektierende Randbedingungen) und in axialer Richtung Vakuum-Randbedingungen angenommen werden. Der Vorteil solcher 3D-Modelle besteht darin, den Einfluss benachbarter axialer Bereiche für die Berechnung des Neutronenflusses und damit für den Homogenisierungsprozess über eine bestimmte axiale Zone berücksichtigen zu können. Für andere Elemente, wie z. B. Reflektor- oder Steuerelemente, werden Superzellmodelle verwendet. Sie bestehen aus dem betrachteten Element selbst und an den sechs Seitenflächen angeschlossenen jeweils halben Brennelementen. Tab. 3.4 zeigt die 12-Energiegruppen-Struktur, die für die Wirkungsquerschnittskondensation verwendet wurde.

Tab. 3.4 12-Energiegruppen-Struktur

Index	Obere Energiegrenze (MeV)	Index	Obere Energiegrenze (MeV)	Index	Obere Energiegrenze (MeV)
1	2.00E+01	5	3.02E-01	9	5.53E-03
2	6.07E+00	6	1.11E-01	10	2.03E-03
3	2.23E+00	7	4.09E-02	11	7.49E-04
4	8.21E-01	8	1.50E-02	12	1.49E-04

Die Eingabedatensätze für Serpent wurden bis jetzt per Hand erstellt. Dies ist bei schnellen Reaktorsystemen sehr aufwendig und fehleranfällig, da nicht nur die Materialdichten, sondern auch die geometrischen Abmessungen von den Temperaturen der jeweiligen Strukturen abhängen und gemäß den spezifischen thermischen Ausdehnungsgesetzen angepasst werden müssen. Zur Automatisierung wurde daher der ursprünglich für LWR entwickelte Kernsimulator KMACS /ZIL 18/ verwendet und für die Generierung von Wirkungsquerschnittsdaten für schnelle Reaktorsysteme mittels Serpent erweitert. Mit dieser erweiterten KMACS-Version kann der Benutzer Serpent-Eingabedatensätze automatisiert erstellen und den Code Serpent ausführen. Dazu wurden neuen Python-Module entwickelt. In einem ersten Schritt wurde ein Python-Module für die Erzeugung der Serpent-Eingabedatensätze erstellt. Dieses Modul benutzt Eingangsdaten zu Brennelementtyp und Materialzusammensetzung, um daraus die Geometrie und Materialbeschreibung für den Serpent-Eingabedatensatz zu generieren. Ein weiteres Modul berechnet für vorgegebene Werte von Brennstoff-, Kühlmittel- und die Hüllrohrtemperatur die zugehörigen geometrischen Abmessungen und liefert so Geometrie und Massendichte für alle benötigten Materialzusammensetzungen. Der KMACS-Eingabedatensatz wurde so erweitert, dass natriumgekühlte Reaktorsysteme mitsamt ihren materialspezifischen Ausdehnungskorrelationen berücksichtigt werden können. Dazu wurden Datenstrukturen für hexagonale Geometrien und die Brennelementkästen (Wrapper) entwickelt (siehe Abb. 3.16, in der das neue Schlüsselwort „wrapper“ grau markiert und zusätzlich das Layout der hexagonalen Geometrie dargestellt ist).

„kalten“ Geometrie. Dazu wird jeder Materialzusammensetzung *composition* das neue Schlüsselwort *expansionLaw* zugeordnet, welches folgende Parameter enthält:

- *temperature0* ist die (Referenz-)Temperatur der „kalten“ Geometrie
- *unit* ist die Einheit der Temperatur (K oder °C)
- C1 bis C4 sind die Polynomentwicklungskoeffizienten
- *temperature* gibt den Materialtyp (entweder fuel, coolant oder cladding) an, dessen Temperatur für die Berechnung der thermischen Ausdehnung verwendet werden soll.
- *axial*: Angabe der *composition*, deren Ausdehnungskorrelation zur Berechnung der thermischen Ausdehnung in axialer Richtung zu verwenden ist
- *radial*: analog zu *axial*, jedoch für radiale Ausdehnung

```
compositions:  
  UOX1:  
    type: atomsPerBarnCm  
    expansionLaw:  
      temperature0: 20. #degC  
      unit: degC  
      C1: 1.059262154E-05  
      C2: -1.271166281E-10  
      C3: 4.926011714E-13  
      C4: 1.631283749E-16  
      temperature: fuel  
      axial: UOX1  
      radial: UOX2  
    components:  
      O-16      : 4.66619E-02  
      U-235     : 3.65859E-05  
      U-236     : 2.76465E-06  
      U-238     : 2.26420E-02
```

Abb. 3.17 Beispiele für die composition-Angabe. In grau stehen die neuen Kennwörter

Über das zusätzliche Schlüsselwort *thExpModel* im Datensatz *assemblyTypes* (s. Abb. 3.18) kann die thermische Ausdehnung jeder einzelnen axialen Zone gesteuert werden, wobei einzelne Materialgrenzen auch fixiert werden können.

```

assemblyTypes:
  SA1:
    materials: [ GAS1o1, IZLB1, IZLF1, IZIB1, IZUF1, GASup1, SPL1, ASHLD1]
    assemblies: ['SA1']
    #required for SFR
    axialLayout: [ 90.0, 30.0, 25.0, 20.0, 35.0, 7.5, 40.0, 52.5]
    thExpModel:
      axialMatExpLaw: [ AIMclad, AIMclad, AIMclad, AIMclad, AIMclad, AIMclad, plenum, AIMclad]
      axialTempExpLaw: [cladding, cladding, cladding, cladding, cladding, cladding, cladding, cladding]
      globalExpLaw: #Optional but needed if there is a plenum
      composition: EMwrap
      temperature: cladding

```

Abb. 3.18 Beispiele für Angaben zu assemblyTypes. In grau stehen die neuen Kennwörter

Die mit Serpent generierten Wirkungsquerschnitte wurden nach der Dopplertemperatur, der Kühlmitteldichte, der Hüllrohrtemperatur und der Gitterweite der Kernbrennelementanordnung (siehe auch 4.1, AP 2.1) parametrisiert. Jede Serpent-Rechnung wird für ASTRID und SPX mit der JEFF-3.1.1-Bibliothek durchgeführt. 4.000 aktive Zyklen (100 inaktive) mit 200.000 Neutronenschicksalen pro Zyklus wurden verwendet, damit die statistische Unsicherheit des Multiplikationsfaktor unterhalb von 3 pcm ist.

Methode der Superhomogenisierung

Die Diffusionsnäherung der Neutronentransportgleichung ist insbesondere für Steuerelemente in Frage zu stellen. Ungeachtet des Vorteils der vorgenannten 3D-Modellierung ganzer Brenn- und Steuerelemente in Serpent zur Generierung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten unter Verwendung der realistischen axialen Neutronenflussverteilung, werden größere Abweichungen bzgl. des Multiplikationsfaktors für PARCS-Ganzkernberechnungen im Vergleich zu Serpent-Ganzkernsimulationen festgestellt, wenn Zustände mit eingefahrenen Steuerstäben betrachtet werden /BOU 16/, /BOU 17/. Die sogenannte Superhomogenisierungsmethode (kurz: SPH-)Methode ist ein bewährtes Verfahren zur Kompensation solcher Homogenisierungsfehler /NIK 15/, /LEM 12/, /RAC 17/. Das Ziel dieser Methode ist, die Reaktionsrate einer heterogenen (Monte-Carlo-)Referenzlösung in der deterministischen Diffusionsberechnung zu erhalten /HEB 92/. Der SPH-Algorithmus wurde implementiert, um SPH-korrigierte Wirkungsquerschnitte mit DYN3D zu berechnen.

Es besteht aus den folgenden Schritten:

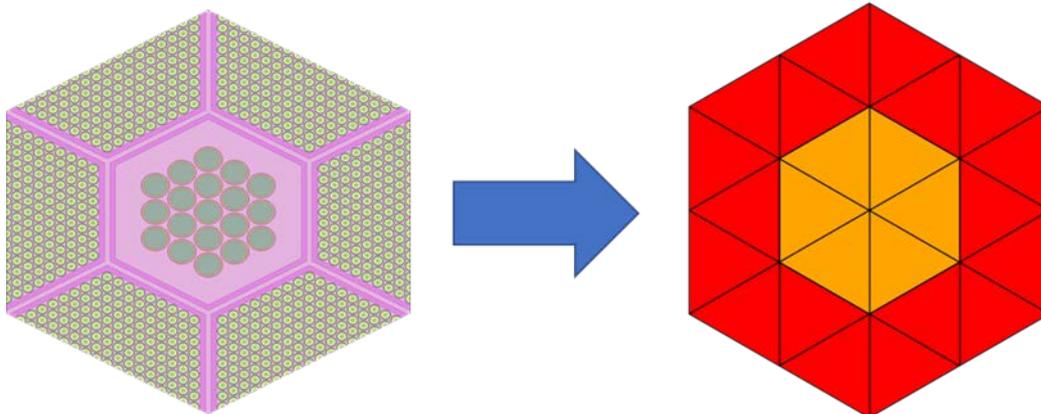


Abb. 3.19 Superzell-Modelle für die SPH-Methode. Links: Serpent-Referenzmodell, rechts: homogenisiertes DYN3D-Modell

- Mit dem 2D-Superzell-Modell in Serpent werden die Wirkungsquerschnitte und Flüsse einerseits über die Bereiche der sechs halben Brennelemente und andererseits über das zentrale Steuer- oder Reflektorelement (s. Abb. 3.19, links) homogenisiert. Dies stellt die Referenzlösung dar.
- Das 2D-Superzell-Modell wird mit DYN3D nachgebildet. Zu diesem Zweck wird der trigonale Diffusionssolver von DYN3D verwendet, dessen reguläre Dreiecke die äquivalente, jedoch homogenisierte Geometrie darstellen (s. Abb. 3.19, rechts).
- Aufgrund von Homogenisierungsfehlern weicht nun die DYN3D-Lösung von der Serpent-Referenz ab. Um diese Abweichung zu minimieren, werden SPH-Faktoren μ_g iterativ folgendermaßen bestimmt:

$$\mu_g = \frac{\phi_g^{Serpent}}{\phi_g^{DYN3D}} \times N_g \quad (3.2)$$

wo N_g ein Normalisierungsfaktor ist:

$$N_g = \frac{3 \times \phi_{g, Brennstoff}^{DYN3D} + 1 \times \phi_{g, nicht-Brennstoff}^{DYN3D}}{3 \times \phi_{g, Brennstoff}^{Serpent} + 1 \times \phi_{g, nicht-Brennstoff}^{Serpent}} \quad (3.3)$$

- Jeder Wirkungsquerschnitt wird für jede Bereich und Energiegruppe mit dem entsprechenden SPH-Faktor multipliziert. Das Zwei-Regionen-Superzell-Diffusionsproblem wird durch den DYN3D-Code unter Verwendung der SPH-korrigierten Wirkungsquerschnitte wieder gelöst. Die erhaltenen homogenen Neutronenflüsse werden zur Berechnung eines neuen Satzes von SPH-Faktoren verwendet. Dieser iterative Prozess wird beendet, sobald das Konvergenzkriterium für jeden Bereich b und jede Energiegruppe g erfüllt ist:

$$\max \left(\left| \frac{\mu_{b,g}^n}{\mu_{b,g}^{n-1}} - 1 \right| \right) < 10^{-6} \quad (3.4)$$

Parametrisierung der Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Tab. 3.5 Thermohydraulische Rückwirkungsgrößen (Spalten) und jeweilige Stützstellen (Zeilen)

	T_{Brennstoff} (°C)	T_{Kühlmittel} (°C)	T_{Hüllrohr} (°C)	Gitterweite (cm)	Void fraction (-)
1	300	370	370	17.58	0
2	900	680	680	17.61	0.5
3	1200	1000	1000	17.88	1
4	1500	–	–	–	–
5	1800	–	–	–	–
6	2500	–	–	–	–
7	3000	–	–	–	–

Tab. 3.6 Radiale Pelletabmessungen als Funktion der Brennstofftemperatur

	T_{Brennstoff} (K)	Pellet-Lochradius (cm)	Pellet-Außenradius (cm)
1	300	0.1103	0.4238
2	900	0.1110	0.4265
3	1200	0.1114	0.4279
4	1500	0.1118	0.4294
5	1800	0.1122	0.4310
6	2500	0.1133	0.4352
7	3000	0.1143	0.4389

Tab. 3.7 Hüllrohrabmessungen und Stabgitterweite als Funktion der Hüllrohrtemperatur

	THüllrohr (°C)	Hüllrohrinnenradius (cm)	Hüllrohraußenradius (cm)	Stabgitterweite (cm)	Innenradius oberes Gasplenum (cm)
1	370	0.1103	0.4238	1.0863	0.3571
2	680	0.1110	0.4265	1.0919	0.3589
3	1000	0.1114	0.4279	1.0989	0.3612

Tab. 3.8 Halber Spalt zwischen zwei Brennelementkästen als Funktion der Kerngitterplattentemperatur

	Brennelementgitterweite (cm)	TKerngitterplatte (°C)	Halber Brennelement-Zwischenraum (cm)
1	17.58	300	0.2214
2	17.61	400	0.2367
3	17.88	1200	0.3697

3.4.2 Stabzellweise homogenisierte parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken für ASTRID

Zur Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung (vgl. 3.3, AP 1.3) wurden für ASTRID parametrisierte Wirkungsquerschnitte für jede Stabzelle mit einem 3D-Modell des Brennelements mit dem Monte-Carlo Code Serpent /LEP 15/ erzeugt. Dazu wurde ein besonderer Entwicklungs-Branch (genannte SFR-Branch) des GRS-Kernsimulators KMACS für natriumgekühlte schnelle Systeme verwendet. Er besteht in einer automatischen Generierung von Serpent-Eingabedatensätzen für die Erstellung der nach Temperaturen und temperaturabhängigen geometrischen Abmessungen parametrisierten stabzellweise homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken. Die benutzte mikroskopisch Wirkungsquerschnittsbibliothek ist JEFF-3.1.1.

3.4.3 Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für Superphénix

Superphénix (SPX) ist ein natriumgekühlter Reaktor mit 2990 MW thermischer Leistung, der zwischen 1985 und 1997 in Creys-Malville (Frankreich) betrieben wurde /GOU 90/, /VAN 90/. In dieser Zeit wurden zahlreiche Experimente und Messungen zu den physikalischen Eigenschaften des Kerns wie Reaktionsratenverteilungen und Rückkoeffizienten durchgeführt und dokumentiert, die zur Validierung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung natriumgekühlter Systeme herangezogen werden können. Im Rahmen des ESFR-SMART-EU-Projekts /MIK 17/ wurde ein Benchmark auf der Grundlage des Reaktorkerns und der Messdaten von Superphénix veröffentlicht /PON 18/. Abb. 3.20 zeigt den Kern des SPX-Reaktors, der aus einer hexagonalen Brennelementanordnung mit einer nominalen Gitterweite von 17,9 cm besteht. Sämtliche Daten zu Geometrie und Materialien sind der Benchmark-Spezifikation /PON 18/ zu entnehmen.

3.4.4 Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für Superphénix

Superphénix (SPX) ist ein natriumgekühlter Reaktor mit 2990 MW thermischer Leistung, der zwischen 1985 und 1997 in Creys-Malville (Frankreich) betrieben wurde /GOU 90/, /VAN 90/. In dieser Zeit wurden zahlreiche Experimente und Messungen zu den physikalischen Eigenschaften des Kerns wie Reaktionsratenverteilungen und Rückkoeffizienten durchgeführt und dokumentiert, die zur Validierung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung natriumgekühlter Systeme herangezogen werden

können. Im Rahmen des ESFR-SMART-EU-Projekts /MIK 17/ wurde ein Benchmark auf der Grundlage des Reaktorkerns und der Messdaten von Superphénix veröffentlicht /PON 18/. Abb. 3.20 zeigt den Kern des SPX-Reaktors, der aus einer hexagonalen Brennelementanordnung mit einer nominalen Gitterweite von 17,9 cm besteht. Sämtliche Daten zu Geometrie und Materialien sind der Benchmark-Spezifikation /PON 18/ zu entnehmen.

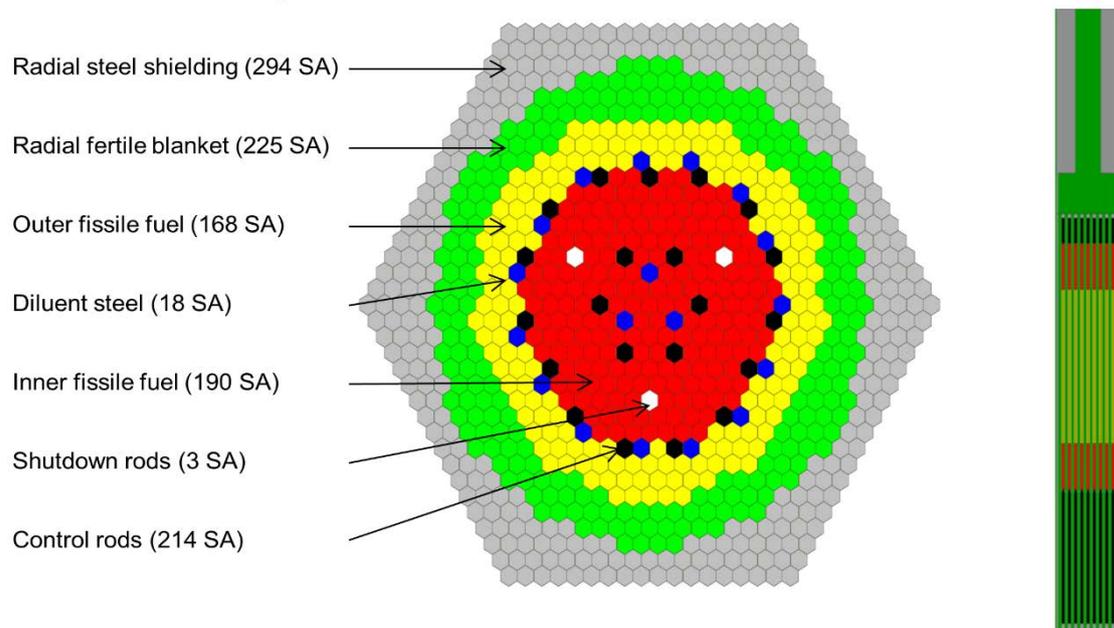


Abb. 3.20 Serpent-Modell des SPX-Kerns

Dieser Benchmark wurde im Rahmen des Vorhabens RS1547 genutzt, die Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung natriumgekühlter Systeme zu überprüfen. Im Folgenden wird die Vorgehensweise beschrieben, nach der für den SPX Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten unter Verwendung des Monte-Carlo-Codes Serpent für die in Abschnitt 3.5.1 dokumentierten deterministische Ganzkernberechnungen mit dem 3D-Neutronenkinetikcode PARCS generiert wurden.

3.4.4.1 3D-Modellierung vollständiger Brennelemente

Voraussetzung für die in Abschnitt 3.5.1 beschriebenen deterministischen 3D-Kernberechnung des Superphénix-Reaktors ist die Erzeugung geeigneter parametrisierter, brennelementweise homogenisierter makroskopischer Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken. Diese Aufgabe wird in der Regel mit deterministischen (2-D) Gittercodes wie HELIOS, CASMO oder SCALE durchgeführt. Da derartige Rechencodes auf zwei Raumdimensionen beschränkt sind, muss jede axiale Zone eines Brennelements unabhängig von den übrigen modelliert werden, indem jeweils entsprechende 2D-Modelle entwickelt werden. Jede Brennelementzone wird dadurch in axialer Richtung als unendlich ausgedehnt beschrieben. Unter dieser Annahme kann die in Wirklichkeit vorhandene axiale Abhängigkeit des Neutronenflusses nicht erfasst werden, sodass insbesondere bei kleinen axialen Zonen und starker axialer Heterogenität im Brennelement (wie sie bei flüssigmetallgekühlten Systemen vorliegt) Effekte benachbarter axialer Zonen nicht berücksichtigt werden.

In Anbetracht der gestiegenen Rechenleistung wird die Generierung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken anhand von 3D-Modellen vollständiger Brennelemente mit Monte-Carlo-Codes wie beispielsweise den auf die Erzeugung makroskopischer Wirkungsquerschnittsdaten spezialisierten Code Serpent, auch parametrisiert nach thermohydraulischen Rückwirkungsparametern, zunehmend attraktiver. Der Vorteil solcher 3D-Modelle besteht neben der direkten Nutzung evaluierter nuklearer Punktdaten darin, den Einfluss benachbarter axialer Bereiche für die Berechnung des Neutronenflusses und damit für den Homogenisierungsprozess über eine bestimmte axiale Zone direkt zu berücksichtigen. Für Superphénix werden folgende Modellierungsansätze verwendet:

- Brennelemente in Spalt- und Brutzonen des Reaktorkerns werden aufgrund reflektierender radialer Randbedingungen in Serpent im unendlichen Gitter modelliert (s. Abb. 3.21).
- Für die Elemente an allen übrigen Kernpositionen werden Superzellmodelle – ebenfalls mit reflektierenden Randbedingungen – verwendet, bei denen an die sechs Seitenflächen jeweils ein halbes Brennelement angesetzt wird (s. Abb. 3.21).

Abb. 3.21 zeigt rechts einen axialen Schnitt durch das 3D-Serpent-Modell eines Brennelements. Aus dieser Schnittzeichnung gehen auch die verschiedenen axialen Zonen hervor, über die in der Wirkungsquerschnittserzeugung jeweils homogenisiert wird, indem die Zonen jeweils als Universen in Serpent definiert werden.

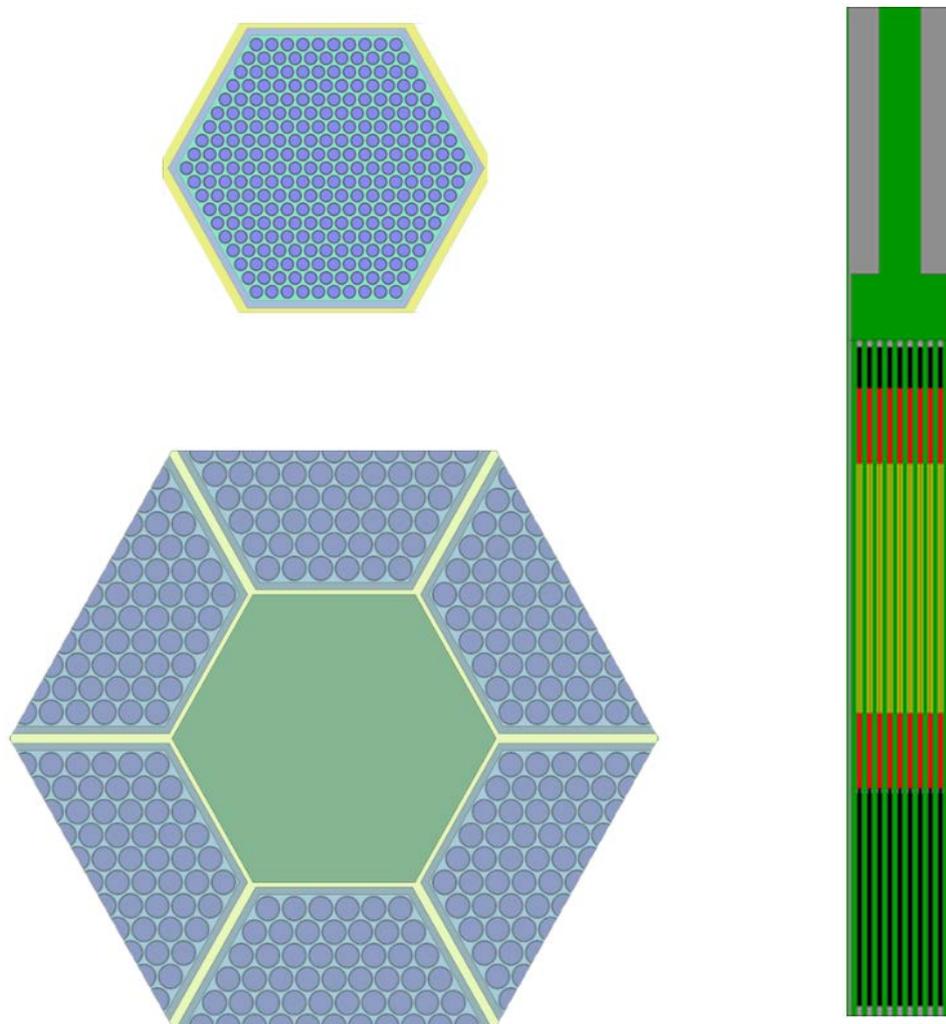


Abb. 3.21 Links: Radiale Schnitte durch die Serpent-Modelle für Brennelemente (oben) und übrige Kernpositionen wie z. B. Reflektor- oder Steuerelemente (unten). Rechts: Axialer Schnitt durch das 3D-Serpent-Modell eines Brennelements

Um akzeptable statistische Unsicherheiten bei der Wirkungsquerschnittserzeugung nach der Monte-Carlo-Methode zu erzielen, wurden Serpent-Berechnungen mit 4.000 Zyklen zu jeweils 2×10^5 Neutronenschicksalen durchgeführt, wobei die ersten 100 Zyklen verworfen wurden. Die Wirkungsquerschnitte wurden unter Verwendung der nuklearen Punktdatenbibliothek JEFF-3.1.1 in der in Tab. 3.9 gezeigten 12-Energiegruppen-Struktur erstellt.

Tab. 3.9 Für Superphénix verwendete 12-Energiegruppen-Struktur

Gruppen-Index	Untere Grenze (MeV)	Gruppen-Index	Untere Grenze (MeV)
1	2.00E+01	7	4.09E-02
2	6.07E+00	8	1.50E-02
3	2.23E+00	9	5.53E-03
4	8.21E-01	10	2.03E-03
5	3.02E-01	11	7.49E-04
6	1.11E-01	12	1.49E-04

3.4.4.2 Superhomogenisierungsmethode

Wird die zuvor beschriebene Methodik unverändert auch auf Steuerelemente und Diluentelemente angewandt, führt dies bei den so erzeugten makroskopischen Wirkungsquerschnitten zu größeren Homogenisierungsfehlern. Mit der Methode der Superhomogenisierung („SPH-Methode“) steht ein etabliertes Werkzeug zur Verfügung, diese Homogenisierungsfehler zu kompensieren. Das iterative Verfahren der SPH-Methode ist in /NIK 15/ beschrieben und wurde an der GRS zur Generierung SPH-korrigierter Wirkungsquerschnitte mit DYN3D implementiert /GRU 11/. Für PARCS wurde eine signifikante Verbesserung der Leistungsverteilung und der effektiven Multiplikationsfaktoren festgestellt, wie in Tab. 3.10 gezeigt.

Tab. 3.10 Abweichung der mit PARCS berechneten Multiplikationsfaktoren für Superphénix von der Serpent-Referenzlösung mit und ohne SPH-Korrektur

keff Serpent	Rel. Abweichung im Multiplikationsfaktor ($1 - k_{\text{PARCS}}/k_{\text{Serpent}}$, pcm)		
	Keine SPH-Korrektur	SPH-Korrektur für Steuerstab-SA	SPH-Korrektur für Steuerstab- und Verdünnungs-SA
0.99791	382	260	130

3.4.4.3 Parametrisierung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken

In SFR sind wesentliche Reaktivitätsrückwirkungseffekte auf die Wärmeausdehnung von Brennstoff und Reaktorstrukturen zurückzuführen. Zur Beschreibung dieser Effekte sind die temperaturabhängigen geometrischen Abmessungen der Kernstrukturen entsprechend ihrer thermischen Ausdehnungskorrelationen bei gleichzeitiger Dichteänderung der betreffenden Materialien (Massenerhaltung) zu berücksichtigen. Um die Handhabung temperaturabhängiger Geometrie- und Materialdichteveränderungen im Serpent-Modell zu vereinfachen, wurde der erweiterte Präprozessor des GRS-Kernsimulators KMACS zur Erzeugung temperaturabhängiger Geometrieparameter und Materialdichten verwendet. Die Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind bezüglich Brennstofftemperatur, Hüllrohrtemperatur, Kühlmitteldichte und Kerngitterweite parametrisiert, um der radialen Kernaufdehnung infolge Aufheizung der Kerngitterplatte und damit verbundener Vergrößerung des Abstands benachbarter Brennelemente in PARCS Rechnung zu tragen. Die Stützwerte für jeden Rückwirkungsparameter, die für die in Abschnitt 3.5 dargestellten gekoppelte transiente 3D-Kernberechnungen verwendet werden, sind in Tab. 3.11 angegeben. Für jede mögliche Kombination der Stützstellen der einzelnen Parameter wurde ein Satz von Wirkungsquerschnittsdaten erzeugt, die über jede der axialen Zonen der verschiedenen Brennelementtypen homogenisiert sind.

Tab. 3.11 Parameterisierung der Wirkungsquerschnittsdaten für SPX

Parameter	Stützwerte
Brennstofftemperatur (K)	300, 600, 900, 1200
Kühlmitteldichte (kg/m ³)	941, 874, 805
Hüllrohrtemperatur (K)	600
Brennelementgitterweite (cm)	17.90, 17.98, 18.05

3.4.5 Auswertung von Parametern und arithmetischen Formeln im Eingabedatensatz von Serpent

Die Generierung parametrisierter makroskopischer Weniggruppen-Wirkungsquerschnitts-Bibliotheken erfordert konsistente Änderungen bestimmter geometrischer und Massendichte-Parameter im Serpent-Eingabedatensatz, je nach Temperatur und thermischem Ausdehnungsgesetz der jeweiligen Materialien. Um diese Aufgabe zu vereinfachen und um fehlerhafte Eingaben durch Tippfehler zu vermeiden, wurde im Rahmen dieses Vorhabens ein Software-Tool zur Auswertung arithmetischer Ausdrücke entwickelt und in den Serpent-Quellcode implementiert. Damit können Zahlen in der Serpent-Eingabedatei durch Parameternamen oder arithmetische Formeln ersetzt werden, die alle mathematischen Standardoperationen und Funktionen enthalten können. Vor der Ausführung von Serpent mit einem bestimmten Eingabedatensatz werden alle in Klammern $<$ und $>$ eingeschlossenen Formeln ausgewertet und durch einen einzigen zeilenweisen Scan des Serpent-Eingabedatensatzes durch entsprechende Ergebniswerte ersetzt. Auf die Parameterdefinitionen können im weiteren Verlauf an beliebiger Stelle im Serpent-Eingabedatensatz – auch in per „include“-Direktive nachgeladenen Datensätzen – zugegriffen oder zur Definition anderer Parameter, auch in Verbindung mit arithmetischen Ausdrücken, verwendet werden. Als Beispiel werden die in der linken Spalte von Tab. 3.12 angegebenen Serpent-Eingabedaten durch die Softwareerweiterung von Serpent intern in die in der rechten Spalte gezeigten Daten umgewandelt, die direkt von Serpent interpretiert werden können.

Tab. 3.12 Beispiel für die Parameterisierung des Serpent-Eingabedatensatzes

Parameterisierte Serpent	– Eingabedaten	Ausgewertete Serpent	– Eingabedaten
pin LGp		pin LGp	
Void	<rci=0.8824/2>	Void	0.4412
AIMclad	<rco=0.9838/2>	AIMclad	0.4919
Cool		Cool	
pin LBp		pin LBp	
Void	<rferti=0.2214/2>	Void	0.1107
UOXLB	<rferto=0.8504/2>	UOXLB	0.4252
Void	<rci>	Void	0.4412
AIMclad	<rco>	AIMclad	0.4919
cool		cool	

3.5 AP 1.5: Erstellung von Kernmodellen ausgewählter Systeme

3.5.1 Das Reaktorkonzept ASTRID

Die Spezifikation des ASTRID-Kerns wird aus dem EU-Projekt ESNII+ übernommen. Der ASTRID-Kern hat eine stark heterogene axiale Konstruktion (s. Abb. 3.22) mit vier axialen Schichten: eine untere Brutzone, gefolgt von einer inneren Brennstoffzone (aus MOX), einer inneren Brutzone und einer oberen Brennstoffzone für die 177 Brennelemente der inneren radialen Kernzone. Die 114 Brennelemente der äußeren radialen Kernzone bestehen nur aus einer äußeren axialen Brennstoffzone oberhalb der unteren axialen Brutzone. Die wichtigsten ASTRID-Kernparameter im Betriebszustand sind eine Wärmeleistung von 1.500 MW, ein Kernmassenstrom von 7785 kg/s, Kühlmitttemperaturen von 673 K am Kerneintritt und 823 K am Kernaustritt (mittlere Kühlmitteltemperatur: 748 K) sowie Brut- und Brennstofftemperaturen von im Mittel 900 K bzw. 1.500 K. Unter Betriebsbedingungen betragen die aktiven Kernhöhen 110,863 cm und 120,912 cm für den inneren bzw. den äußeren Kern. Jedes Brennelement besteht aus einer hexagonalen Anordnung von 217 Stäben. Die Brennelement-Gitterweite beträgt unter Nominalbedingungen 17,611 cm.

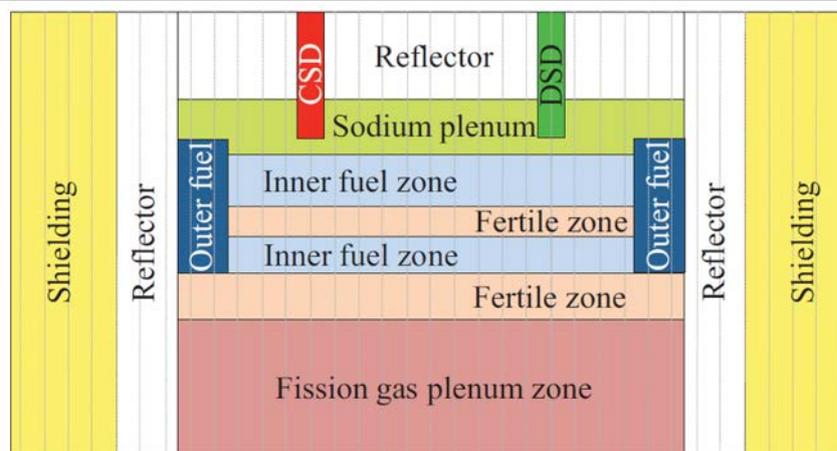
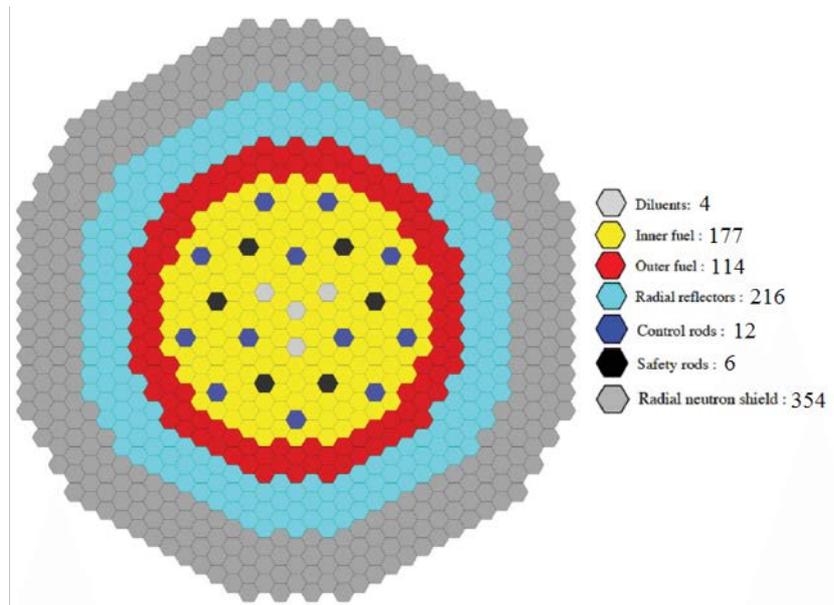


Abb. 3.22 Radiale Kernanordnung (oben) und axiale Schnitt (unten) des ASTRID-Kerns

3.5.2 Der Superphénix-Reaktor

Für den Superphénix-Reaktor wurde ein Ganzkernmodell für den deterministischen 3D-Neutronenkinetikcode PARCS entwickelt, welches die in Abschnitt 3.4.1 generierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten verwendet. Zur Überprüfung des PARCS-Modells wurde ferner ein Ganzkern-Monte-Carlo-Referenzmodell mittels Serpent entwickelt und die Ergebnisse für verschiedene, in /PON 18/ definierte und in Tab. 3.13 angegebene stationäre Kernzustände, für die teilweise auch experimentelle Ergebnisse vorliegen, verglichen. Die mit PARCS berechneten Ergebnisse für die verschiedenen stationären Kernzustände des SPX wurden dann ebenfalls mit Messergebnissen – soweit verfügbar -- verglichen. In beiden Fällen wurden sehr gute Übereinstimmungen festgestellt. Im letzten Schritt wurde ein *Open-Core*-Thermohydraulik-Parallelkanalmodell des SPX-Kerns in ATHLET entwickelt, welches für erste gekoppelte transiente Testrechnungen mit PARCS/ATHLET für SPX eingesetzt wurde. Im Folgenden wird die Modellierung des SPX-Kerns mittels des Monte-Carlo-Codes Serpent und des deterministischen 3D-Neutronenkinetikcodes PARCS dargestellt. Die Generierung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten ist in Abschnitt 3.4.1 beschrieben.

Tab. 3.13 Die 12 verschiedenen SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen mit ihren jeweiligen Einfahrtiefen der CSD-Elemente und Materialtemperaturen

*gemessen von der Oberkante der Spaltzone.

Case ID	CSD insertion* [cm]	Material temperatures [K]		
		Fissile	Fertile	Other
1	0	453/453	453/453	453/453
2	0	673/673	673/673	673/673
3	0	1500/1500	900/900	673/673
4	0	300/293	300/293	300/293
5	0	300/453	300/453	300/453
6	0	300/673	300/673	300/673
7	0	600/673	600/673	600/673
8	0	900/673	900/673	900/673
9	0	600/673	600/673	300/673
10	40	300/673	300/673	300/673
11	40	600/673	600/673	600/673
12	40	673/673	673/673	673/673

3.5.2.1 Monte-Carlo-Referenzmodell des SPX-Kerns

Der Kern des SPX-Reaktors besteht aus einer hexagonalen Brennelementanordnung mit einer nominalen Gitterweite von 17,9 cm. Abb. 3.23 zeigt die graphische Darstellung des hier entwickelten Serpent-Modells. Jedes Stabbündel (Subassembly, SA) wird detailliert modelliert, d. h. das Stabgitter innerhalb der hexagonalen Kästen (Wrapper) der Brennelemente (in Spalt- und Brutzonen), Steuerelemente, Abschirmelemente etc. werden einschließlich der Kühlmittelspalte zwischen benachbarten Kästen explizit und ohne geometrische Vereinfachungen modelliert. Der Detaillierungsgrad wird anhand der axialen Struktur des Serpent-Modells des in Abbildung Abb. 3.23 rechts dargestellten Brennelements erkennbar. In der Benchmark-Spezifikation sind insgesamt zwölf verschiedene Kernkonfigurationen definiert, die sich durch die Stellung der CSD-Steuerelemente und die Materialtemperaturen unterscheiden (s. Tab. 3.13). Sämtliche Daten zu Geometrie und Materialien sind der Benchmark-Spezifikation /PON 18/ zu entnehmen.

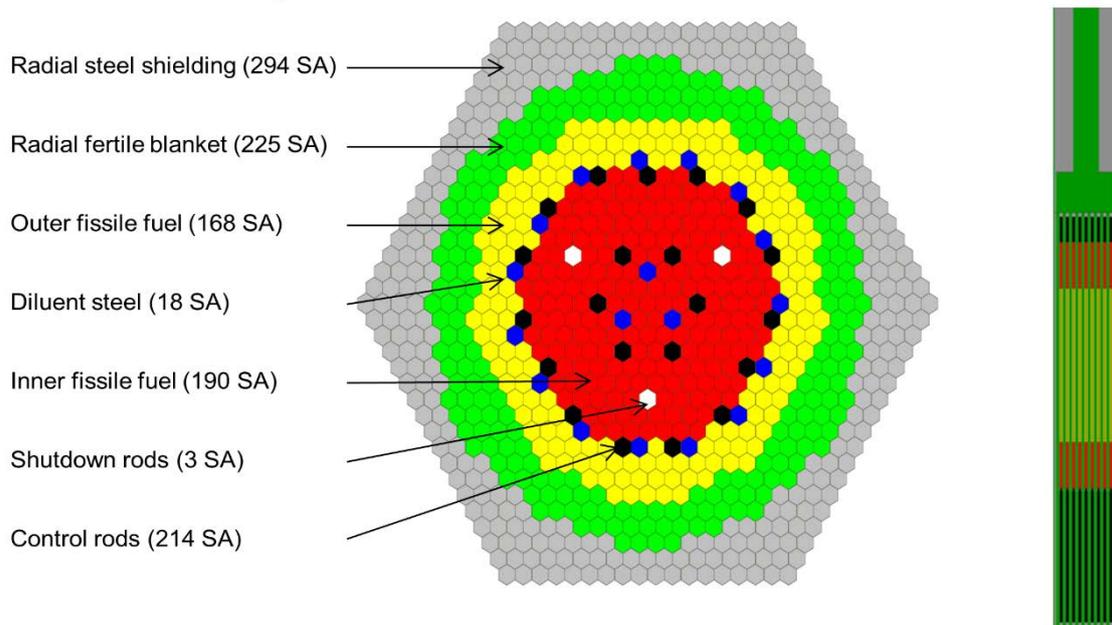


Abb. 3.23 Serpent-Modell des SPX-Kerns

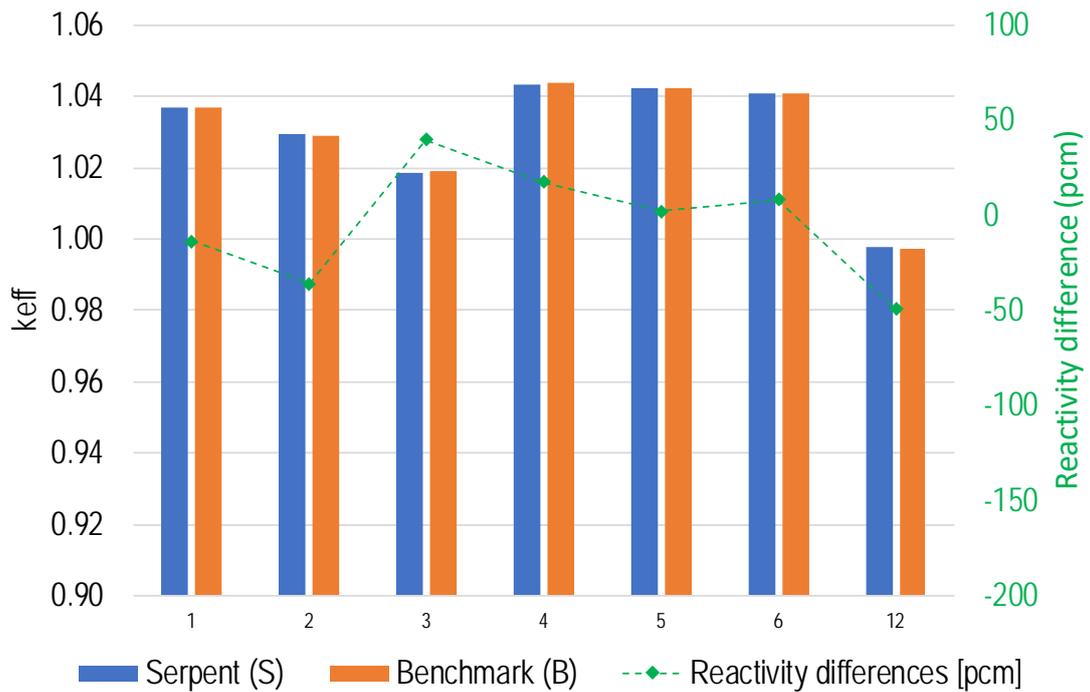


Abb. 3.24 Mit Serpent berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen 1 bis 6 sowie 12 im Vergleich zu den Benchmark-Referenzen (orange)

Die grünen Datenpunkte geben auf der rechten Ordinate die Abweichungen bzgl. der Reaktivität an.

Tab. 3.14 Ergebnisse der Serpent- und PARCS-Modelle und Vergleiche mit Benchmark-Referenzergebnissen und Experiment

Case ID	k-eff [-]				Reactivity differences [pcm]		
	Benchmark (B)	PARCS (P)	Serpent (S)	Experiment (E)	P - E	P - S	P - B
1	1.0367	1.03674	1.03685	1.03853	-166	-14	4
2	1.0289	1.02851	1.02924	1.03177	-307	-36	-33
3	1.0190	1.01781	1.01862	1.02135	-340	39	-118
4	1.0437	1.04341	1.04346	-	-	17	-22
5	1.0425	1.04234	1.04244	-	-	2	-11
6	1.0408	1.0406	1.04071	-	-	8	-18
7	1.0305	1.03019	-	-	-	-	-32
8	1.0248	1.02443	-	-	-	-	-38
9	1.0314	1.03022	-	-	-	-	-110
10	1.0082	1.00666	-	-	-	-	-156
11	0.9989	0.99716	-	-	-	-	-178
12	0.9974	0.99564	0.99791	-	-	-49	-179

3.5.2.2 Deterministisches 3D-Kernmodell des SPX in PARCS

Die SPX-Kernkonfiguration wird in PARCS gemäß Abb. 3.23 als vollständiger Kern modelliert. Unterschiedliche Kernkonfigurationen, die durch unterschiedliche Materialtemperaturen und durch die Positionen der CSD-Steuerstäbe dargestellt werden, wurden – wie in der Benchmark-Spezifikation /PON 18/ angegeben – berücksichtigt, um den Einfluss der Wärmeausdehnung auf die Reaktivität zu untersuchen. Für jeden Fall wurde ein Satz von Wirkungsquerschnitten für die angegebenen Temperaturen erzeugt, die radial über den Brennelementquerschnitt und über die jeweilige axiale Zone homogenisiert sind (s. Abschnitt 3.4.1). In Tab. 3.14 sind die Multiplikationsfaktoren für jeden von PARCS (P) und Serpent (S) berechneten Fall aufgeführt und die Reaktivitätsdifferenzen in Bezug auf die entsprechende Benchmark-Referenz (B) angegeben. Die Stellung der CSD-Steurelemente ist in der zweiten Spalte angegeben. 0 cm bedeutet, dass die CSD-Elemente vollständig herausgezogen sind; 100 cm kennzeichnet den vollständig eingefahrenen Zustand. Für die Fälle mit ausgefahrenen CSD-Elementen beträgt die maximale Diskrepanz weniger als 120 pcm; in den Fällen mit teilweise eingefahrenen CSD-Elementen betragen die Abweichungen bis zu 509 pcm. Die Abweichungen zwischen den PARCS- und den Serpent-Referenzergebnissen bleiben jedoch geringer als die Abweichungen, die sich aus nuklearen Datenbibliotheken ergeben und bis zu 600 pcm betragen können, wenn die Ergebnisse mit JEFF3.1.1 und ENDFB7.0 verglichen werden.

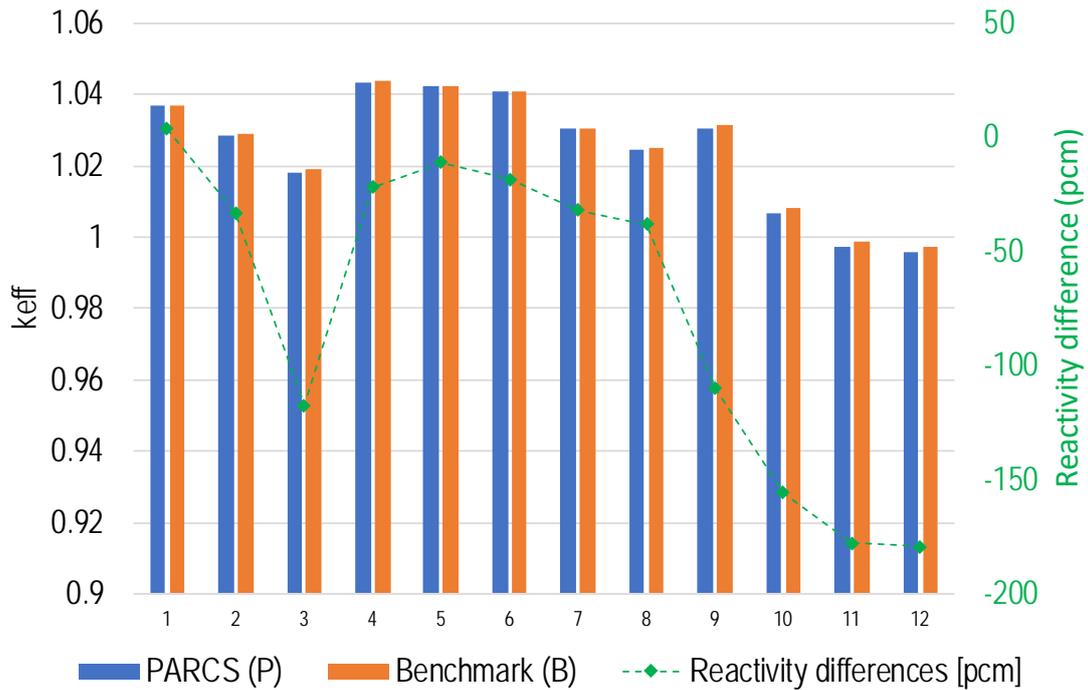


Abb. 3.25 Mit PARCS berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der 12 verschiedenen SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen im Vergleich zu den Benchmark-Referenzen (orange)

Die grünen Datenpunkte geben auf der rechten Ordinate die Abweichungen bzgl. der Reaktivität an.

Zusätzlich wurden noch für die Kernkonfigurationen, für die experimentelle Daten vorliegen, die mit PARCS berechneten Multiplikationsfaktoren mit den jeweiligen Messwerten verglichen. Wie die Gegenüberstellung in Abb. 3.26 zeigt, wird mit Reaktivitäts-Abweichungen zwischen 166 und 340 pcm eine gute Übereinstimmung erreicht.

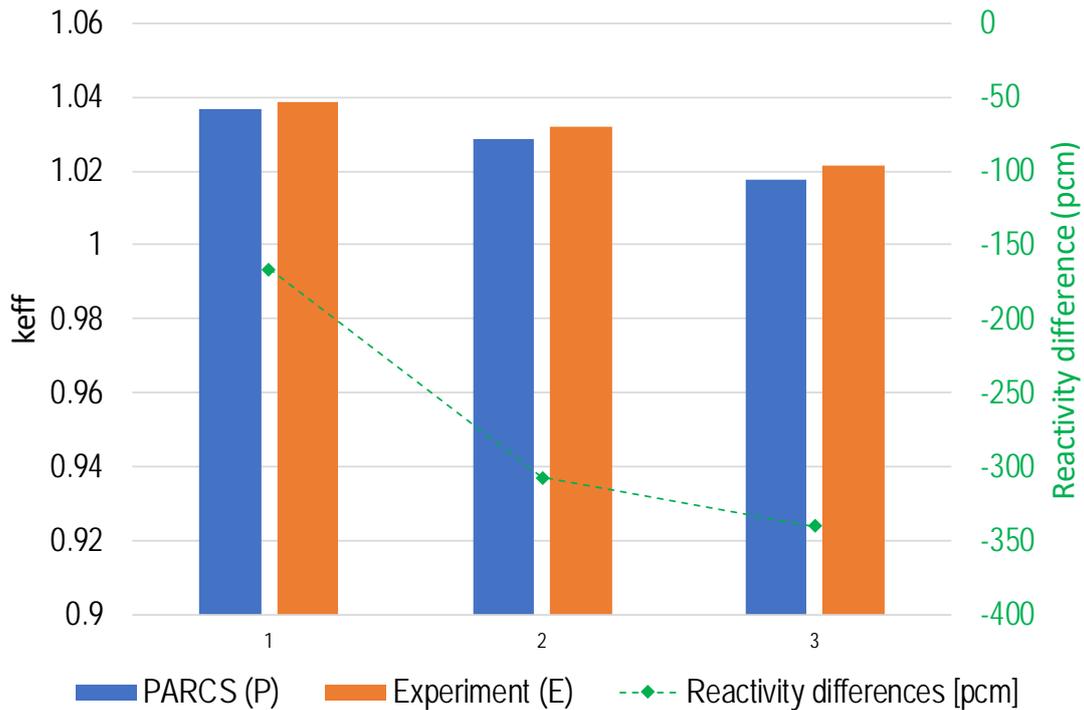
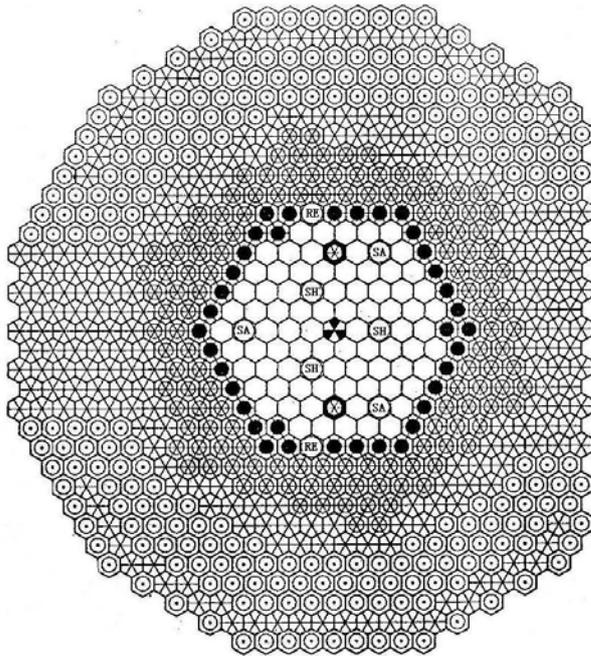


Abb. 3.26 Mit PARCS berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der ersten drei SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen im Vergleich zu den Messwerten (orange)

3.5.3 Der China Experimental Fast Reactor (CEFR)

Der China Experimental Fast Reactor (CEFR) ist ein natriumgekühlter Reaktor in China, für den 2010 erstmals Kritikalität erreicht wurde. Er befindet sich im China Institute of Atomic Energy (CIAE), einem südwestlichen Vorort von Peking, und verfügt über eine thermische Leistung von 65 MW. Im ersten Zyklus wurde der Reaktorkern mit angereichertem Uranoxidbrennstoff beladen. Bei den Inbetriebnahmeversuchen im Jahr 2010 wurden vier Versuchsreihen durchgeführt, darunter Kern-Kritikalität, Messung von Steuerstabwirksamkeiten, Messung der Reaktivitätskoeffizienten und Folienaktivierungsmessungen. Diese Experimente waren nicht nur ein wesentlicher Bestandteil des Anfahrens des Reaktors, sondern ergaben auch wertvolle Daten für die Validierung der Kernausslegung, der Rechencodes und der nuklearen Daten. Unter der Leitung und Unterstützung der Internationalen Atomenergie-Organisation (IAEA) schlug die CIAE das derzeitige koordinierte Forschungsprojekt (CRP) vor, um auf der Grundlage der Start-up-Tests einen Benchmark zu entwickeln.



Legend	Assembly Type	Number
	Fuel Assembly	79
	1-Steel Shielding Assembly	2
	2-Steel Shielding Assembly	37
	3-Steel Shielding Assembly	132
	4-Steel Shielding Assembly	223
	Boron Shielding Assembly	230
	Safety Rod Assembly	3
	Regulating Rod Assembly	2
	Shim Rod Assembly	3
	Neutron Source Assembly	1

Abb. 3.27 Radiale Kernkonfiguration des CEFR /HOU 19/

Die Konfiguration der Erstkernbeladung besteht aus 79 Brennelementen (SA, Subassemblies), 8 Kontroll-SAs, einer Neutronenquelle (SA), 394 Edelstahl-SAs (SS) und 230 Bor-Abschirm-SAs. Die beiden SS SAs in der Brennstoffzone, mit denen die Überschussreaktivität der frischen Brennelemente in der Erstkernbeladung kompensiert wird, werden im Gleichgewichtszyklus durch zwei Brennelemente ersetzt.

3.5.3.1 Erstellung von Monte-Carlo-Referenzmodellen für Kern und einzelne Brennelemente

Basierend auf der aktuellen verfügbaren Spezifikation von CIAE (Version 6 vom April 2019), wurde zunächst in Form von Tabellenkalkulationsblättern (in Excel) eine detaillierte Datenbank von Geometrie, Temperatur und Materialien aller Subassemblies erstellt. Diese Tabellenkalkulationsblätter sind so gestaltet, dass bei Änderung der Temperatur der verschiedenen Materialien (z. B. von Brennstoff, Kühlmittel, Hüllrohr etc.) automatisch Geometrie und Massendichte der betreffenden Materialien unter Verwendung der spezifizierten thermischen Ausdehnungsgesetze berechnet werden. Gleichzeitig werden die entsprechenden Nuklidinventare automatisch berechnet.

Unter Verwendung dieser Datenbank wurden im Anschluss verschiedene Monte-Carlo-Modelle für Serpent entwickelt, die die verschiedenen Kernbeladungen und Betriebszustände laut Spezifikation abbilden. Abb. 3.28 zeigt als Beispiel die radiale Kernkonfiguration des CEFR in Serpent etwa auf Höhe der axialen Kernmitte für den Fall mit 79 beladenen Brennelementen, die in der Mitte dunkelgrau dargestellt sind.

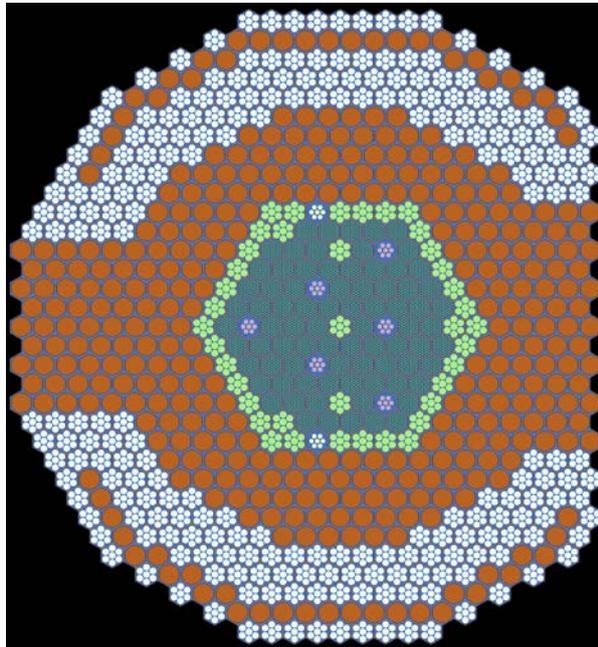


Abb. 3.28 Monte-Carlo-Kernmodell des CEFR in Serpent

Mittels dieser Serpent-Modelle wurden eine Reihe von Experimenten berechnet, u. a. den nach Beladen von 71 Brennelementen letzten, noch unterkritischen Kernzustand und den Kritikalitätszustand mit 72 Brennelementen. Die vorläufigen Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor und ENDF/B-VII.0-Daten sind in Tab. 3.15 angegeben und sind mit den experimentellen Bedingungen konsistent.

Tab. 3.15 Vorläufige Serpent-Ergebnisse für zwei ausgewählte Kernkonfigurationen

Anzahl Brennelemente im Kern	Steuerstabpositionen in mm		Kernzustand	k_{eff}
	Übrige 7 Steuerelemente	Regulierelement RE2		
71	ausgefahren	ausgefahren	Ende des unterkritischen Prozesses	0.99965
72	ausgefahren	70	Kritikalität	1.00260

3.5.3.2 Erstellung eines deterministischen Kernmodells des CEFR

Die Serpent-Ganzkernmodelle wurden in einem weiteren Schritt verwendet, um für alle Brennelemente und deren jeweilige axiale Zonen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte in 24 und 10 Energiegruppen für deterministische Kernberechnungen zu generieren. Das 3D-Kernmodell wurde für den GRS-Diffusionscode FEM-Diff-3d erstellt. Abb. 3.29 zeigt links die Materialverteilung etwa auf Höhe axialen der Kernmitte. Ein vorläufiges Bild der radialen Leistungsdichteverteilung für diese Kernkonfiguration in etwa axialer Kernmitte ist in Abb. 3.29 rechts dargestellt.

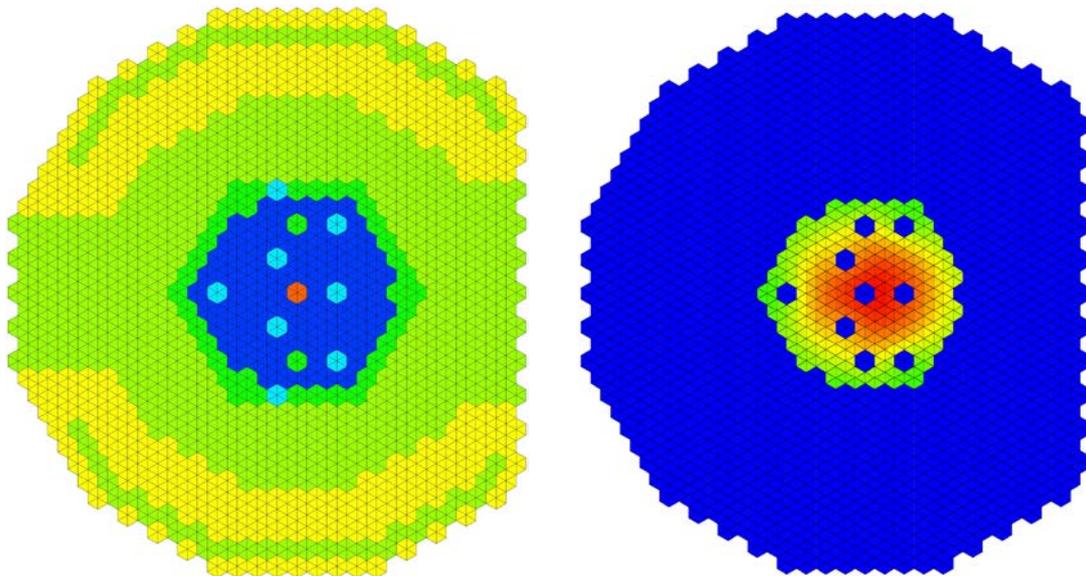


Abb. 3.29 Deterministisches Kernmodell des CEFR in FEM-Diff-3d (links) und berechnete Leistungsdichteverteilung etwa auf Höhe axialen der Kernmitte (rechts; Ergebnis vorläufig)

4 AP 2: Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle

4.1 AP 2.1: Entwicklung einer Methodik zur Darstellung der Wirkungsquerschnitte schneller Systeme inklusive Strukturrückwirkungen

Ziel dieses Arbeitspunktes ist die Entwicklung einer möglichst allgemein gültigen Methodik, nach der die thermo-strukturellen Rückwirkungsmodelle, die z. B. Material- und/oder Geometrieänderungen von Subassembly-Nodes bedingen, mit der bekannten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitts-Funktionalisierung zur Beschreibung thermohydraulischer Zustandsänderungen innerhalb geometrisch fixierter Subassembly-Nodes (z. B. parametrisierte Bibliotheken) zusammengeführt bzw. integriert werden kann. Dabei sind Phänomene wie die Ausdehnung von Kerngitterplatte und Steuerstabantrieb oder axiale Brennstoff- und Hüllrohrausdehnung zu betrachten.

Die gesuchte Methodik ist bereits in Kapitel 3.4 und darin z. B. in Abschnitt 3.4.1 (Tab. 3.5) im Detail beschrieben. Daher erfolgt hier eine zusammenfassende Darstellung.

Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte schneller Reaktorsysteme müssen neben Doppler- und Kühlmitteltemperatur auch nach Temperaturen von Strukturmaterialien parametrisiert werden, die die thermischen Ausdehnungseffekte maßgeblich steuern. Dazu gehören in erster Linie die folgenden Parameter:

Temperatur des Hüllrohrs

Mit steigender Temperatur des Hüllrohrs dehnt sich dieses in axialer und radialer Richtung aus. Bei offenem Spalt zwischen Brennstoffpellet und Hüllrohrinnenwand kann sich das Hüllrohr unabhängig vom Brennstoff axial ausdehnen, bei geschlossenem Spalt erfolgen Brennstoff- und Hüllrohrausdehnung gemeinsam. Die Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte nach der Hüllrohrtemperatur ist daher für die Anwendung des axialen thermischen Ausdehnungsmodells in PARCS zusätzlich erforderlich. Mit der Parametrisierung nach der Hüllrohrtemperatur werden radiale Hüllrohrausdehnungseffekte durch die Wirkungsquerschnittshomogenisierung erfasst, nämlich Änderungen der Hüllrohrwanddicke und der Stabgitterweite. Die Hüllrohrtemperaturverteilung im Kern wird über das erweiterte Kopplungsinterface zwischen PARCS und ATHLET ausgetauscht, s. Kapitel 6.2 (AP 4.2: Schnittstelle für Wärmestrukturparameter), darin Abschnitt 6.2.1.

Temperatur der Kerngitterplatte

Über die Temperatur der Kerngitterplatte wird die Brennelementgitterweite und damit auch die Breite des mit Kühlmittel gefüllten Spalts (Inter-assembly gap) zwischen benachbarten Brennelementkästen bestimmt. Die Brennelementgitterweite ist Eingangsparameter für das in PARCS implementierte radiale Kernausdehnungsmodell. Zusätzlich müssen die Wirkungsquerschnitte als Funktion Brennelementgitterweite homogenisiert werden, damit der genannten Änderung des Inter-assembly gaps neutronenphysikalisch Rechnung getragen wird. Die Temperatur der Kerngitterplatte wird dem obersten axialen Node derjenigen ATHLET-Wärmestruktur entnommen (z. B. mittels GCSM), die die massive Stahlstruktur der Kerngitterplatte beschreibt.

Temperatur des Brennelementkastens

Durch eine Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte nach der Temperatur des Brennelementkastens lassen sich Ausdehnungseffekte desselben neutronenphysikalisch berücksichtigen.

Temperatur des Steuerstabantriebs und Kernbehälters

Über die Temperatur des Steuerstabantriebs wird dessen axiale Ausdehnung berechnet. Die damit verbundene Längenänderung wird in PARCS dazu benutzt, die Routine zur Verschiebung der Steuerstäbe zu steuern. Ähnlich der radialen Kernausdehnung wird die Temperatur des Steuerstabantriebs derjenigen ATHLET-Wärmestruktur entnommen (z. B. mittels GCSM), die die Strukturen des Steuerstabantriebs beschreiben. Wichtig ist dabei auch die Temperatur des Kernbehälters, da dessen axiale Ausdehnung der Verschiebung der Steuerstäbe – je nach Kernauslegung – entgegenwirken oder verstärken kann.

Void-Fraction

Je nach Anwendungsfall kann eine alternative oder zusätzliche Parametrisierung nach der Void-Fraction (neben der Parametrisierung nach der Kühlmitteldichte) sinnvoll sein.

4.2 AP 2.2: Erweiterung der Modelle zu thermo-strukturellen Ausdehnungseffekten

Die Arbeiten zur Erweiterung der Modelle thermo-struktureller Ausdehnungseffekte betreffen sowohl die Beschreibung der axialen und radialen Kernausdehnungseffekte als auch die Modellierung der Ausdehnung von Steuerstab bzw. Steuerstabantrieb.

4.2.1 Radiales Kernausdehnungsmodell in PARCS

Das im Vorgängervorhaben RS1515 beschriebene und in PARCS bereits erfolgreich implementierte radiale Kernausdehnungsmodell wurde dahingehend erweitert, dass es zukünftig mit lokal variierenden Kern-Gitterweiten arbeiten kann. Dies ermöglicht die Simulation sog. Core-Flowering-Phänomene, für die charakteristisch ist, dass aufgrund der in axialer Richtung nach oben hin zunehmenden Kühlmitteltemperatur die Brennelemente im oberen Bereich einen größeren Abstand als im unteren Bereich nahe dem Kerneintritt haben. Um solche Situationen beschreiben zu können, wird jedem axialen Node in PARCS eine individuelle Brennelement-Gitterweite $Pitch(T)$ zugeordnet, die sich aus der Gitterweite $Pitch_0$ im Nominalzustand und einer beliebig anzugebenden thermischen Ausdehnungskorrelation $K_{exp}(T)$ für die aktuelle Temperatur errechnet:

$$Pitch(T) = Pitch_0 \times (1 + K_{exp}(T)) \quad (4.1)$$

Die thermische Ausdehnungskorrelation wird dabei durch ein Polynom vierten Grades beschrieben, dessen Entwicklungskoeffizienten als Eingabedaten angegeben werden können:

$$K_{exp}(T) = \sum_{i=1}^4 K_i (T - T_0)^i \quad (4.2)$$

Das erweiterte radiale Ausdehnungsmodell wurde in PARCS 3.3.1 implementiert. Die Aktivierung und Steuerung des Ausdehnungsmodells erfolgt im Eingabedatensatz über das Schlüsselwort *RadialExp*, dessen acht Parameter folgende Bedeutungen haben:

- **Parameter 1:** (De-)Aktivieren des Ausdehnungsmodells (True oder False)
- **Parameter 2:** Kerngitterweite im Nominalzustand (Pitch0)
- **Parameter 3:** Temperatur des Nominalzustands (T0)
- **Parameter 4:** Polynomentwicklungskoeffizient K1
- **Parameter 5:** Polynomentwicklungskoeffizient K2
- **Parameter 6:** Polynomentwicklungskoeffizient K3
- **Parameter 7:** Polynomentwicklungskoeffizient K4
- **Parameter 8:** Einheit der Temperatur (K oder °C)

4.2.2 Axiales Kernausdehnungsmodell in PARCS

Das in PARCS implementierte Modell zur axialen Brennstab-/Hüllrohr-Ausdehnung wurde grundlegend modernisiert. Ziele waren (a) die Eliminierung bestehender Limitierungen in Verbindung mit sehr kleinen axialen Maschen, (b) die Erweiterung zur Berücksichtigung verschiedener relativer Ausdehnungsrichtungen, z. B. bzgl. des Kernbehälters, und (c) Erweiterungen zur späteren Berücksichtigung der axialen Ausdehnung des Steuerstabantriebs.

Treibender Parameter bei der axialen Brennstab-Ausdehnung infolge Hüllrohrausdehnung bei geschlossenem Gasspalt ist die Hüllrohrtemperatur. Die Konsequenzen des Anstiegs der Hüllrohrtemperatur sind:

- Ausdehnung des Hüllrohrmaterials
 - Anstieg von Hüllrohrinnen- und -außenradius (A)
 - axiale Verlängerung des Hüllrohrs (B)
- Größere Gitterweite des Stabgitters innerhalb des Brennelements (C)
- Dichte des Hüllrohrmaterials sinkt (D)
- Dichte des Brennstoffs sinkt (Volumenvergrößerung) (E)

Während die Effekte (A), (C), (D) und (E) über geeignete nach Brennstoff- und Hüllrohrtemperatur parametrisier Wirkungsquerschnittsbibliotheken erfasst werden können, wird der Effekt (B) über das axiales Ausdehnungsmodell in PARCS modelliert.

Das ursprünglich in PARCS implementierte axiale Ausdehnungsmodell ist in Abb. 4.1 anhand der axialen Nodalisierung eines Brennelements in 4 räumliche Maschen skizziert. Die Nodalisierung des Nominalzustands, wie im PARCS-Eingabedatensatz anzugeben, ist in ① dargestellt. Durch thermische Ausdehnung verschieben sich die Materialgrenzen wie in ② (axially expanded) gezeigt. Da die räumliche Diskretisierung in 3D-Neutronenkinetikcodes wie z. B. PARCS einmal festgelegt wird und daher den verschobenen Materialgrenzen nicht folgen kann, wird der ausgedehnte Zustand in der Nodalisierung der Ausgangsgeometrie mit geeignet modifizierten nodalen Wirkungsquerschnitten so dargestellt (③ – expanded state mapped on nodalization of nominal state), dass hierdurch der ausgedehnte Zustand ② möglichst gut approximiert wird. Dies erfordert

- (a) die Einführung einer virtuellen Materialgrenze in jedem axialen Node, die mit der Position der verschobenen Materialgrenze in ② übereinstimmt, und
- (b) die Berechnung äquivalenter Wirkungsquerschnitte für die Nodes der Ausgangsgeometrie. Dies geschieht durch nodeweise axiale Homogenisierung der temperaturabhängigen Wirkungsquerschnitte unter Verwendung des axialen Flussverlaufs, dessen Feinverlauf innerhalb der Nodegrenzen durch lineare oder quadratische Interpolation des nodalen Flussverlaufs innerhalb des Brennelements dargestellt wird.

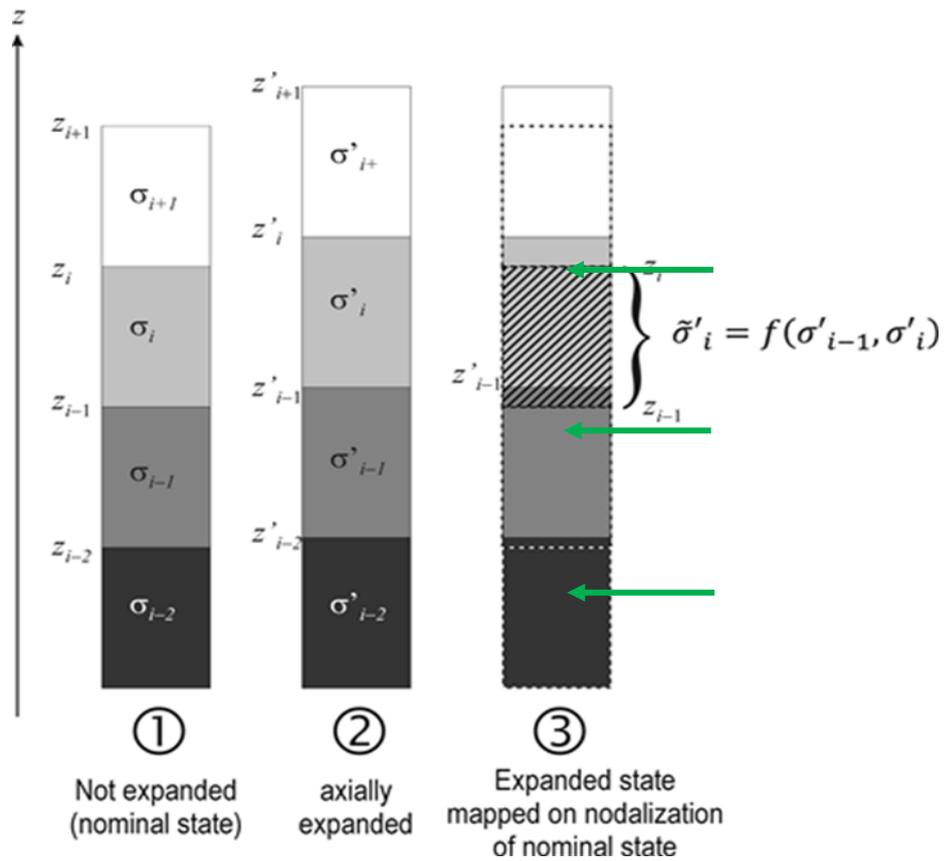


Abb. 4.1 Illustration des ursprünglichen axialen Ausdehnungsmodells in PARCS

Die Pfeile zeigen auf die zusätzliche virtuelle Materialgrenze innerhalb eines axialen Nodes der Nominalgeometrie (gestrichelt umrandet).

Dieses Modell ist nur anwendbar, wenn Brennstoff und Hüllrohr sich simultan ausdehnen, z. B. bei geschlossenem Spalt zwischen Pellet und Hüllrohr. Die unabhängige Ausdehnung von Brennstoff und Hüllrohr, z. B. bei nicht geschlossenem Spalt, müsste dann durch zwei Materialgrenzen beschrieben werden. Eine weitere Schwierigkeit entsteht dadurch, dass die thermisch verschobene Materialgrenze nicht im axial darüberliegenden Node zu liegen kommt, sondern im übernächsten. Ein solcher Fall kann bei sehr kleinen axialen Nodes eintreten, etwa beim oberen Gasplenum eines Brennstabs, und ist in Abb. 4.2 dargestellt (grüner Pfeil). Das oben beschriebene Modell ist dann nicht anwendbar.

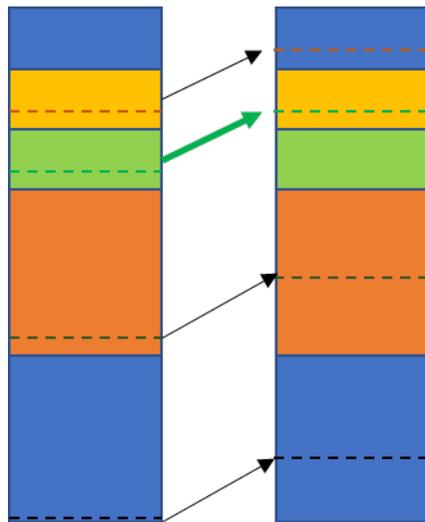


Abb. 4.2 Beispiel einer thermisch bedingten Verschiebung von Materialgrenzen, bei der eine Materialgrenze im übernächsten Node zu liegen kommt (grüner Pfeil)

Im weiterentwickelten axialen Ausdehnungsmodell werden die o. g. Beschränkungen aufgehoben. Dies wird dadurch erreicht, dass mehr als eine virtuelle Materialgrenze je axialem Node zugelassen wird. Dadurch können nun vom Brennstoff unabhängige Hüllrohrausdehnungen erfasst werden. Die Ausdehnungen und die damit verbundenen axialen Koordinaten der Materialgrenzen werden für Brennstoff und Hüllrohr unabhängig und nach den jeweiligen thermischen Ausdehnungsgesetzen berechnet (Abb. 4.3 links bzw. rechts). Die so ermittelten Materialgrenzen werden dann samt den zugehörigen Materialien (durch die jeweiligen Wirkungsquerschnittsbibliotheken charakterisiert) als virtuelle Materialgrenzen den Nodes der nominalen Geometrie zugeordnet (Abb. 4.3 Mitte). Für die Nodes der nominalen Geometrie (durchgezogene Linien in Abb. 4.3 Mitte) werden dann – wie im ursprünglichen Modell – temperaturabhängige Wirkungsquerschnitte unter Verwendung des axialen Flussprofils ermittelt.

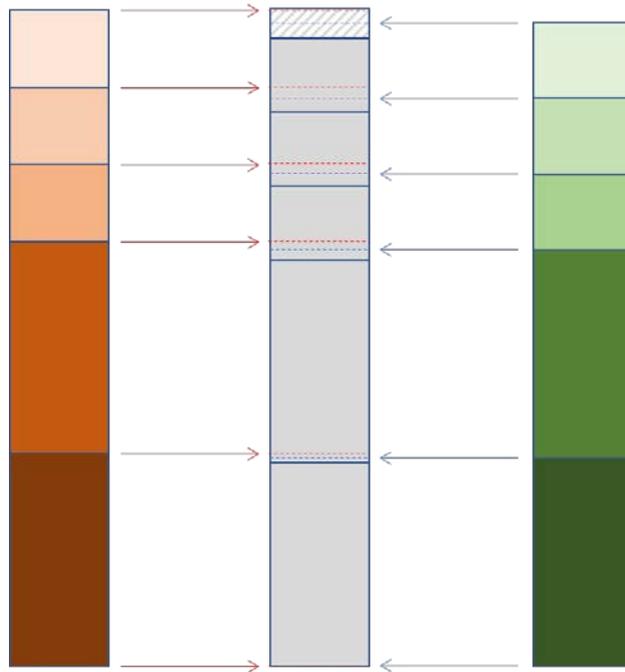


Abb. 4.3 Prinzip des erweiterten axialen Kernausdehnungsmodells in PARCS

Mitte: Axiale Nodalisierung eines Brennelements in PARCS. Verschiedene Farben kennzeichnen verschiedene Materialien. Gestrichelte Linien sind die virtuellen Materialgrenzen aus.

4.3 AP 2.3: Verifizierung und Validierung

4.3.1 Radiales Kernausdehnungsmodell

Das erweiterte radiale Kernausdehnungsmodell wurde anhand des ASTRID-Kerns getestet. Vier Fälle wurden untersucht, die für die Kerngitterplatte den Temperaturbereich von 300 °C bis 1.200 °C abdecken. Für jeden Fall wurden zwei stationäre PARCS-Berechnungen durchgeführt. Bei der ersten Berechnung, die als Referenz genommen wird, ist das radiale Ausdehnungsmodell deaktiviert und die Brennelementgitterweite wird im PARCS-Eingabedatensatz auf den Wert gesetzt, der durch die jeweilige Kerngitterplattentemperatur gemäß dem thermischen Ausdehnungsgesetz der Kerngitterplatte entspricht. Dies liefert den Referenzmultiplikationsfaktor.

Für die zweite Berechnung wird das radiale Kernausdehnungsmodell in PARCS aktiviert, indem die Brennelementgitterweite auf den nominalen Wert (17,611 cm, entsprechend der Nominaltemperatur von 400 °C für die Kerngitterplatte) gesetzt und die Multiplikati-

onsfaktoren für die verschiedenen temperaturabhängigen Brennelementgitterweiten berechnet werden. Tab. 4.1 fasst die erhaltenen Ergebnisse zusammen. Die mit dem radialen Ausdehnungsmodell erhaltenen Ergebnisse stimmen sehr gut mit den jeweiligen Referenzrechnungen überein.

Tab. 4.1 Multiplikationsfaktoren für verschieden Kerngitterplattentemperaturen – Vergleich zwischen Referenz und radialem Kernaussdehnungsmodell

Kerngitterplattentemperatur	300 °C	400 °C	800 °C	1.200 °C
Brennelementgitterweite (cm)	17.580	17.611	17.741	17.877
Relative radiale Kernaussdehnung	-0.176%	0.000%	0.738%	1.510%
Multiplikationsfaktor – Referenz	0.99845	0.99774	0.99409	0.99023
Multiplikationsfaktor – radiales Ausdehnungsmodell	0.99845	0.99774	0.99409	0.99024

Ferner wurden gekoppelte transiente 3D-Kernberechnungen mit PARCS/ATHLET durchgeführt. Dazu wurde ein Open-Core-Parallelkanal-Modell des ASTRID-Reaktorkerns in ATHLET entwickelt. Jedes Brennelement, Steuerstab und Nicht-Brennelement werden als individuelle parallele thermohydraulische Kanäle modelliert, während radiale Reflektor- und Abschirmelemente durch jeweils einen thermohydraulischen Kanal (s. Abb. 4.4) modelliert werden. Für die gekoppelte ATHLET-PARCS-Simulationen wird eine 1-zu-1-Abbildung zwischen ATHLET und PARCS angewendet, d. h. jedes Element (dargestellt durch einen einzelnen radialen PARCS-Node) innerhalb des radialen Reflektorelement-Rings wird ein eigener thermohydraulischer ATHLET-Kanal zugewiesen. Jeder Kanal ist mit der Kerngitterplatte durch ein Branch-Objekt verbunden. Der Kerngitterplatte besteht aus einem Kanal mit einer Masse aus Edelstahl, der in 10 axiale Knoten unterteilt ist. Die thermohydraulischen Durchmesser und Oberfläche werden korrekt dargestellt. Der Hauptmassenstrom durchströmt die Kerngitterplatte und erwärmt die Metallstruktur. Für das Wärmeausdehnungsmodell wird die Temperatur des obersten Nodes der Kerngitterplatte verwendet. Derzeit werden temperaturbedingte geometrische Verformungen (z. B. axiale und radiale Kernaussdehnungseffekte) im thermohydraulischen Modell nicht berücksichtigt werden.

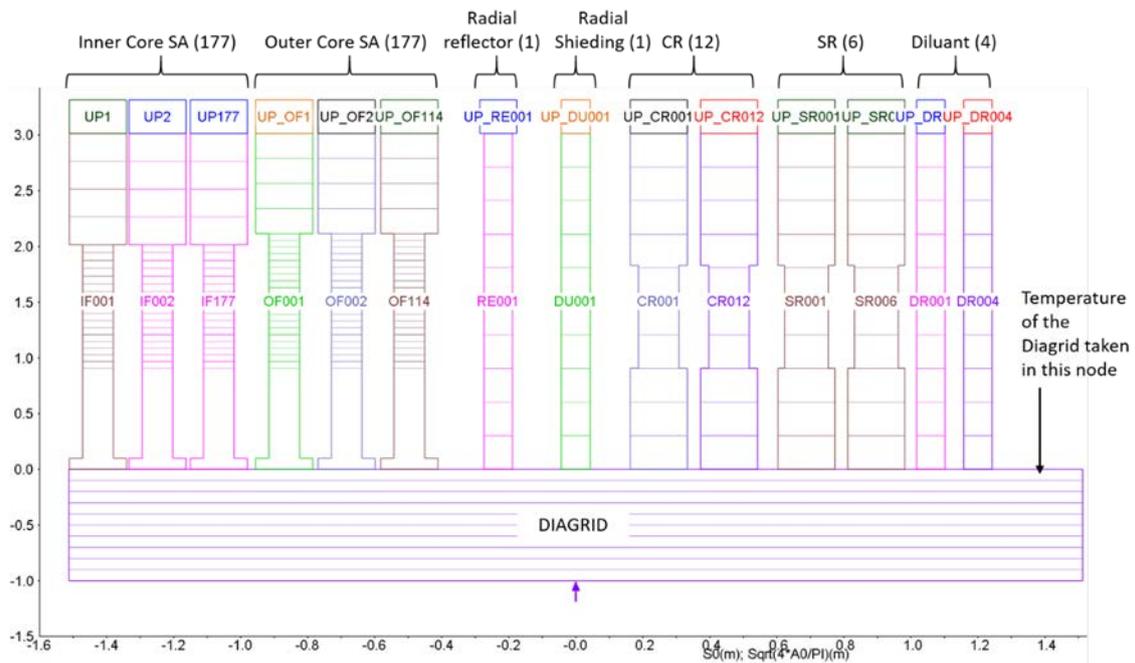


Abb. 4.4 Thermohydraulisches Open-Core-Modell des ASTRID-Reaktorkerns

Es wird eine Transiente betrachtet, die durch Änderungen der Kühlmiteleintrittstemperatur ausgelöst wird. Ausgehend von ihrem Nominalwert von 400 °C, steigt die Kerneintrittstemperatur innerhalb von 5 s linear auf 600 °C an, verbleibt für 5 s bei diesem Wert, um innerhalb weiterer 5 s wieder linear auf ihren Nominalwert abzusinken. Die gestrichelte rote Linie in Abb. 4.5 zeigt den Verlauf der Kühlmiteleintrittstemperatur, die gestrichelte orange Linie in Abb. 4.5 den zugehörigen, von ATHLET berechneten zeitlichen Verlauf der Temperatur der Kerngitterplatte.

Die durchgezogenen Linien in Abb. 4.5 zeigen den Verlauf der Reaktorleistung für drei verschiedene Rechenfälle. Die blaue Kurve zeigt den Leistungsverlauf ohne Berücksichtigung der Ausdehnung der Kerngitterplatte. Wird die Ausdehnung der Kerngitterplatte berücksichtigt und wird angenommen, dass die Temperatur der Kerngitterplatte der Temperatur am Kerneintritt ohne Verzögerung folgt, ergibt sich der rot dargestellte Leistungsverlauf. Da die Vergrößerung des mit Natrium gefüllten Abstands zwischen benachbarten einen negativen Reaktivitätseffekt hat, ergibt sich eine gegenüber der blauen Kurve deutlich ausgeprägtere Leistungsabsenkung. Diese wird jedoch überschätzt, da sich die Kerngitterplatte infolge ihrer großen Wärmekapazität wesentlich langsamer aufheizt bzw. abkühlt als die Temperatur am Kerneintritt ansteigt bzw. absinkt. Der realistischere Leistungsverlauf (durchgezogene orange Kurve) ergibt sich also bei gleichzeitiger Berücksichtigung der von ATHLET berechneten Temperaturänderung der Kerngitterplatte und aktiviertem radialem Ausdehnungsmodell in PARCS. Diese ersten Ergebnisse wurden während des Fall 2018 CAMP in Meetings präsentiert und in einem Paper, das für die MC2019-Konferenz eingereicht wurde, beschrieben.

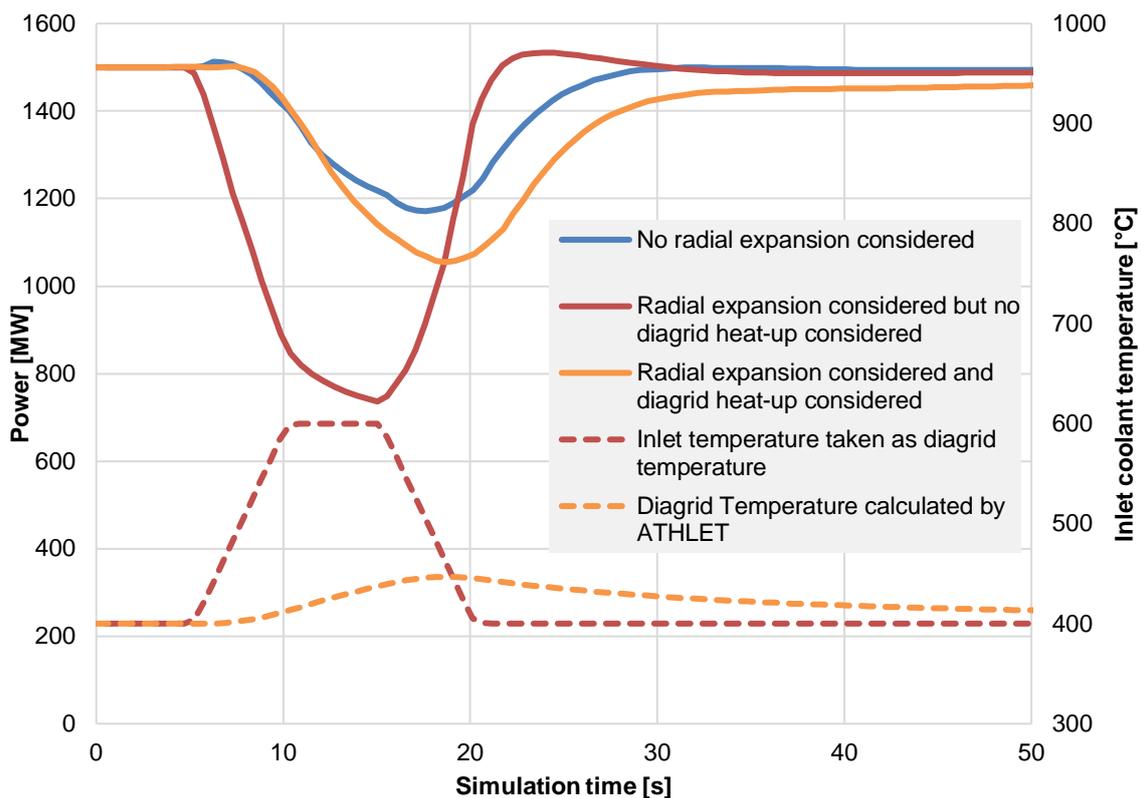


Abb. 4.5 Einfluss auf die Gesamtleistung eines vorübergehenden Anstiegs der Kernkühlmitteleintrittstemperatur mit explizitem Modell der thermischen radialen Ausdehnung

4.3.2 Axiales Kernausdehnungsmodell

Das in PARCS implementierte, erweiterte axiale Ausdehnungsmodell wurde ähnlich dem radialen Ausdehnungsmodell überprüft, indem Vergleiche axial ausgedehnter Kernzustände mit Referenzlösungen durchgeführt wurden, bei denen die axiale Nodalisierung in PARCS so gewählt wurde, dass die axialen Nodegrenzen den verschobenen Materialgrenzen folgen. Die Berechnung axial ausgedehnter Kernzustände bei aktiviertem axialem Ausdehnungsmodell in PARCS basiert hingegen stets auf der axialen Nodalisierung des nominalen (nicht ausgedehnten) Kernzustands. Als Modellsystem dient der ASTRID-Kern.

Zwei Rechenfälle wurden betrachtet:

- Fall 1: Ohne Berücksichtigung der mit der axialen Ausdehnung verbundenen Änderungen
 - der Material-Massendichten
 - der Hüllrohrdicke (Innen- und Außenradius)
 - des Brennstoff-Pelletdurchmessers
 - der Stab-Gitterweite (pin pitch)
- Fall 2: Mit Berücksichtigung der mit der axialen Ausdehnung verbundenen Änderungen
 - der Material-Massendichten
 - der Hüllrohrdicke (Innen- und Außenradius)
 - des Brennstoff-Pelletdurchmessers
 - der Stab-Gitterweite (pin pitch)

Während Fall 1 ein rein hypothetisches Beispiel darstellt, ist Fall 2 realistischer, da neben der axialen Ausdehnung gleichzeitig die temperaturbedingten Änderungen von Geometrie und Materialmassendichte über Wirkungsquerschnitts-Bibliotheksparmeter berücksichtigt werden. Dementsprechend steigt, wie in Abb. 4.6 zu sehen, der Multiplikationsfaktor mit zunehmender Hüllrohrtemperatur an (blaue Kurve), wobei die Abweichungen (grüne Kurve) zur Referenzrechnung (rote Kurve) im niedrigen zweistelligen pcm-Bereich liegen und insbesondere deutlich kleiner sind als die ausdehnungsbedingten Reaktivitätseffekte (siehe auch Tab. 4.2, Spalten 4 und 5).

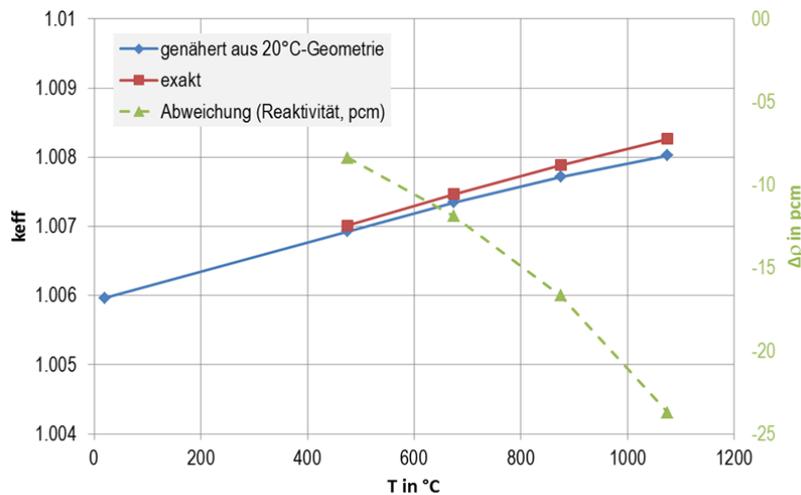


Abb. 4.6 Multiplikationsfaktor als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 1

Tab. 4.2 Multiplikationsfaktor und Reaktivitätseffekte als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 1

T (°C)	k_{eff} (PARCS)		Abweichung Reaktivität (pcm)	Reaktivitäts- Effekt (pcm)
	genähert aus 20 °C Geometrie	exakt		
20	1.0059645	1.0059645	0.0	
475	1.0069282	1.0070132	-8.4	103.5
675	1.0073448	1.0074654	-11.9	148.1
875	1.0077159	1.0078852	-16.7	189.4
1075	1.0080255	1.0082666	-23.7	227.0

Wie zu erwarten und in Abb. 4.7 zu erkennen, sinkt im realistischeren Fall 2 der Multiplikationsfaktor bei Anwachsen der Hüllrohrtemperatur. Wiederum sind die Abweichungen zur Referenzrechnung vergleichbar mit jenen von Fall 1.

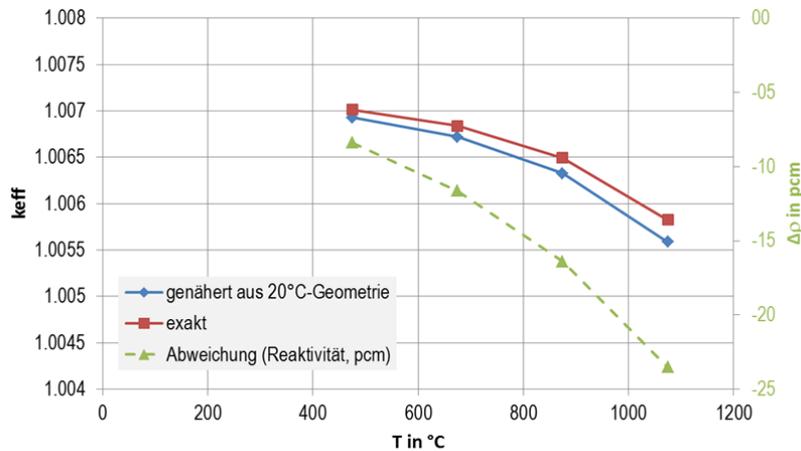


Abb. 4.7 Multiplikationsfaktor als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 2

4.3.3 Gekoppelte 3D-Kernberechnungen zur lokalen Simulation des Siedens von Natrium

Mit dem in Abschnitt 4.3.1 beschriebenen gekoppelten PARCS/ATHLET-Modell und den in Abschnitt 6.1.1 dargestellten Modellerweiterungen in ATHLET zur Simulation des Siedens von Natrium ist es prinzipiell möglich, lokale Siedevorgänge in gekoppelten 3D-Kernberechnungen simulieren zu können. Zur Demonstration wurde eine sog. „Unprotected Loss Of Flow“ (ULOF)-Transiente bis über den Zeitpunkt des Siedens hinaus berechnet. Bei dem ULOF werden alle primärseitigen Pumpen abgeschaltet. Dabei wird unterstellt, dass das sekundäre Wärmeabfuhrsystem im erzwungenen Konvektionsmodus uneingeschränkt funktionstüchtig ist. Es wird zusätzlich das Versagen der Reaktorschnellabschaltung angenommen.

Der angenommene zeitliche Verlauf des Massenstroms am Kerneintritt in Folge des Abschaltens der Primärkreisumpen ist in Abb. 4.8 zu sehen. Im Folgenden werden die axialen Verteilungen des Dampfblasengehalts (Void-Anteil) und der Hüllrohrtemperatur für drei ausgewählte Kanäle im ASTRID-Kern gezeigt, deren Lage (einer in der inneren, zwei in der äußeren radialen Kernzone) in Abb. 4.9 angegeben ist. Im stationären Ausgangszustand vor Beginn der Transiente ist Dampfblasengehalt an jedem Ort null, wie in Abb. 4.10 zu erkennen ist.

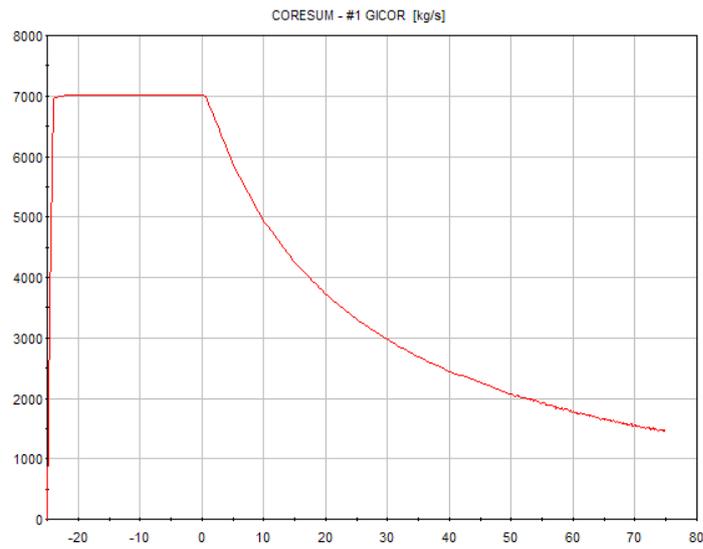


Abb. 4.8 Zeitverlauf des Massenstroms am Kerneintritt während der Transiente

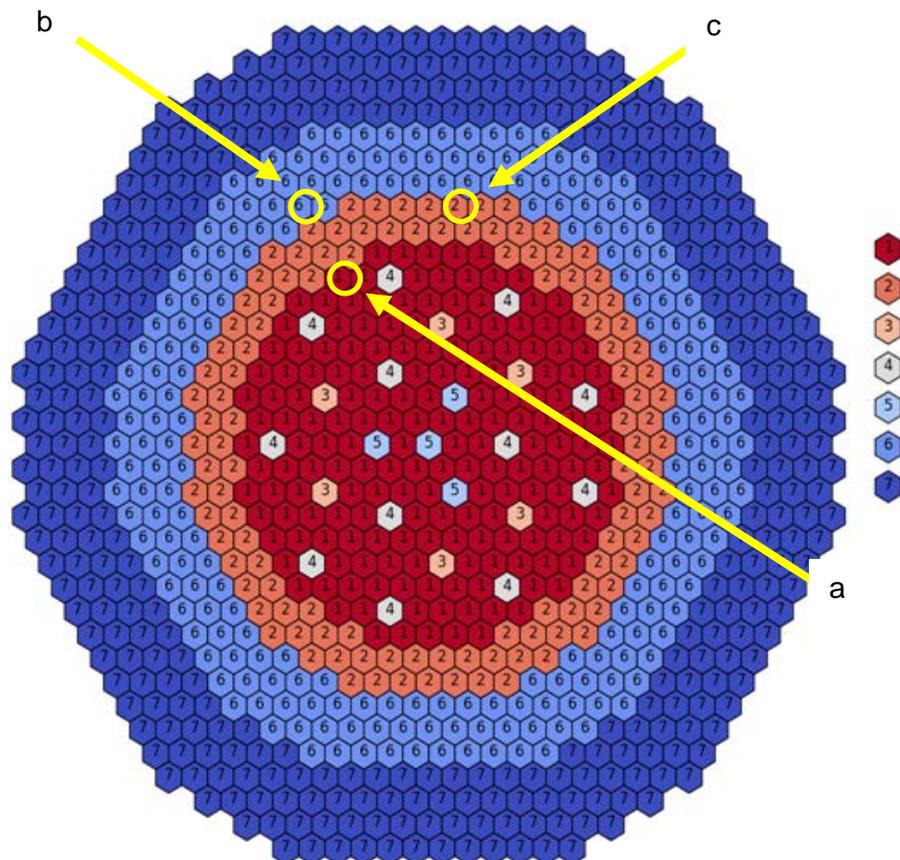


Abb. 4.9 Position der drei gezeigten Kanäle im Kern

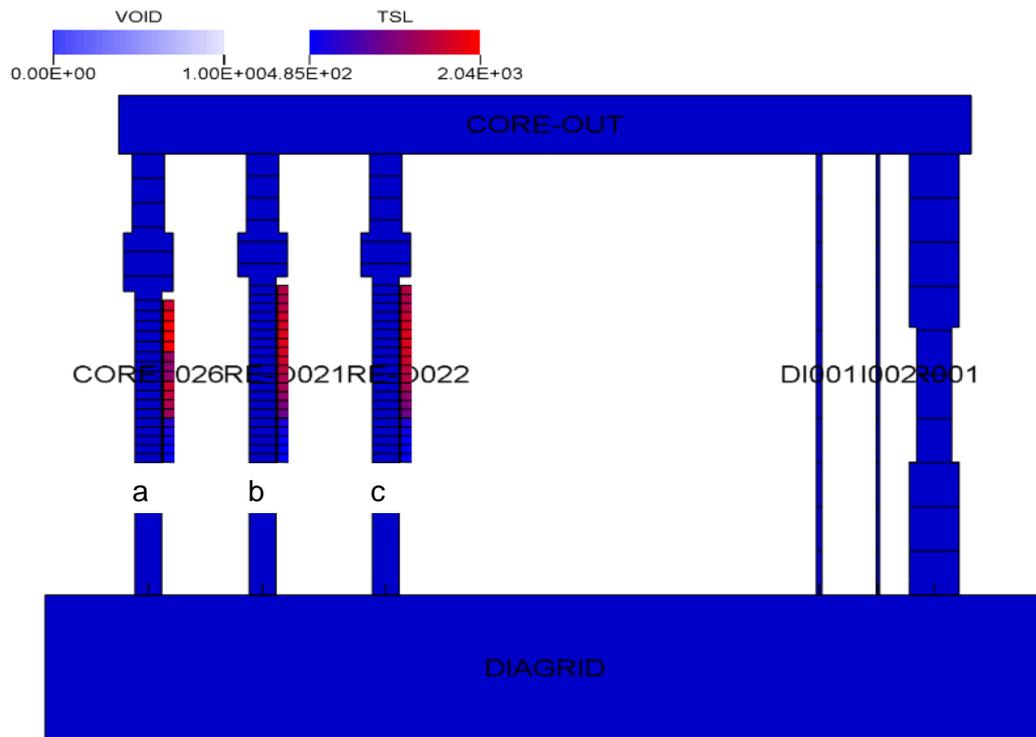


Abb. 4.10 Axiale Voidverteilung und Hüllrohrtemperaturverteilung in ausgewählten Kanälen des ASTRID-Kerns im stationären Zustand zu Beginn der Transiente

Beispielhaft sind ein Kanal im „inner core“ (a) und zwei Kanäle im „outer core“ (b und c) gezeigt sowie rechts drei Nicht-Brennelemente.

Das Einsetzen des Siedens des Kühlmittels findet in der äußeren Kernzone (Kanal 22) statt, und zwar am oberen Ende der Spaltzone des Brennelements. Dies ist in Abb. 4.11 anhand des helleren Blautons (Pfeil; Voidanteil größer null) zu erkennen. Im weiteren Verlauf (Abb. 4.12) breitet sich der Siedezustand in das obere Plenum aus, auch das obere Drittel der Spaltzone ist davon betroffen. Das Sieden in anderen Kanälen der äußeren und inneren Kernzone setzt verzögert ein und ist in fortgeschrittenem Zustand in Abb. 4.13 zu sehen.

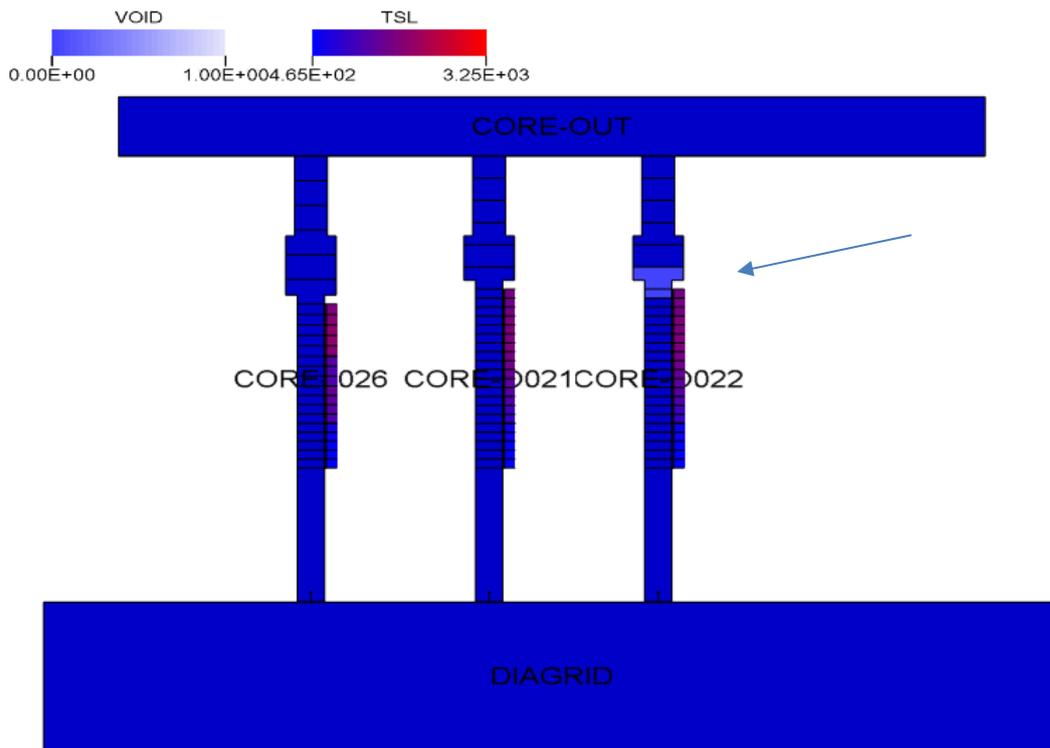


Abb. 4.11 Zeitpunkt des Einsetzens des Siedens

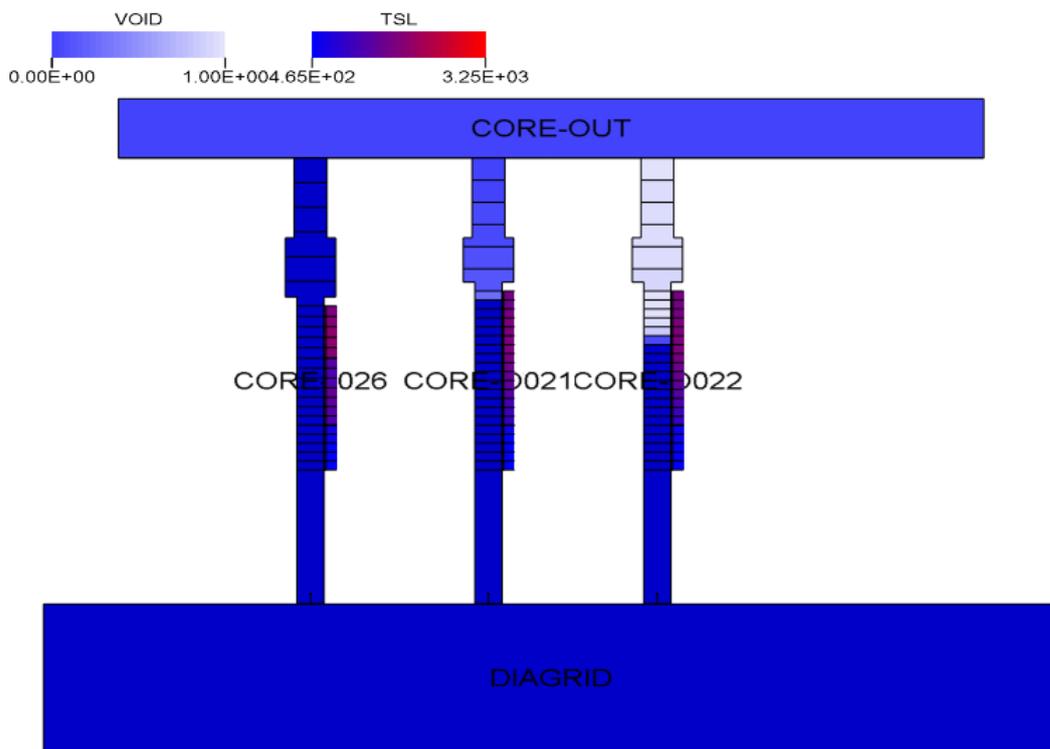


Abb. 4.12 Fortschreiten des Siedeprozesses

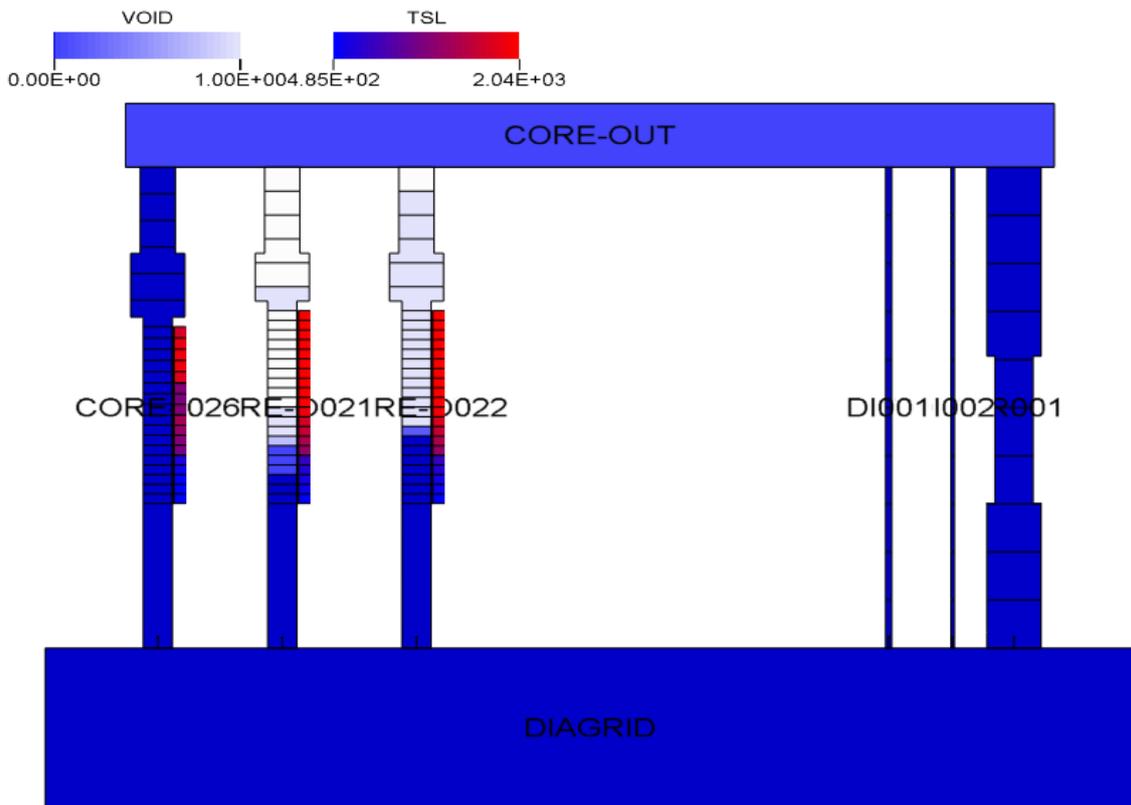


Abb. 4.13 Wie Abb. 4.10, jedoch zu späterem Zeitpunkt bei fortgeschrittenem Siedezustand

5 AP 3: Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation

5.1 AP 3.1: Untersuchung des Einflusses minorer Aktiniden im Transmutationsbrennstoff anhand von 3D-Kernberechnungen

Transmutationsbrennstoff ist durch einen erhöhten Anteil minorer Aktiniden (MA) gekennzeichnet. Dabei handelt es sich um Americium, Neptunium, Curium und Californium, von denen die Isotope ^{237}Np , ^{241}Am , ^{243}Am , $^{242\dots248}\text{Cm}$ und $^{249\dots252}\text{Cf}$ die wichtigsten im abgebrannten Kernbrennstoff sind. Diese Isotope weisen hochtoxische und wärmeentwickelnde Eigenschaften sowie lange Halbwertszeiten auf. Die Umwandlung (Transmutation) dieser Isotope in kurzlebige, weniger toxische und weniger wärmeentwickelnde Isotope in Reaktorsystemen mit schnellen Neutronenspektren ist daher wünschenswert. Die Einbringung minorer Aktinide in den Reaktorkern hat Auswirkungen auf das Sicherheitsparameter, dem in der Kernausslegung Rechnung getragen werden muss. Insbesondere die sicherheitsrelevanten Rückwirkungseffekte werden durch erhöhten Anteil minorer Aktinide im Kernbrennstoff verschlechtert, vor allem der erwünschte negative Brennstofftemperatureffekt nimmt betragsmäßig ab. Gegenstand dieses Arbeitspunktes ist die Untersuchung des Einflusses erhöhter Beladung mit minoren Aktiniden im Brennstoff, die am Beispiel des natriumgekühlten Reaktorkonzepts ASTRID durchgeführt wurde. Dabei werden nicht nur unterschiedliche Gehalte von minoren Aktiniden im Brennstoff untersucht, sondern auch die Art der Einbringung in den Kern.

Im Nominalfall beträgt der Massenanteil der minoren Aktiniden an der Schwermetallgesamtmasse 0,62 % für die innere und 0,50 % für die äußere radiale Kernzone. Für den hier betrachteten erhöhten Gehalt an minoren Aktiniden im Brennstoff betragen die Massenanteile 11,1 % für die innere und 9,18 % für die äußere radiale Kernzone. Hinsichtlich der Einbringung der minoren Aktiniden in den Reaktorkern werden drei Fälle betrachtet:

- nur in die äußere radiale Kernzone,
- nur in die innere radiale Kernzone,
- in innere und äußere radiale Kernzone.

Da die Einbringung minorer Aktiniden in den Brennstoff zu einer Verschlechterung des Dopplereffekts führt, wurden zunächst die vier verschiedenen und in Tab. 5.1 aufgelisteten „Doppler-Szenarien“ untersucht. Dabei wurden die Brennstofftemperaturen in den Spalt- und Brutzonen unabhängig voneinander jeweils um 300 K erhöht oder erniedrigt und der zugehörige Doppler-Reaktivitätseffekt bestimmt. Die genauen Definitionen der Doppler-Szenarien sind in Tab. 5.1 angegeben.

Tab. 5.1 Definition der zu untersuchenden Szenarien

Szenario	Brennstofftemperatur T_{fissile} in den Spaltzonen	Brennstofftemperatur T_{fertile} in den Brutzonen
Doppler 1	1200 K	900 K (nominal)
Doppler 2	1800 K	900 K (nominal)
Doppler 3	1500 K (nominal)	600 K
Doppler 4	1500 K (nominal)	1200 K

Zunächst wurde mit Serpent ein Ganzkern-Referenzmodell erstellt. Die hiermit für nominale MA-Beladung unter Verwendung der ENDF/B-VII-Punktdatenbibliothek ermittelten Reaktivitätseffekte der Doppler-Szenarien sind in Tab. 5.2 (dritte Spalte) angegeben. Der Multiplikationsfaktor des Nominalzustands beträgt $k_{\text{eff}} = 0.99942$ mit einer statistischen Unsicherheit von 0.000032. Die Differenzen der Reaktivitätswerte zu den im Rahmen des EU-Projekts ESNII+ berichteten, ebenfalls mit Serpent berechneten Ergebnissen (Tab. 5.2, Spalte 4) sind mit maximal 26 pcm gering.

Tab. 5.2 Mit Serpent berechnete Reaktivitätswerte für die untersuchten Doppler-Szenarien bei nominaler MA-Beladung

Szenario	k_{eff}	$\Delta\rho$ (pcm)	Differenz zu Ergebnis ESNII
Doppler 1	1.00071	129	-11
Doppler 2	0.99840	-102	5
Doppler 3	1.00074	132	4
Doppler 4	0.99863	-79	26

Für die deterministischen Kernberechnungen wurde das Finite-Elemente-Diffusionsprogramm FEM-Diff-3d eingesetzt. Die dazu benötigten Wirkungsquerschnitte wurden ebenfalls mit Serpent und zwar in der in Tab. 3.1 angegebenen 11-Energiegruppen-Struktur generiert; näheres siehe Abschnitt 5.2. Die Multiplikationsfaktoren für den Nominalzustand und die betrachteten Doppler-Szenarien sind in Abb. 5.1 zusammen mit den jeweiligen Serpent-Ergebnissen dargestellt. Die mit einer gestrichelten Linie verbundenen Datenpunkte geben für jeweils die Abweichung bzgl. der Reaktivität zwischen FEM-Diff-3d und Serpent an. Diese Abweichungen sind mit zwischen 75 und 93 pcm sehr gering, d. h. das deterministische Modell ist in guter Übereinstimmung mit dem Monte-Carlo-Referenzmodell.

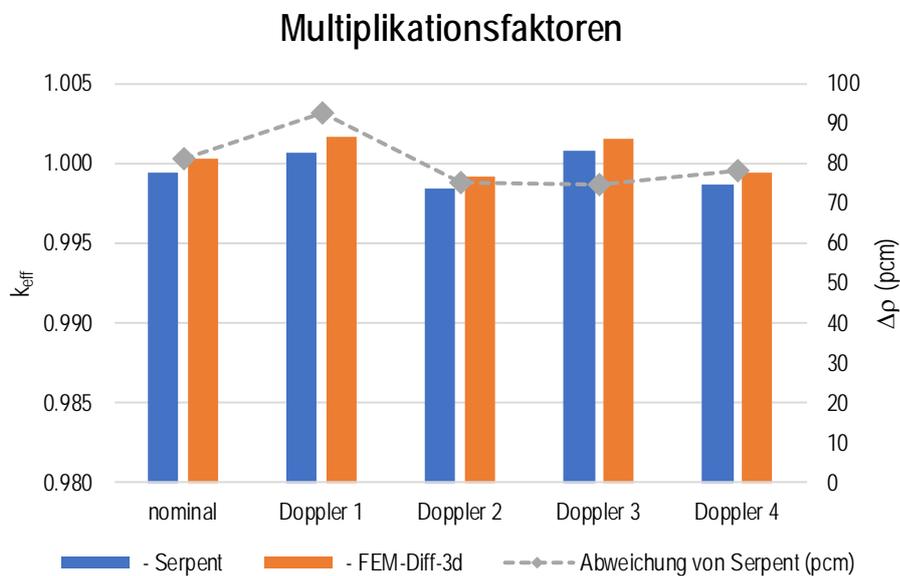


Abb. 5.1 Multiplikationsfaktoren für den ASTRID-Kern mit nominalem MA-Gehalt

Die rechte Ordinate gibt die Abweichung zwischen FEM-Diff-3d und Serpent bzgl. der Reaktivität an.

Auf Grundlage dieses so überprüften deterministischen Modells wurden nun für die drei oben genannten Arten der Einbringung von Brennstoffen mit erhöhtem Anteil minorer Aktiniden anhand der vier Szenarien die Auswirkungen auf die Doppler-Reaktivitätsrückwirkung berechnet. Wie Abb. 5.2 zeigt, nimmt die Doppler-Reaktivitätsrückwirkung gegenüber dem Nominalfall bei Einbringung von Brennstoff mit erhöhtem MA-Gehalt in die innere sowie in innere und die äußere radiale Kernzone betragsmäßig ab. Bei Einbringung erhöhten Anteils minorer Aktiniden in die äußere radiale Kernzone ist der Einfluss auf die Dopplerrückwirkung geringer.

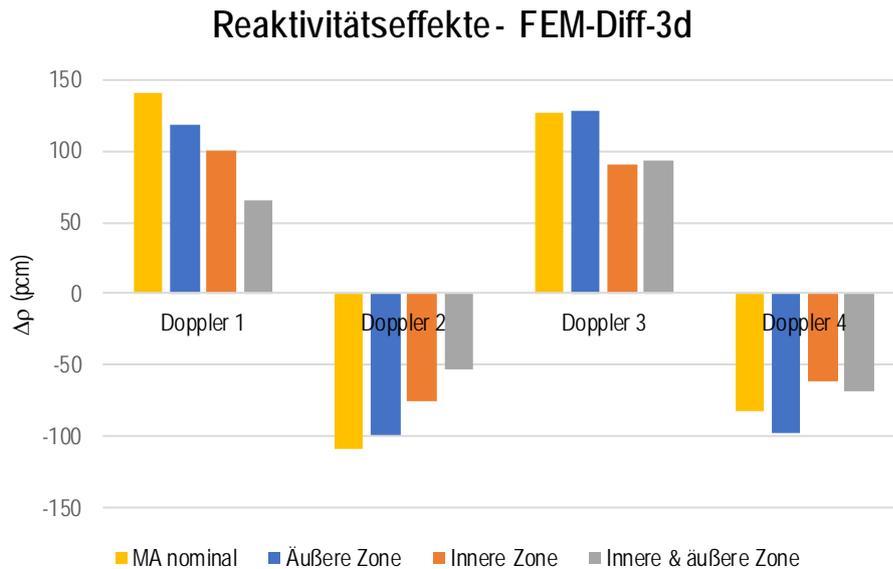


Abb. 5.2 Deterministisch berechnete Reaktivitätseffekte der vier Dopplerszenarien für die verschiedenen Einbringungen von Brennstoff mit erhöhter MA-Beladung im Vergleich mit dem Nominalkern

Zur Überprüfung der mit FEM-Diff-3d durchgeführten deterministischen 3D-Kernberechnungen wurden die Reaktivitätseffekte der Doppler-Szenarien zusätzlich mit Serpent unter Verwendung ENDF/B-VII-Punktdateien durchgeführt und – in Analogie zu dem Vergleich in Abb. 5.1 – mit den entsprechenden deterministischen Ergebnissen verglichen. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.3 bis Abb. 5.5 für die Einbringung des Brennstoffs mit erhöhtem MA-Gehalt in innere, äußere sowie innere und äußere radiale Kernzone dargestellt. Die betragsmäßigen Abweichungen zwischen Serpent und FEM-Diff-3d betragen maximal 14 pcm.

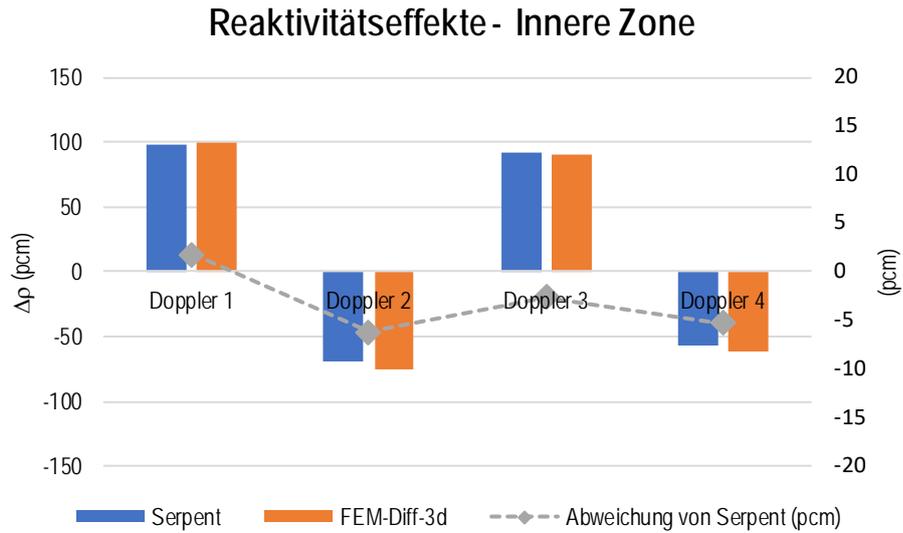


Abb. 5.3 Vergleich der mit Serpent und FEM-Diff-3d berechneten Reaktivitätsrückwirkungen für die vier Doppler-Szenarien

Die jeweiligen Differenzen sind durch die grauen Datenpunkte dargestellt (rechte Ordinate).

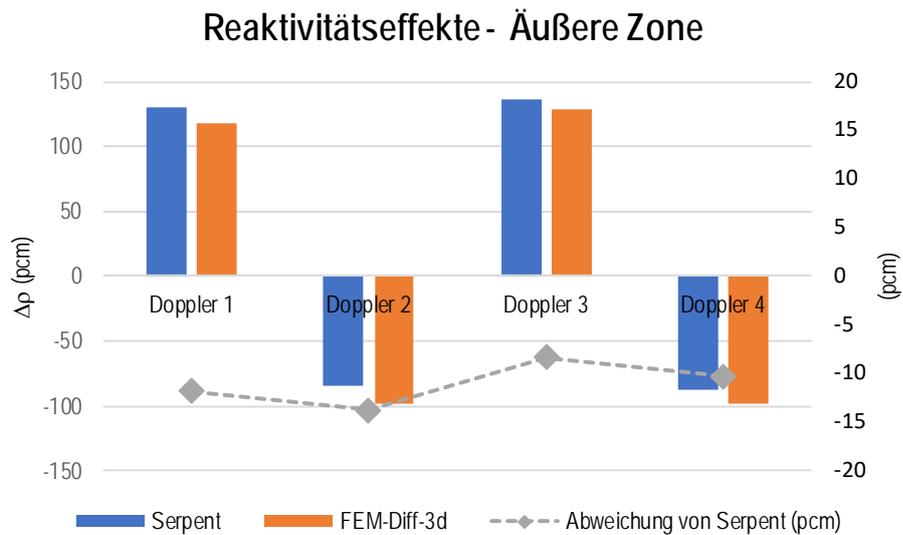


Abb. 5.4 Wie Abb. 5.3, jedoch für die äußere radiale Kernzone

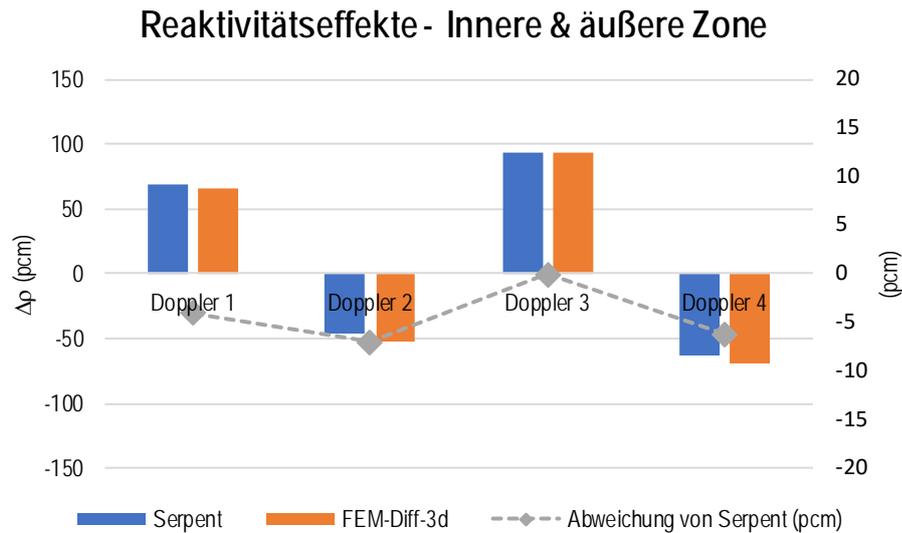


Abb. 5.5 Wie Abb. 5.3, jedoch für innere und äußere radiale Kernzone

Abschließend wurde untersucht, inwieweit die Void-Reaktivitätsrückwirkungen infolge der drei verschiedenen Arten der Einbringung von Brennstoff mit erhöhtem Anteil minorer Aktiniden beeinflusst wird. Zu diesem Zweck wurden die acht in Abschnitt 3.1 (s. Abb. 3.1) definierten Void-Szenarien betrachtet und die zugehörigen Reaktivitätseffekte berechnet. Die Ergebnisse in Tab. 5.3 zeigen, dass insbesondere der negative Effekt bei Voiding des oberen Plenums (void 7) betragsmäßig deutlich verringert wird, wobei die Verringerung für den Fall erhöhter MA-Beladung in der inneren radialen Kernzone größer ausfällt als für den Fall erhöhter MA-Beladung in der äußeren radialen Kernzone. Für Voidzustände innerhalb der Brennstoffzonen (void 8) wird der positive Voideffekt verstärkt.

Tab. 5.3 Änderung der Void-Rückwirkung bei unterschiedlichen Arten der Einbringung minorer Aktiniden in den Reaktorkern

Szenario		$\Delta\rho$ (pcm)		
		Äußere Zone	Innere Zone	Innere & äußere Zone
void 1	(Above IF)	-1204	-915	-512
void 2	(Upper IF)	511	675	452
void 3	(IB)	370	318	173
void 4	(Lower IF)	211	262	184
void 5	(Above OF)	-219	-289	-304
void 6	(OF)	456	364	986
void 7	(Above IF + Above OF)	-1388	-1137	-604
void 8	(Upper IF + IB + Lower IF + OF)	1546	1629	1800

5.2 AP 3.2: Erstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Brennstoffe mit Aktinidenbeladung

Für die in Abschnitt 5.1 durchgeführten deterministischen 3D-Kernberechnungen der vier Doppler-Szenarien wurden brennelementweise homogenisierte makroskopische Wirkungsquerschnitte mittels Serpent in 11 Energiegruppen berechnet, deren Gruppenstruktur in Tab. 3.1 angegeben ist. Dazu wurde das Serpent-Ganzkernmodell aus Abschnitt 5.1 verwendet und dahingehend erweitert, dass für jede axiale Zone der verschiedenen Brennelementtypen jeweils sog. Universen definiert wurden, über die jeweils homogenisiert wurde. Durch diese Vorgehensweise ist es möglich, für die Wirkungsquerschnittshomogenisierung die tatsächliche räumliche Neutronenflussverteilung heranzuziehen und nicht – wie sonst üblich – Approximationen des Neutronenflusses, die aus Brennelement-Modellen im unendlichen Gitter resultieren. Dies setzt die Simulation von einer größeren Anzahl von Neutronenschicksalen voraus, um in allen Universen akzeptable statistische Unsicherheiten zu gewährleisten. Allerdings ist diese Vorgehensweise insbesondere dann unpraktikabel, wenn nach thermohydraulischen Rückwirkungsgrößen parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken erstellt werden sollen, da dann für sämtliche Kombinationen von Werten der betrachteten thermohydraulischen Rückwirkungsgrößen jeweils 3D-Ganzkernrechnungen durchgeführt werden müssen. Für die in Abschnitt 5.1 gezeigten Void-Studien wurde daher HELIOS anstelle von Serpent verwendet, wobei die – ebenfalls in der genannten 11-Energiegruppen-Struktur erzeugten – Wirkungsquerschnitte nach dem Voidanteil parametrisiert wurden.

5.3 AP 3.3: Betrachtung der Sicherheitsaspekte ausgewählter technologischer Prozesse von P&T

Grundsätzlich ist während aller Prozessschritte in P&T die sichere Handhabung der spaltbaren Materialien zu gewährleisten. Insbesondere gilt dieses auch bei der Abtrennung der minoren Aktiniden aus dem abgebrannten Kernbrennstoff (Partitionierung) sowie bei der Herstellung, Handhabung und Lagerung des Transmutationsbrennstoffs. Ein wesentlicher Sicherheitsaspekt ist hierbei die Sicherstellung der Unterkritikalität während aller Prozessschritte. Die Gewährleistung der Unterkritikalität erfolgt dabei durch den Nachweis, dass während aller Prozessschritte und möglicher glaubwürdiger Unfallszenarien der Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} der dabei auftretenden Spaltstoffanordnungen immer unterhalb seines zulässigen Grenzwertes (typischerweise 0,95) bleibt. Eine Übersicht zur Kritikalitätssicherheit bei P&T-Prozessen und den dabei wesentlichen, zu berücksichtigten Einflussfaktoren ist z. B. in /REN 14/ zu finden. Bereits dort wurden u. a. die für Kritikalitätssicherheitsanalysen essenziellen nuklearen Daten als ein Aspekt mit weiterem Forschungsbedarf identifiziert. Ein Grund hierfür besteht u. a. in den vergleichsweise großen Unsicherheiten, mit denen die verfügbaren nuklearen Daten für die minoren Aktiniden, insbesondere Americium und Curium, behaftet sind. Um den Einfluss der aktuell vorliegenden Unsicherheiten in den nuklearen Daten für zukünftige Kritikalitätssicherheitsnachweise näher beurteilen zu können, wurden im vorliegenden Vorhaben kritische Anordnungen aus den minoren Aktiniden Neptunium, Americium und Curium diesbezüglich näher untersucht.

Die spaltbaren Isotope der minoren Aktiniden Neptunium, Americium und Curium, mit denen eine kritische Anordnung gebildet werden können, sind Np-235, Np-236, Np-237, Am-241, Am-242, Am-242m, Am-243, Cm-242, Cm-243, Cm-244, Cm-245, Cm-246, Cm-247, Cm-248 und Cm-250 /LAV 03/. Diese Nuklide werden in Reaktoren in Abhängigkeit vom Brennstoff, Abbrand und Bestrahlungsbedingungen in unterschiedlichen Konzentrationen erzeugt. In typischem kommerziellem Brennstoff, der unter typischen Abbrandbedingungen bestrahlt wurde, liegen nach einigen Jahren Abklingzeit von den genannten Nukliden hauptsächlich Np-237, Am-241, Am-243, Cm-243, Cm-244 und Cm-245 vor /BEH 18/. In geringen Mengen sind zusätzlich noch die Nuklide Np-236, Am-242m, Cm-242 sowie Cm-246 vorhanden, wohingegen die übrigen Nuklide (Np-235, Am-242, Cm-247, Cm-248 und Cm-250) lediglich als „Spurenelemente“ auftreten. Aufgrund der reaktivitätsdominierenden Uran- und Plutoniumisotope ist der Einfluss der minoren Aktiniden auf den Neutronenmultiplikationsfaktor in kommerziellem Brennstoff nur gering, so dass in Analysen für kommerziellen Brennstoff zumeist nur die in größeren

Mengen vorliegenden Nuklide der minoren Aktiniden berücksichtigt werden. Dagegen nimmt nach der Partitionierung der Einfluss der minoren Aktiniden auf den Neutronenmultiplikationsfaktor deutlich zu, bzw. die minoren Aktiniden können reaktivitätsdominierend werden, so dass dann auch die in geringen Mengen vorliegenden Nuklide für die Bestimmung des Neutronenmultiplikationsfaktors relevant werden können. Daher wurden in den weiteren Untersuchungen alle hier genannten Nuklide einbezogen.

Einen ersten Überblick zur Qualität der verfügbaren nuklearer Daten für die genannten Nuklide gibt Kap. 5.3.1. Um den Einfluss der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte bzw. die Verwendung verschiedener Bibliotheken auf den Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} auch quantitativ zu studieren, wurden kritische Anordnungen mit jeweils einem Isotop der minoren Aktiniden Neptunium, Americium und Curium betrachtet. Dazu wurden zum einen generische Anordnungen untersucht (Kap. 5.3.2), zum anderen kritische Experimente nachgerechnet (vgl. Kap. 5.3.3). Die generischen Anordnungen wurden zusätzlich zu den Experimenten betrachtet, da von letzteren nur eine geringe Anzahl mit den hier betrachteten minoren Aktiniden verfügbar ist.

5.3.1 Überblick zur Qualität der verfügbaren nuklearen Daten

Einen ersten Überblick über die Qualität der verfügbaren nuklearen Daten ermöglicht bereits ein Vergleich der in den Datenbibliotheken angegebenen Unsicherheiten der nuklearen Daten. Dazu wurden exemplarisch die Unsicherheiten der Spaltwirkungsquerschnitte sowie der Einfangwirkungsquerschnitte (n,γ) der genannten Nuklide aus den Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VII.1 /CHA 11/ und JENDL-4.0u /SHI 11/ miteinander sowie mit den Unsicherheiten entsprechenden Wirkungsquerschnitte der Nuklide U-235, U-238, Pu-239 und Pu-241 verglichen.

Generell zeigen die angegebenen Unsicherheiten bei allen Nukliden eine starke Energieabhängigkeit, häufig mit Bandbreiten für die angegebenen relativen Unsicherheiten von 5 % bis über 100 % für einen Wirkungsquerschnitt eines Nuklides. Oft treten dabei die größeren Unsicherheiten in den Resonanzbereichen der Wirkungsquerschnitte und für Neutronenenergien im MeV-Bereich auf. Dementsprechend kann je nach Neutronenspektrum des Anwendungsfalls dasselbe Nuklid mit deutlich unterschiedlichen Unsicherheiten in die jeweiligen Berechnungen eingehen. Daher ist es schwierig eine allgemeingültige Bewertung für einzelnen Nuklide abzugeben.

Insgesamt fällt beim Vergleich der angegebenen Unsicherheiten aber auf, dass für die Wirkungsquerschnitte der Nuklide Np-237, Am-241, Am-243, Cm-243, Cm-244 und Cm-245, welche von den minoren Aktiniden im typischen bestrahlten LWR-Brennstoff mit größeren Massenanteilen vorliegenden, in der Regel geringere Unsicherheiten angegeben werden als für die Wirkungsquerschnitte der übrigen Nuklide der minoren Aktiniden. Die Wirkungsquerschnitte dieser Nuklide wurden also, vermutlich wegen ihres größeren Einflusses auf die Reaktivität des bestrahlten Brennstoffs, insgesamt besser bestimmt als die Wirkungsquerschnitte der übrigen Nuklide. Abb. 5.6 gibt einige Beispiele für Spalt- und Einfangwirkungsquerschnitte der hier betrachteten Nuklide wieder.

Vergleicht man dagegen die angegebenen Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte der minoren Aktiniden z. B. mit denen der Wirkungsquerschnitte der für den kommerziellen Brennstoff reaktivitätsrelevanten Uran- und Plutoniumisotope, d. h. U-235, U-238, Pu-239 und Pu-241, so zeigt sich, dass für die Wirkungsquerschnitte dieser Uran- und Plutoniumisotope insgesamt nochmals deutlich geringere Unsicherheiten angegeben werden als für diejenigen der minoren Aktiniden. So liegen z. B. die angegebenen relativen Unsicherheiten der Spaltwirkungsquerschnitte der Nuklide U-235, Pu-239 und Pu-241 für weite Energiebereiche deutlich unter 5 %, wohingegen die entsprechenden Unsicherheiten im Fall der mit größeren Massenanteilen auftretenden minoren Aktiniden für weite Energiebereiche zumeist um 5 % – 10 % und im Fall der übrigen hier betrachteten minoren Aktiniden um 10 % – 20 %, in Einzelfällen auch mehr betragen. Auch die Energiebereiche, in denen deutlich größer Unsicherheitswerte von z. B. 30 % oder mehr angegeben werden, sind im Fall der minoren Aktiniden deutlich größer als für die hier betrachteten Uran- und Plutoniumisotope.

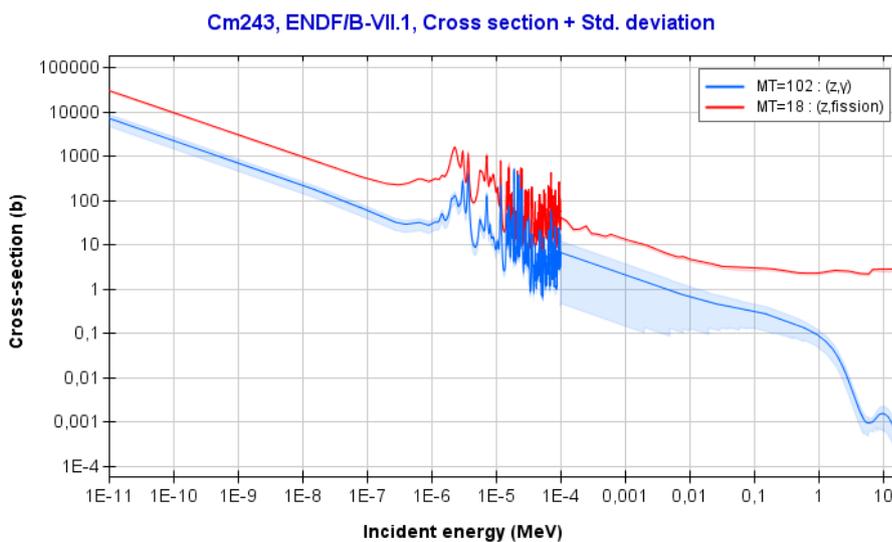
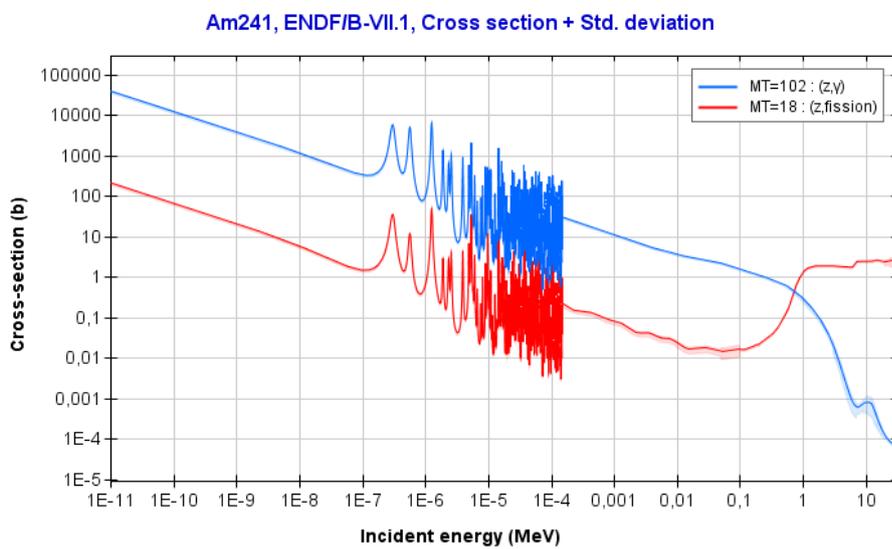
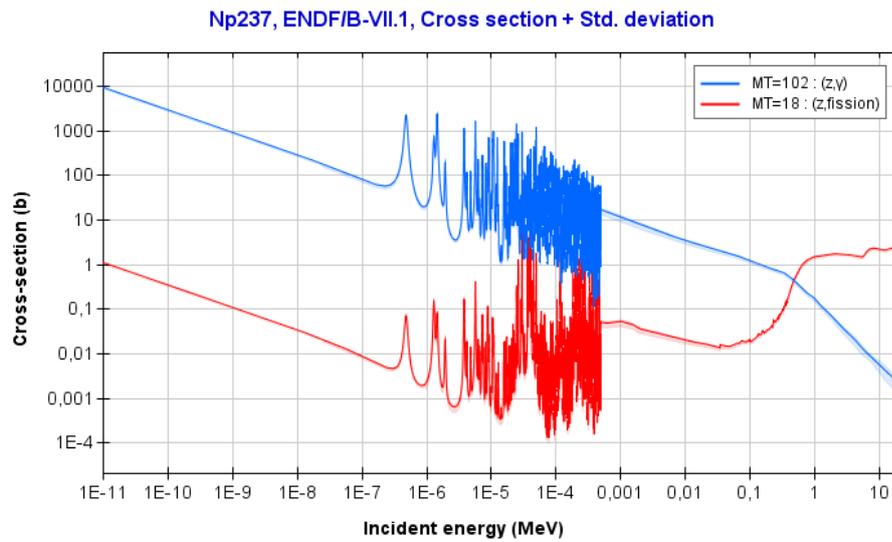


Abb. 5.6 Spalt- (rot) und Einfangwirkungsquerschnitt (blau) der Isotope Np-237, Am-241 und Cm-243 aus der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B VII.1

Für die Interpretation der Unsicherheiten ist allerdings zu beachten, dass die den Bibliotheken zugrundeliegende Datenformate, z. B. ENDF-6 /TRK 11/, keine Möglichkeiten zur Angabe asymmetrischer Unsicherheiten oder Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen bereitstellen, so dass die Unsicherheiten daher nur in Form eines symmetrischen neutronenenergieabhängigen Unsicherheitsbands wiedergegeben werden. Allerdings sind im Fall großer Unsicherheiten deutlich asymmetrische bzw. nicht normalverteilte Unsicherheiten für die evaluierten Wirkungsquerschnitte zu erwarten. Dies ergibt sich bereits aus der Tatsache, dass die Wirkungsquerschnittswerte durch Null nach unten begrenzt sind. Somit kann es sich bei angegebenen relativen Unsicherheiten in der Größenordnung von z. B. 50 % oder mehr nicht mehr um symmetrische normalverteilte Unsicherheiten handeln. Solche Unsicherheitswerte sollten daher eher als eine qualitative Aussage zur Genauigkeit der evaluierten Wirkungsquerschnitte denn als konkrete quantitative Unsicherheitsangabe interpretiert werden.

5.3.2 Generische kritische Anordnungen mit minoren Aktiniden

Als zu untersuchende generische Anordnungen wurden kritische Kugeln in zwei unterschiedlichen Varianten gewählt. So wurde bei der ersten Variante für alle betrachteten Nuklide eine Metallkugel ausschließlich aus dem jeweiligen Nuklid mit einem zusätzlichen Neutronenreflektor aus 30 cm Stahl angenommen. Mit dieser Konstellation erhält man ein im Wesentlichen schnell spaltendes System und kann damit hauptsächlich den Einfluss der Neutronenwirkungsquerschnitte auf den Neutronenmultiplikationsfaktor bei hohen Neutronenenergien untersuchen. Die zweite Variante besteht dagegen aus einer Kugel aus einer homogenen Mischung jeweils eines der thermisch spaltbaren Nuklide Np-236, Am-242, Am-242m, Cm-243, Cm-245 oder Cm-247 /LAV 03/ mit Wasser, umgeben von einer 30 cm dicken Kugelschale aus reinem Wasser als Neutronenreflektor. Auf diese Weise erhält man ein moderiertes und damit im Wesentlichen thermisch spaltendes System, mit dem so hauptsächlich der Einfluss der Neutronenwirkungsquerschnitte auf den Neutronenmultiplikationsfaktor bei niedrigen Neutronenenergien untersucht werden kann. Abb. 5.7 zeigt den schematischen Aufbau der genutzten Rechenmodelle. Um die Einflüsse der Unsicherheiten bzw. der Wirkungsquerschnitte der minoren Aktiniden aus verschiedenen Bibliotheken in Relation setzen zu können, wurden zum Vergleich die Rechnungen in gleicher Weise auch mit den Nukliden U-235 und Pu-239 durchgeführt.

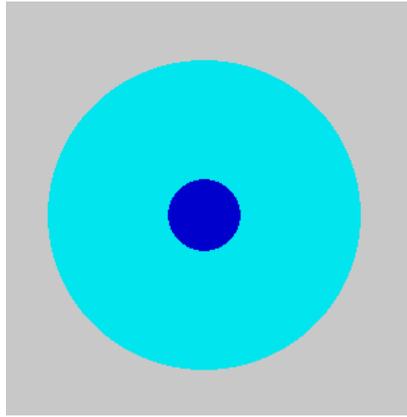


Abb. 5.7 Schematische Darstellung der Rechenmodelle mit zentraler Spaltmaterialkugel (blau) und umgebenden Neutronenreflektor (türkis)

Für die Berechnungen wurden die Kritikalitätssequenz CSAS1 basierend auf dem deterministischen Transportcode XSDRN wie auch die auf dem Monte Carlo-Neutronentransportcode KENO-VI basierende Sequenz CSAS6 des SCALE-Softwarepaket (Version 6.2.2) /REA 17/ eingesetzt. Die im Einzelnen hierfür genutzten Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind ENDF/B-VII0 in 238 Neutronenenergiegruppen- und continuous energy-Darstellung, ENDF/B-VII.1 in 252 Neutronenenergiegruppen- und continuous energy-Darstellung aus dem SCALE-Paket sowie die Bibliotheken JEFF-3.2 und JENDL-4.0u /SHI 11/ in continuous energy-Darstellung. Zwar ist die Sequenz CSAS1 für die Darstellung der sehr einfachen Kugelgeometrie ausreichend, allerdings liegen die Bibliotheken JEFF-3.2 und JENDL-4.0u nur in continuous energy-Darstellung vor, die nicht mit der Sequenz CSAS1 verwendet werden können. Um ferner konsistent mit den Experimentnachrechnungen (Kap. 5.3.3) zu sein, wurde daher ebenfalls die Sequenz CSAS6 genutzt.

Die Resultate aller Rechnungen sind in Tab. 5.4 bis Tab. 5.7 zusammengefasst. Die Genauigkeit bzw. Unsicherheit, mit der jeweils k_{eff} bestimmt wurde, beträgt für alle Rechnungen ≤ 10 pcm. Für die erzielten k_{eff} -Werte ist allerdings zu beachten, dass die Anpassung der jeweiligen Systemparameter (d. h. Kugelradien und ggf. Partialdichte der minoren Aktiniden im Wasser) zum Erzielen einer kritischen Anordnung mit der Kritikalitätssequenz CSAS1 und der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.1 in 252 Neutronenenergiegruppen-Darstellung vorgenommen wurde, so dass für diese Rechnungen der Neutronenmultiplikationsfaktor per Definition gleich 1,0 (± 100 pcm) ist, vgl. Tab. 5.4 und Tab. 5.5.

Die Abweichungen der k_{eff} -Werte von 1,0 der übrigen Rechnungen repräsentieren somit die Einflüsse der verschiedenen Wirkungsquerschnittsbibliotheken, der verschiedenen Parametrisierungen der Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte bzw. der unterschiedlichen Transportcodes.

Bei den jeweiligen Ergebnisse der beiden Sequenzen CSAS1 und CSAS6 mit identischen Wirkungsquerschnittsbibliotheken (entweder ENDF/B-VII.0 in 238 Neutronenenergiegruppen-Darstellung oder ENDF/B-VII.1 in 252 Neutronenenergiegruppen-Darstellung) fällt zunächst auf, dass die mit CSAS1 errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren in allen Fällen größer sind als die mit CSAS6 ermittelten Werte (Tab. 5.4 und Tab. 5.5). Im Fall der schnell spaltenden Systeme variiert der Unterschied in den Neutronenmultiplikationsfaktoren zwischen 100 pcm und 800 pcm. Dagegen liegt dieser Unterschied für die thermisch spaltenden Systeme lediglich zwischen 200 pcm und 300 pcm.

Bei Verwendung der Sequenz CSAS6 zeigen die mit den Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Energiegruppen-Darstellung erzielten Ergebnisse gegenüber den mit den Wirkungsquerschnittsbibliotheken in continuous energy-Darstellung erzielten Resultaten für die schnell spaltenden Systeme Differenzen bis zu 1.700 pcm. Dabei fällt auf, dass in der Regel die Rechnungen mit den Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Energiegruppenstruktur die größeren k_{eff} -Werte ergeben. Für die thermisch spaltenden Systeme beträgt dieser Unterschied nur bis zu 200 pcm. Hier führt dagegen die Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.1 in continuous energy-Darstellung zu durchweg höheren k_{eff} -Werte. Bei den Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VIII.0 zeigt sich dagegen keine solche Systematik. Die deutlich geringeren Unterschiede im k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme lässt sich darauf zurückführen, dass die Energiegruppenstrukturen gerade für die Verwendung bei thermischen Systemen konzipiert wurden.

Tab. 5.4 Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme (Referenzfälle in hellblau)

Nuklid	k_{eff} in Abhängigkeit von Wirkungsquerschnittsbibliothek und SCALE-Sequenz					
	ENDF/B-VII.0			ENDF/B-VII.1		
	238 Gruppen		ce	252 Gruppen		ce
	CSAS1	CSAS6	CSAS6	CSAS1	CSAS6	CSAS6
Np-235	0,9067	0,9011	0,8973	0,9997	0,9939	0,9916
Np-236	1,1378	1,1314	1,1209	1,0005	0,9947	0,9863
Np-237	1,0033	1,0008	1,0008	1,0008	0,9982	0,9996
Am-241	1,0020	0,9991	0,9992	1,0000	0,9970	0,9976
Am-242	1,0052	0,9984	0,9834	0,9998	0,9929	0,9772
Am-242m	1,0053	0,9985	0,9841	1,0001	0,9931	0,9779
Am-243	1,0049	1,0027	1,0029	0,9997	0,9977	0,9988
Cm-242	0,4710	0,4682	0,4681	0,9996	0,9937	0,9914
Cm-243	0,8207	0,8139	0,8024	1,0007	0,9929	0,9804
Cm-244	0,9873	0,9828	0,9813	0,9998	0,9952	0,9941
Cm-245	0,9883	0,9817	0,9662	1,0001	0,9931	0,9761
Cm-246	1,1546	1,1510	1,1471	0,9999	0,9968	0,9935
Cm-247	0,9680	0,9608	0,9474	1,0008	0,9931	0,9788
Cm-248	1,2284	1,2249	1,2230	1,0001	0,9971	0,9945
Cm-250	2,1647	2,1640	2,1584	0,9994	0,9991	0,9964
U-235	1,0056	1,0016	0,9878	1,0000	0,9960	0,9820
Pu-239	1,0032	0,9970	0,9895	0,9995	0,9934	0,9852

Tab. 5.5 Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme (Referenzfälle in hellblau)

Nuklid	k_{eff} in Abhängigkeit von Wirkungsquerschnittsbibliothek und SCALE-Sequenz					
	ENDF/B-VII.0			ENDF/B-VII.1		
	238 Gruppen		ce	252 Gruppen		ce
	CSAS1	CSAS6	CSAS6	CSAS1	CSAS6	CSAS6
Np-236	1,3263	1,3240	1,3241	1,0001	0,9985	0,9994
Am-242	1,0008	0,9982	0,9981	0,9996	0,9970	0,9978
Am-242m	1,0007	0,9982	0,9981	0,9998	0,9975	0,9981
Cm-243	1,0228	1,0200	1,0204	0,9997	0,9970	0,9979
Cm-245	1,0160	1,0135	1,0123	1,0005	0,9978	0,9996
Cm-247	1,0610	1,0584	1,0603	0,9998	0,9974	0,9988
U-235	1,0021	1,0009	1,0003	1,0007	0,9992	1,0001
Pu-239	1,0011	1,0001	0,9994	0,9997	0,9986	0,9994

Allein durch die Verwendung verschiedener Transportcodes sowie verschiedener Parametrisierungen der Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte können sich hier somit in der Summe für die schnell spaltenden Systeme Diskrepanzen in k_{eff} von bis zu 2.400 pcm ergeben. Dagegen sind diese Diskrepanzen für die thermisch spaltenden Systeme mit lediglich bis zu 400 pcm deutlich geringer.

Vergleicht man dagegen die mit der Sequenz CSAS6 und den verschiedenen Bibliotheken ENDF/B-VII.0, ENDF/B-VII.1, JEFF-3.2 und JENDL-4.0u in continuous energy-Darstellung errechneten Resultate, so zeigen wiederum die thermisch spaltenden Systeme insgesamt deutlich geringe Variationen in k_{eff} als die schnell spaltenden Systeme. Dieses deutet darauf hin, dass die Wirkungsquerschnitte bei niedrigen Neutronenenergien deutlich geringer zwischen den Bibliotheken variieren als bei hohen Energien. Einzige Ausnahme ist das Np-236, welches im thermischen System teils Unterschiede von mehreren 10.000 pcm in k_{eff} aufweist. Ferner zeigen die Nuklide Np-237, Am-241, Am-242m, Cm-244 und Cm-245 sowohl für schnell als auch thermisch spaltende Systeme mit bis zu etwa 3000 pcm die insgesamt betrachtet geringsten Variationen im k_{eff} im Vergleich zu den übrigen Nukliden der minoren Aktiniden. Mit Ausnahme des Nuklids Am-242m zeichnete sich dieses Verhalten bereits bei den qualitativen Betrachtungen in Kap. 5.3.1 ab. Für alle weiteren Nuklide liegen zumeist deutlich größere Variationen in ihren Neutronenmultiplikationsfaktoren vor. Extrem großen Unterschiede von mehr als 10.000 pcm weisen vor allem die Nuklide Np-236, Cm-242, Cm-248 und Cm-250 sowie das Nuklid Cm-243 für das schnell spaltende System auf. In einigen Fällen (Cm-242 und Cm-250) unterscheiden sich die Multiplikationsfaktoren sogar um mehr als einen Faktor 2. Diese Nuklide sind ebenfalls bei den qualitativen Betrachtungen durch vergleichsweise große angegebene Unsicherheiten in ihren Wirkungsquerschnitten aufgefallen.

Im Vergleich der Bibliotheken als Ganzes zeigt sich, dass die größten Unterschiede zwischen den Neutronenmultiplikationsfaktoren immer im Vergleich mit der Bibliothek ENDF/B-VII.0 auftreten. Im Vergleich der anderen Bibliotheken untereinander treten dagegen insgesamt geringere Unterschiede auf. Am ähnlichsten sind sich die Bibliotheken ENDF/B-VII.1 und JENDL-4.0u, d. h. sie zeigen mit Differenzen im k_{eff} aller Neptunium- und Curium-Isotope von weniger als 500 pcm und im k_{eff} aller Americium-Isotope zwischen 1.400 pcm und 3.700 pcm die geringsten Unterschiede. Dieses gilt sowohl für die schnell spaltenden Systeme wie auch für die thermisch spaltenden Systeme.

Betrachtet man die Variationen im k_{eff} der Nuklide U-235 und Pu-239, so zeigen diese lediglich Unterschiede in k_{eff} von bis zu 600 pcm im Fall der schnell spaltenden Systeme und von bis zu 200 pcm im Fall der thermisch spaltenden Systeme. Somit sind die Variationen im k_{eff} der minoren Aktiniden insgesamt deutlich größer als die von U-235 und Pu-239, was sich wiederum mit den Aussagen den qualitativen Betrachtungen (Kap. 5.3.1) deckt.

Tab. 5.6 Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme bei Verwendung der SCALE-Sequenz CSAS6

Nuklid	k_{eff} in Abhängigkeit der Wirkungsquerschnittsbibliothek			
	ENDF/B-VII.0 (ce)	ENDF/B-VII.1 (ce)	JEFF-3.2 (ce)	JENDL-4.0u (ce)
Np-235	0,8973	0,9916	0,8964	0,9944
Np-236	1,1209	0,9863	0,8906	0,9897
Np-237	1,0008	0,9996	0,9854	1,0013
Am-241	0,9992	0,9976	1,0274	1,0350
Am-242	0,9834	0,9772	0,9155	0,9424
Am-242m	0,9841	0,9779	0,9562	0,9527
Am-243	1,0029	0,9988	0,9330	0,9627
Cm-242	0,4681	0,9914	1,0154	0,9938
Cm-243	0,8024	0,9804	0,9712	0,9841
Cm-244	0,9813	0,9941	1,0116	0,9954
Cm-245	0,9662	0,9761	0,9644	0,9804
Cm-246	1,1471	0,9935	1,0122	0,9951
Cm-247	0,9474	0,9788	0,9399	0,9832
Cm-248	1,2230	0,9945	0,9477	0,9960
Cm-250	2,1584	0,9964	1,0645	0,9967
U-235	0,9878	0,9820	0,9844	0,9839
Pu-239	0,9895	0,9852	0,9869	0,9868

Tab. 5.7 Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme bei Verwendung der SCALE-Sequenz CSAS6

Nuklid	keff in Abhängigkeit der Wirkungsquerschnittsbibliothek			
	ENDF/B-VII.0 (ce)	ENDF/B-VII.1 (ce)	JEFF-3.2 (ce)	JENDL-4.0u (ce)
Np-236	1,3241	0,9994	0,8621	1,0014
Am-242	0,9981	0,9978	0,9981	1,0302
Am-242m	0,9981	0,9981	0,9991	1,0119
Cm-243	1,0204	0,9979	0,9978	1,0009
Cm-245	1,0123	0,9996	0,9986	1,0016
Cm-247	1,0603	0,9988	0,9989	1,0015
U-235	1,0003	1,0001	0,9997	1,0018
Pu-239	0,9994	0,9994	0,9956	1,0017

Neben der Verwendung unterschiedlicher Wirkungsquerschnittsbibliotheken zur Abschätzung des Einflusses von Unsicherheiten in den Wirkungsquerschnitten auf den Neutronenmultiplikationsfaktor wurden entsprechende Unsicherheitsanalysen mit der Sequenz TSUNAMI-1D, basieren auf der Sequenz CSAS1, des SCALE-Pakets /REA 17/ und den enthaltenen Kovarianzmatrizen für die Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 durchgeführt. TSUNAMI nutzt dazu Störungstheorie erster Ordnung, um Sensitivitäten des Neutronenmultiplikationsfaktors k_{eff} auf die einzelnen Wirkungsquerschnitte zu ermitteln und daraus eine Unsicherheit auf k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte abzuschätzen. Aufgrund der nicht direkt verfügbaren Kovarianzmatrizen für die Wirkungsquerschnittsbibliotheken JEFF-3.2 und JENDL-4.0u konnten diese Bibliotheken nicht betrachtet werden. Auch auf die Verwendung der dreidimensionalen Variante TSUNAMI-3D-K6, basierend auf der Sequenz CSAS6 wurde aufgrund ihrer erheblich längeren Rechenzeiten und da keine qualitativ anderen Ergebnisse zu erwarten sind, verzichtet.

Die so ermittelten Unsicherheiten in k_{eff} sind in Tab. 5.8 und Tab. 5.9 zusammengefasst. Die Ergebnisse für die schnell spaltenden Systeme spiegeln qualitativ das gleiche Bild wider, wie es sich aus den Vergleichen der Neutronenmultiplikationsfaktoren bei Verwendung verschiedener Wirkungsquerschnittsbibliotheken ergibt (vergl. Tab. 5.6). Auch hier fallen die Nuklide Np-237, Am-241 und Cm-245 durch vergleichsweise geringe Unsicherheiten in k_{eff} mit Werten um 3.000 pcm bzw. 4.000 pcm auf. Ebenfalls ähnlich geringe Unsicherheiten weisen die Nuklide Cm-243 und Cm-247 auf, was allerdings nach den vorrangegangenen Resultaten für diese beiden Nuklide so nicht zu erwarten wäre. In diesen Fällen überschreiten einige Variationen der mit verschiedenen Bibliotheken errechneten k_{eff} -Werten die hier mit TSUNAMI abgeschätzten Unsicherheiten. Dieses Verhalten zeigen auch weitere Nuklide, wie Cm-242 und Cm-246. Hier liegen entweder für diese Wirkungsquerschnitte größere Unterschiede zwischen den verschiedenen Bibliotheken vor, als die angegebenen Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte vermuten lassen, ggf. sind diese Unsicherheiten auch zu klein angegeben oder TSUNAMI schätzt methodisch bedingt zu geringe Unsicherheiten für k_{eff} ab. Dagegen zeigen die Nuklide Am-242m und Cm-244 hier vergleichsweise große Unsicherheiten im k_{eff} , die nach den obigen Untersuchungen kleiner zu erwarten wären, was allerdings keinen Widerspruch darstellt.

Im Fall der thermisch spaltenden Systeme werden durch TSUNAMI mit Werten größer 3500 pcm insgesamt größere Unsicherheiten auf k_{eff} bestimmten, als sie nach den Variationen in k_{eff} aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Wirkungsquerschnittsbibliotheken zu erwartet wären (Tab. 5.7). Lediglich für das Nuklid Np-236 stimmen die hier ermittelten sehr großen Unsicherheiten in etwa mit den Variationen in k_{eff} aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Wirkungsquerschnittsbibliotheken überein.

Für die Nuklide U-235 und Pu-239 werden dagegen von TSUNAMI Unsicherheiten in k_{eff} um 1.000 pcm abgeschätzt. Auch diese Werte sind größer als die Variationen der mit verschiedenen Bibliotheken errechneten k_{eff} -Werte. Im Vergleich sind diese Unsicherheiten aber deutlich geringer als diejenigen, die für die betrachteten Nuklide der minoren Aktiniden abgeschätzt wurden. Entsprechend zeigen sich auch hier wieder qualitativ dieselben Relationen wie bereits bei den mit verschiedenen Bibliotheken errechneten k_{eff} -Werten.

Tab. 5.8 Unsicherheiten der Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte

Nuklid	Unsicherheit von k_{eff} in Abhängigkeit der Wirkungsquerschnittsbibliothek			
	ENDF/B-VII.0		ENDF/B-VII.1	
	rel. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [%]	abs. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [pcm]	rel. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [%]	abs. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [pcm]
Np-235	20,83	18884	19,32	19316
Np-236	25,61	29135	25,40	25410
Np-237	4,14	4152	4,15	4157
Am-241	5,52	5528	5,56	5559
Am-242	21,15	21259	21,16	21153
Am-242m	11,45	11508	11,50	11500
Am-243	9,00	9044	9,03	9030
Cm-242	10,15	4783	6,18	6175
Cm-243	3,34	2744	3,13	3134
Cm-244	7,03	6941	6,74	6736
Cm-245	3,34	3298	3,32	3320
Cm-246	5,56	6420	5,59	5588
Cm-247	3,71	3587	3,62	3621
Cm-248	6,59	8093	6,16	6165
Cm-250	25,47	55144	43,06	43034
U-235	1,47	1476	1,44	1441
Pu-239	0,71	715	0,70	703

Tab. 5.9 Unsicherheiten der Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte

Nuklid	Relative Unsicherheit von k_{eff} in Abhängigkeit der Wirkungsquerschnittsbibliothek			
	ENDF/B-VII.0		ENDF/B-VII.1	
	rel. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [%]	abs. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [pcm]	rel. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [%]	abs. $\sigma(k_{\text{eff}})$ [pcm]
Np-236	30,17	30171	30,18	40025
Am-242	20,60	20590	20,60	20615
Am-242m	3,64	3637	3,64	3640
Cm-243	6,19	6187	6,31	6455
Cm-245	6,65	6650	6,70	6808
Cm-247	10,41	10405	10,93	11596
U-235	1,08	1083	1,08	1085
Pu-239	0,88	883	0,88	884

5.3.3 Kritische Experimente mit minoren Aktiniden

Eine wesentliche Quelle für Daten zu kritischen Experimenten ist das „International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments“ (ICSBEP) der OECD/NEA /NEA 16/. Diese Sammlung von Experimentbeschreibungen enthält lediglich fünf Experimente, welche die hier betrachteten minoren Aktiniden beinhalten, mit den Bezeichnungen SPEC-MET-FAST-001, SPEC-MET-FAST-003, SPEC-MET-FAST-008, SPEC-MET-FAST-011 und SPEC-MET-FAST-014. Die ersten zwei genannten Experimente sind Differenzmessungen („replacement measurements“), bei denen kleine Proben Cm-244 bzw. Np-237 in hochangereicherte Uran- bzw. Plutoniumkugel eingebracht werden und dann die Änderungen der Reaktivität gegenüber einer leeren Probenposition bestimmt werden. Bei den anderen drei Experimenten handelt es sich um konventionelle kritische Experimente, jeweils aus einer Kugel aus Np-237, welche durch Schalen aus hochangereichertem Uran und ggf. einem weiteren Reflektor umgeben ist. Da letztere drei Experimente SPEC-MET-FAST-008, -011 und -014 sowohl bezüglich ihrer Nachrechnung als auch bezüglich deren Auswertung einfach als die Differenzmessungen zu behandeln sind, wurden im Rahmen des vorliegenden Projekts diese drei konventionellen kritischen Experimente betrachtet.

Der schematische Aufbau dieser der kritischen Experimente SPEC-MET-FAST-008, und -011 ist in Abb. 5.8 und Abb. 5.9 dargestellt. Das Experiment SPEC-MET-FAST-014 entspricht in seinem Aufbau dem Experiment SPEC-MET-FAST-011, mit dem Unterschied, dass ein Stahlreflektor anstelle des Polyethylen-Reflektors verwendet wurde. Details zur Experimentbeschreibung sind dem ICSBEP /NEA 16/ und zur Experimentnachrechnung dem technischen Bericht zu entnehmen.

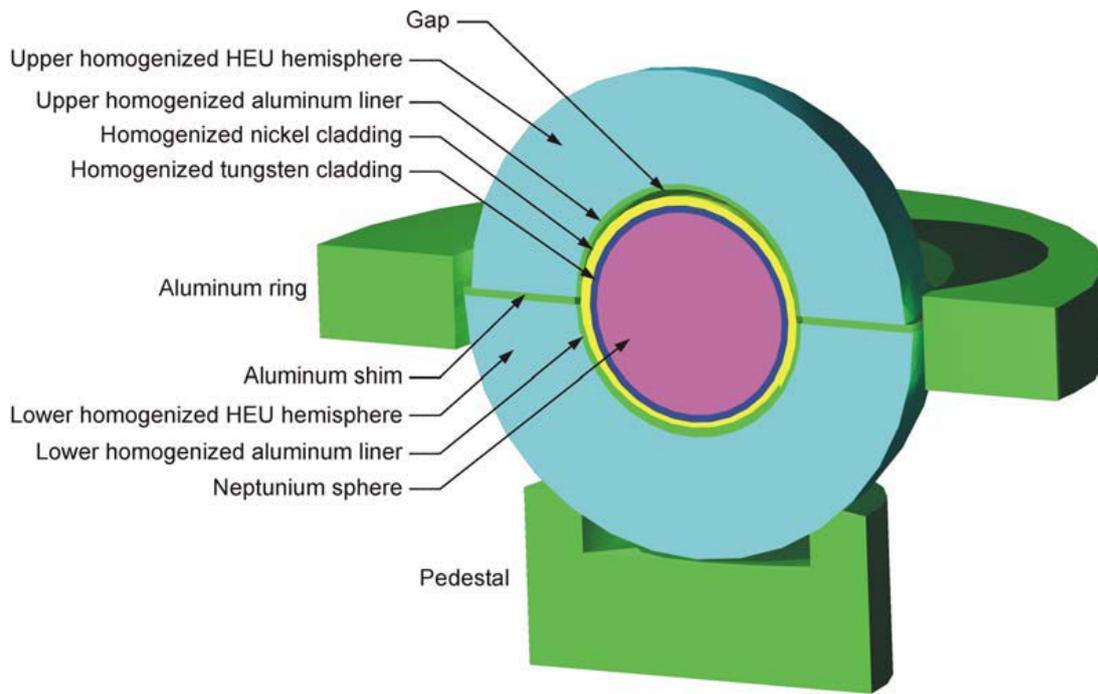


Abb. 5.8 Schematische Darstellung des Experiments SPEC-MET-FAST-008

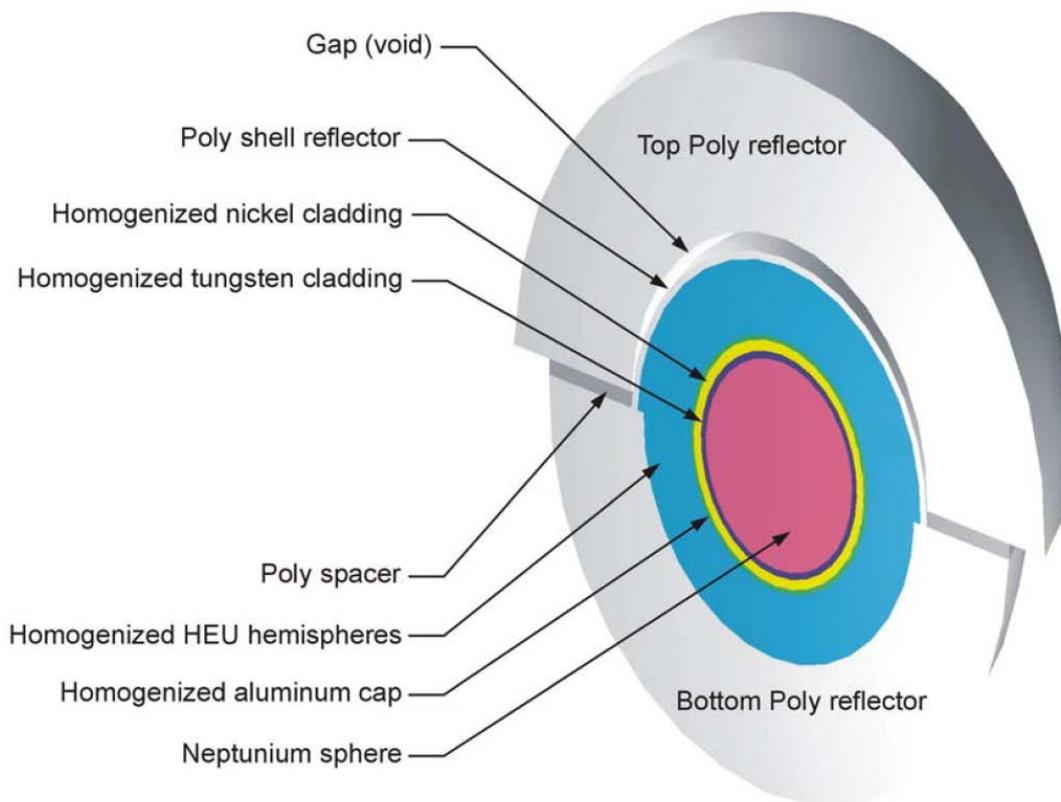


Abb. 5.9 Schematische Darstellung des Experiments SPEC-MET-FAST-011

Die Nachrechnung der drei Experimente SPEC-MET-FAST-008, -011 und -014 erfolgte mithilfe der Sequenz CSAS6 des SCALE-Pakets (Version 6.2.2), da nur mit dieser Sequenz der Spalt zwischen der Neptuniumkugel und der oberen Urankugelhalbschale bzw. zwischen der oberen Uran- und Reflektorkugelhalbschale im Detail nachgebildet werden kann. Als Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden die Bibliotheken ENDF/B-VII.1 in 252 Energiegruppen-Darstellung sowie ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 in continuous energy-Darstellung jeweils aus dem SCALE-Paket, wie auch die Bibliotheken JEFF-3.2 und JENDL-4.0u in continuous energy-Darstellung genutzt. Neben den Nachrechnungen der Neutronenmultiplikationsfaktoren wurde auch Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse mithilfe der auf der Sequenz CSAS6 basierenden TSUNAMI-Sequenz TSUNAMI-3D-K6 durchgeführt, um so die Einflüsse der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte auf die errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren zu analysieren. Dazu wurde hier aufgrund der erheblichen Rechenzeiten lediglich die Bibliothek ENDF/B-VII.1 in der 252 Energiegruppen-Darstellung herangezogen.

Die errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren sind in Tab. 5.10 und Tab. 5.11 zusammengestellt. Deren statistischen Unsicherheiten betragen dabei in allen Fällen $\pm 0,0001$ ($= \pm 10$ pcm). Im Vergleich zeigen die Neutronenmultiplikationsfaktoren je Experiment Unterschiede zwischen etwa 100 pcm und 500 pcm. Damit weisen die Bibliotheken hier eine ähnlich gute Übereinstimmung in den errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren auf, wie sie auch für die generischen Anordnungen in Kap. 5.3.2 vorliegt. Letztere zeigen in einigen Fällen sogar deutlich größere Diskrepanzen in k_{eff} . Zu den experimentellen Werten weisen die errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren dagegen Diskrepanzen um etwa 700 pcm bis etwa 1.500 pcm auf, wobei hier die errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren für alle drei Experimente die experimentellen Werte unterschätzen. Im Verhältnis zu anderen Experimentnachrechnungen sind diese Unterschiede zwar vergleichsweise groß, dennoch sind Unterschiede in solcher Größenordnung nicht ungewöhnlich und z. B. auch für Experimente mit ausschließlich Uran als Spaltmaterial (vergl. z. B. /BEH 14/, wobei es sich dabei um Systeme mit niedriger Anreicherung und thermischem Spektrum handelt), zu beobachten.

Tab. 5.10 Experimentelle und mit ENDF/B-VII.1 errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren der betrachteten kritischen Experimente

Experiment	Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff}		
	Benchmark	ENDF/B-VII.1, 252 Energiegruppen	ENDF/B-VII.1, ce
SPEC-MET-FAST-008	1,0026 ± 0,0034	0.9938	0.9948
SPEC-MET-FAST-011	1,0017 ± 0,0029	0.9946	0.9936
SPEC-MET-FAST-014	0,9993 ± 0,0039	0.9921	0.9887

Tab. 5.11 Gegenüberstellung der errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren in Abhängigkeit der genutzten Wirkungsquerschnittsbibliothek

Experiment	k_{eff} in Abhängigkeit der Wirkungsquerschnittsbibliothek			
	ENDF/B-VII.0 ce	ENDF/B-VII.1 ce	JEFF-3.2 ce	JENDL-4.0u ce
SPEC-MET-FAST-008	0.9949	0.9948	0.9909	0.9955
SPEC-MET-FAST-011	0.9939	0.9936	0.9899	0.9937
SPEC-MET-FAST-014	0.9889	0.9887	0.9843	0.9895

Die mit TSUNAMI ermittelten Sensitivitäten von k_{eff} auf die totalen Wirkungsquerschnitte sind exemplarisch für die jeweils dominierenden Nuklide für alle Experimente in Tab. 5.12 zusammengefasst, wobei hier diese Sensitivität anschaulich als die relative Änderung des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der relativen Änderung des jeweiligen totalen Wirkungsquerschnitts interpretiert werden kann. Dabei wurde als Grenze für die Aufnahme eines Nuklides in Tab. 5.12 eine Sensitivität größer 0,001 gewählt.

Für alle Experimente zeigt sich, dass der jeweilige Neutronenmultiplikationsfaktor die größte Sensitivität auf den totalen U-235-Wirkungsquerschnitt aufweist. Die Sensitivität auf den totalen Np-237-Wirkungsquerschnitt folgt erst an zweiter Stelle, mit jeweils einem um einen Faktor 3 – 5 geringeren Wert. Absteigend folgen dann die Sensitivitäten auf die totalen Wirkungsquerschnitte der Struktur- bzw. Reflektormaterialien sowie auf die totalen Wirkungsquerschnitte der übrigen Uranisotope. Auch die Sensitivitäten auf die verschiedenen einzelnen Wirkungsquerschnitte der beiden Nuklide U-235 und Np-237 zeigen qualitativ das gleiche Bild, d. h. die Sensitivitäten auf die einzelnen U-235-Wirkungsquerschnitte sind in aller Regel größer als die Sensitivitäten auf die entsprechenden Np-237-Wirkungsquerschnitte. Entsprechend wird in diesen Experimenten der Neutronenmultiplikationsfaktor, bezogen auf die Wirkungsquerschnitte, in erster Linie von der Uranschale und erst an zweiter Stelle von dem Neptunium-Kern beeinflusst.

Damit wirken sich aber auch Unsicherheiten in den Np-237-Wirkungsquerschnitten bzw. Abweichungen ihrer evaluierten Werte von ihren „wahren“ Werten hier deutlich weniger stark auf k_{eff} aus als gleichgroße Unsicherheiten in den U-235-Wirkungsquerschnitten bzw. als gleichgroße Abweichungen von deren „wahren“ Werten.

Tab. 5.12 Größte Sensitivitäten von k_{eff} auf totale Wirkungsquerschnitte in den Experimenten SPEC-MET-FAST-008, -011 und -014

Nuklid / Element	Sensitivität $S_{k,\Sigma}$ von k_{eff} auf den totalen Wirkungsquerschnitt	Nuklid / Element	Sensitivität $S_{k,\Sigma}$ von k_{eff} auf den totalen Wirkungsquerschnitt
SPEC-MET-FAST-008		SPEC-MET-FAST-014	
U-235	0.6146	U-235	0.5063
Np-237	0.1232	Np-237	0.1456
Al-27	0.0146	Fe-56	0.1060
U-238	0.0133	Al-27	0.0142
U-234	0.0055	Fe-54	0.0129
U-236	0.0015	U-238	0.0079
Ni-58	-0.0015	Fe-57	0.0060
SPEC-MET-FAST-011		U-234	0.0042
U-235	0.3879	Ni-58	-0.0017
Np-237	0.1312	U-236	0.0010
C	0.0737		
H	0.0663		
U-238	0.0061		
U-234	0.0027		
Ni-58	-0.0010		

Mithilfe der Sensitivitäten errechnet TSUNAMI zudem Unsicherheiten auf den Neutronenmultiplikationsfaktor aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte. Die Resultate dieser Unsicherheitsanalyse sind in Tab. 5.13 bis Tab. 5.15 für die einzelnen Experimente wiedergegeben, wobei sich diese Zusammenfassungen auf Unsicherheitsbeiträge größer 0,1 % beschränken, welche aber bereits den jeweils wesentlichen Teil der Gesamtunsicherheiten ausmachen. Diese Resultate zeigen, dass für alle hier betrachteten Experimente die Unsicherheit des Einfangwirkungsquerschnitts von U-235 den jeweils größten Beitrag zur wirkungsquerschnittsbedingten Unsicherheit von k_{eff} liefert. Die nächstkleineren Beiträge ergeben sich jeweils aus den Unsicherheiten des Spaltwirkungsquerschnitts und des Spaltspektrums des Np-237. Die weiteren nächstkleineren Beiträge unterscheiden sich je nach Experiment, sie ergeben sich aber bis zu einem Absolutbetrag von 0, 1 % bis auf eine Ausnahme im Fall des Experiments SPEC-

MET-FAST-014 ausschließlich durch Unsicherheiten verschiedener Wirkungsquerschnitte von U-235 oder Np-237. Folglich ist die wirkungsquerschnittsbedingte Unsicherheit in k_{eff} hauptsächlich durch die Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte von U-235 und Np-237 gegeben, wohingegen die Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte der weiteren Nuklide nur eine untergeordnete Rolle spielen.

In der Summe führen die Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte zu einer Unsicherheit in k_{eff} von insgesamt etwa 1,1 % $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$ bis 1,3 % $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$. Die zu beobachtenden Diskrepanzen zwischen den errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren und ihren experimentellen Werten könnten somit durch die Unsicherheiten in den Wirkungsquerschnitten bereits erklärt werden. Vergleicht man diese Unsicherheiten mit denjenigen der generischen Anordnungen, so fällt auf, dass sie deutlich geringer sind als die entsprechende Unsicherheit in k_{eff} für die Np-237-haltige generische Anordnung, aber in etwa der Unsicherheit in k_{eff} für die schnell spaltende U-235-haltige Anordnung entspricht. Dieses Verhalten ist eine Folge der geringen Sensitivität von k_{eff} auf die Np-237-Wirkungsquerschnitte in den hier betrachteten Experimenten.

Summiert man die Einzelbeiträge zu den Unsicherheiten in k_{eff} nuklidweise (quadratisch) auf, so zeigt sich, dass die Unsicherheiten der Np-237-Wirkungsquerschnitte und die der U-235-Wirkungsquerschnitte jeweils einen Gesamtbeitrag zur Unsicherheit in k_{eff} von etwa 0,8 % $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$ liefern. Also ist der jeweilige Gesamtbeitrag zur Unsicherheit in k_{eff} der Np-237-Wirkungsquerschnitte etwa so groß wie derjenige der Unsicherheiten der U-235-Wirkungsquerschnitte, obwohl die Np-237-Wirkungsquerschnitte nach den Betrachtungen in Kap. 5.3.2 bzw. Kap. 5.3.3 die deutlich größeren Unsicherheiten aufweisen. Die trotzdem etwa gleich großen Gesamtbeiträge der beiden Nuklide sind hier eine Folge der unterschiedlichen Sensitivitäten von k_{eff} auf die Wirkungsquerschnitte, wie bereits oben diskutiert.

Insgesamt sind damit diese Ergebnisse der Experimentnachrechnungen konsistent mit den vorangegangenen Untersuchungen. Allerdings verhindert die im Vergleich geringere Sensitivität der Neutronenmultiplikationsfaktoren auf die Np-237-Wirkungsquerschnitte, dass sich die Unsicherheiten in den Np-237-Wirkungsquerschnitten direkt in den Nachrechnungen der Neutronenmultiplikationsfaktoren z. B. durch deutliche Abweichungen vom jeweiligen experimentellen Wert niederschlagen. Eine Interpretation der Nachrechnungen erfordert hier immer die Berücksichtigung der U-235-Wirkungsquerschnitte.

Tab. 5.13 Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-008

Kovarianzmatrixelement		rel. Unsicherheitsbeitrag zu k_{eff} [% $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$]
u-235 n,gamma	u-235 n,gamma	0.6241
np-237 fission	np-237 fission	0.4607
np-237 chi	np-237 chi	0.4579
u-235 n,n'	u-235 elastic	-0.3862
u-235 n,n'	u-235 n,n'	0.3847
np-237 nubar	np-237 nubar	0.2898
u-235 chi	u-235 chi	0.2669
u-235 elastic	u-235 n,gamma	0.2586
u-235 elastic	u-235 elastic	0.2354
u-235 fission	u-235 fission	0.2081
np-237 n,n'	np-237 fission	0.1647
np-237 n,n'	np-237 n,n'	0.1616
np-237 n,gamma	np-237 n,gamma	0.1095
Gesamtunsicherheit (quadratisch summiert)		1.1019

Tab. 5.14 Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-011

Kovarianzmatrixelement		rel. Unsicherheitsbeitrag zu k_{eff} [% $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$]
u-235 n,gamma	u-235 n,gamma	0.6740
np-237 fission	np-237 fission	0.4848
np-237 chi	np-237 chi	0.4281
np-237 nubar	np-237 nubar	0.3094
u-235 n,n'	u-235 n,n'	0.2120
u-235 n,n'	u-235 elastic	-0.1923
np-237 n,n'	np-237 fission	0.1671
np-237 n,n'	np-237 n,n'	0.1639
u-235 fission	u-235 fission	0.1451
np-237 n,gamma	np-237 n,gamma	0.1190
u-235 elastic	u-235 n,gamma	0.1189
Gesamtunsicherheit (quadratisch summiert)		1.0575

Tab. 5.15 Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-014

Kovarianzmatrixelement		rel. Unsicherheitsbeitrag zu k_{eff} [% $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}$]
u-235 n,gamma	u-235 n,gamma	0.6710
np-237 fission	np-237 fission	0.5532
np-237 chi	np-237 chi	0.5519
fe-56 elastic	fe-56 elastic	0.5187
np-237 nubar	np-237 nubar	0.3419
u-235 chi	u-235 chi	0.2662
u-235 n,n'	u-235 elastic	-0.2113
np-237 n,n'	np-237 fission	0.2007
np-237 n,n'	np-237 n,n'	0.2006
u-235 n,n'	u-235 n,n'	0.1953
u-235 elastic	u-235 n,gamma	0.1908
u-235 fission	u-235 fission	0.1904
u-235 elastic	u-235 elastic	0.1353
np-237 n,gamma	np-237 n,gamma	0.1336
Gesamtunsicherheit (quadratisch summiert)		1.3164

6 AP 4: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

6.1 AP 4.1: Weiterentwicklungen in ATHLET

6.1.1 Weiterentwicklung des Modellumfangs zur Beschreibung des Siedens von Natrium in Kühlkreisläufen

6.1.1.1 Modellierung nichtkondensierender Gase

Auch flüssigmetallgekühlte Reaktoren brauchen eine Vorrichtung, die dem Kühlsystem einen kontrollierten Druck aufprägt. Anders als im wassergekühlten Reaktor, wo hierzu Kühlmittel zum Sieden gebracht wird, wird hier über ein Polstergas (z. B. Argon) 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 Ausgleichsbehälter modellieren, der teilweise mit Blei, LBE oder Natrium gefüllt ist und darüber eines der in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase enthält. Entleert sich der Ausgleichsbehälter z. B. infolge eines Kühlmittelverlustes, so kann das Polstergas in den Kühlkreislauf gelangen und sich dort verteilen. Der Transport und die Konzentration des Gases können mit ATHLET berechnet werden.

Natrium ist in den meisten Anwendungen deutlich unterkühlt. Bei einer typischen Kernaustrittstemperatur von 550 °C liegt der Dampfpartialdruck bei etwa 0.01 bar /ANL 95/. Unter diesen Bedingungen könnte Natrium noch wie nichtsiedendes Blei oder LBE modelliert werden (so wie bisher). Da Natrium hier aber als möglicherweise siedendes Medium betrachtet wird, stellt sich bei zweiphasiger Strömung immer der zur Flüssigkeitstemperatur gehörende Dampfpartialdruck ein. Es kann also kein Gemisch mehr geben mit reiner Flüssigkeit und reinem Inertgas. Insofern nähert sich nun die MC-Modellierung der Wasser-spezifischen Vorgehensweise an.

Wie bei Wasser werden an Phasengrenzflächen Verdampfung und Kondensation simuliert. Dabei kommen die für Wasser verwendeten, speziell dafür entwickelten Modelle zum Einsatz, wobei natürlich die Stoffgrößen von Natrium angewendet werden. Zusätzlich wird bei zweiphasiger Strömung bzw. am Gemischspiegel noch wie bisher ein Wärmestrom zwischen Flüssigkeit und Gas, also Dampf, mit der oben beschriebenen Methode berechnet. Bei zweiphasigen Bedingungen mit niedrigem Dampfpartialdruck und hohem Gasanteil, wo es allenfalls zu geringen Massenaustauschraten kommt, soll damit der Temperatenausgleich zwischen Flüssigkeit und Gas modelliert werden.

Eine weitere Aufgabe bei der Modellierung von zweiphasigen Zuständen bei Anwesenheit von Inertgasen ist die Initialisierung der (noch) nichtexistierenden Dampfphase hinsichtlich Temperatur und Gasgehalt. Zwar hat der thermodynamische Zustand eines ‚ersten Gasbläschens‘ wegen seiner geringen Größe keine physikalische Bedeutung. Die geeignete Bestimmung der Zustandsgrößen ist aber wichtig für die numerische Stabilität der Simulation. Liegen die Anfangswerte von Temperatur und Gasgehalt zu weit entfernt vom physikalisch wahren, quasi-stationären Zustand, kommt es zu großen Zeitableitungen dieser ATHLET-Lösungsvariablen, wodurch die Zeitschrittweiten drastisch verkürzt werden.

Anfangstemperatur

Die Bestimmung der Anfangstemperatur wird wie bei Wasser durchgeführt. Dabei wird abgefragt, ob das Dampf-Gas-Gemisch über eine Junction in das Kontrollvolumen eingetragen wird, oder ob es durch Verdampfung von Flüssigkeit entsteht. Im ersten Fall ist die Anfangstemperatur gleich der Temperatur des einströmenden Dampf-Gas-Gemisches, im letzteren ist sie die Sättigungstemperatur.

Anfangsgasgehalt

Strömt kein Gas in das Kontrollvolumen, wird der Anfangsgasgehalt der Dampfphase wie bei Wasser immer auf null gesetzt, da Dampf dann nur durch Verdampfen der Flüssigkeit entsteht.

Strömt Gas ein – etwa über eine angrenzende Junction – so werden der Gesamtgasgehalt sowie die Zusammensetzung des ggf. entstehenden Gasgemisches anhand der einströmenden Komponenten bestimmt. Ist die im Kontrollvolumen vorhandene Flüssigkeit unterkühlt, könnte ein Teil des einströmenden Dampfes spontan kondensiert werden, was sofort die Zeitableitung des Gasgehaltes erhöhen würde. Um dies zu verhindern, wird ein Gasgehalt abgeschätzt, bei dem sich einströmender Dampf und Kondensation im Gleichgewicht befinden.

6.1.1.2 Wärmeübergangsmodell

Natrium unterscheidet sich von Wasser vor Allem durch die erheblich höhere Wärmeleitfähigkeit 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 Wärmeübergangs-(WÜ)-korrelationen für Flüssigmetalle nicht eingesetzt werden können.

Für flüssiges Natrium wurden bereits WÜ-Korrelationen für Rohr- und Bündelgeometrie implementiert /LER 11/. Der Wärmeübergang zwischen Strukturen und *Natriumdampf* wird gegenwärtig mit den für Wasserdampf gültigen Korrelationen unter Verwendung der Natriumstoffgrößen berechnet.

Für unterkühltes und gesättigtes Blasensieden an Heizflächen wird wie bei Wasser der „mikroskopische“ WÜ-Koeffizient HTC_{MIC} der modifizierten Chen-Korrelation verwendet, da dieser Effekt auch bei Natrium erwartet werden kann. Darüber hinaus erhöht dies die numerische Stabilität der Simulationen, da der Wechsel von einphasiger zu zweiphasiger Strömung weniger abrupt verläuft.

Siedekrise

Um zu verhindern, dass ATHLET DNB oder Dryout berechnet, wurde für alle Flüssigmetalle die minimale Filmsiedetemperatur auf 10.000 °C hoch- und die maximale Wiederbenetzungstemperatur auf 0 °C herabgesetzt.

6.1.1.3 Weitere Modelle

Schließungsgleichungen

Für folgende thermohydraulischen Prozesse werden auch für Natrium die für Wasser entwickelten Modelle verwendet, wobei die Natrium-Stoffwerte eingesetzt werden:

- Verdampfung und Kondensation
- Wandreibung und Formverluste
- Zwischenphasenreibung und Drift
- Diffusion von Gasen und Dampf

Ob alle weiteren Modelle wie beispielsweise für 2D-/3D-Strömung vollständig mit Natriumstoffwerten versorgt werden, muss noch überprüft werden.

Komponentenmodelle

Das CDR1D-Modell für die Berechnung kritischer (Aus-)Strömung sollte grundsätzlich auch für Natrium geeignet sein. Wegen des geringen Kühlmitteldrucks in den üblichen Anwendungsfällen wird keine kritische Strömung erwartet. Deshalb wurde es nicht getestet und wird für Natrium nicht zugelassen.

Alle ATHLET-Komponentenmodelle (Pumpe, Ventil, Fill, etc.) sollten grundsätzlich auch für Natrium verwendet werden können. Inwieweit diese Modelle für Natrium hinreichend genaue Ergebnisse erzielen, und ob sie lückenlos mit Natriumstoffwerten versorgt werden, muss ggf. noch überprüft werden.

6.1.1.4 Erste Testrechnungen

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

6.1.1.4.1 Beheiztes Pipe

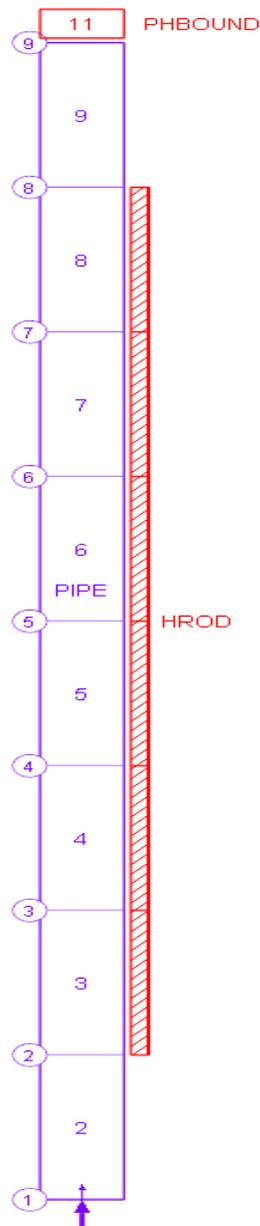


Abb. 6.1 Nodalisierung des Testfalls PIPE

Als erster Testfall PIPE (Abb. 6.1) wurde ein beheiztes Pipe simuliert, dessen geometrische Eckdaten etwa einem Brennelement eines Druckwasserreaktors 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. 6.2 zeigt die räumliche Verteilung der Natriumtemperatur und des Volumendampfgehalts sowie der Brennstabtemperatur (Temperaturskala nicht im Bild) zu Beginn der Simulation (links) und bei $T = 100$ s. Die Skalen der Fluidtemperaturen sind unterschiedlich, die (der in den Bildern nicht dargestellten) Brennstabtemperaturen sind identisch.

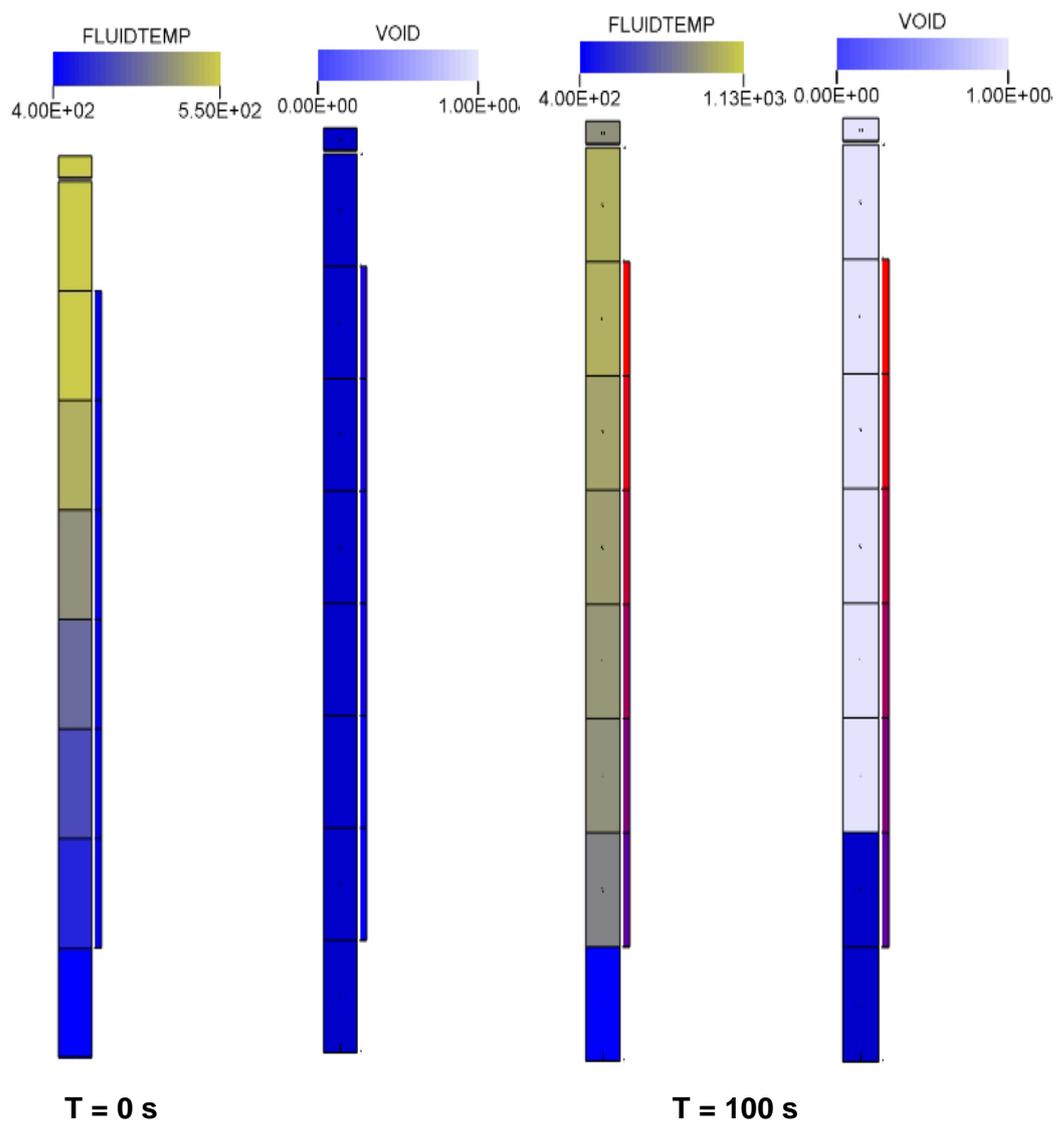


Abb. 6.2 Kühlmitteltemperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE

Die beiden folgenden Abbildungen zeigen den zeitlichen Ablauf der Transiente. Die Indizes in den Legenden der Plots beziehen sich auf die Kontrollvolumen-, Leitungs- und Wärmeleitelement-Indizes der in Abb. 6.1 dargestellten Nodalisation.

Die Transiente wird bei T=0 s eingeleitet durch lineare Reduktion des Durchflusses von 98.6 auf 1 kg/s. Durch geringere Reibungsdruckverluste sowie abnehmendem hydrostatischem Druck (Verringerung der Dichte) sinkt zunächst im unteren Teil der Teststrecke der KM-Druck. Die Aufheizspanne nimmt zu. Ab ca. 73 s beginnt das Natrium am oberen Ende der Heizstrecke zu siedeln. Durch die Volumenexpansion und das Verdrängen des Natriums aus dem Kühlkanal steigt der Druck vorrübergehend an. Die zugeführte Energie wird nun in Verdampfung umgesetzt, wodurch die Temperatur langsamer ansteigt. Mit weiter abnehmendem Durchsatz zeigt auch der Natriumdampf eine deutliche Temperaturerhöhung (alles Abb. 6.3).

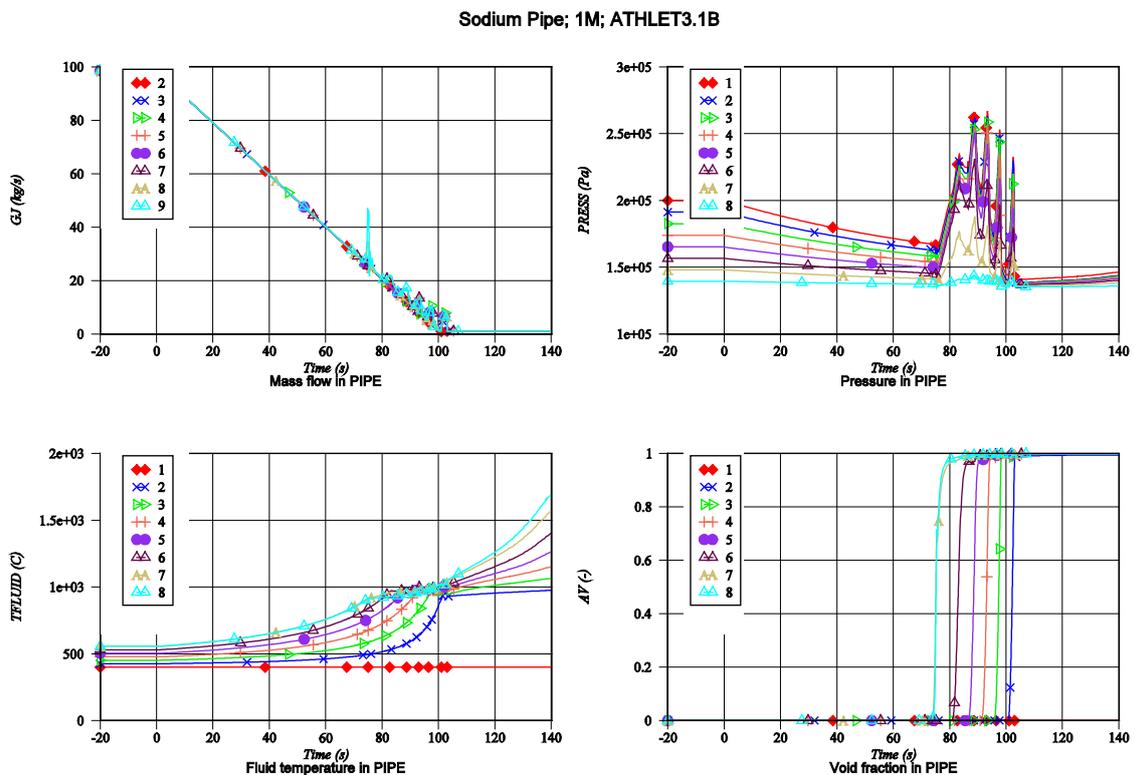


Abb. 6.3 Zeitlicher Verlauf von Massenstrom, Druck, KM-Temperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE

Abb. 6.4 zeigt die Wärmeströme und Verdampfungsraten in den PIPE-Kontrollvolumen, die Gesamt-WÜ-Koeffizienten (HTC) sowie die durch das unterkühlte und gesättigte Blasensieden verursachten WÜ-Koeffizienten (microscopic HTC) an der Oberfläche der den Brennstab darstellenden Wärmeleitelemente. Abschließend werden in Abb. 6.5 noch die örtlichen Verläufe der Kühlmittel- und der Oberflächentemperatur sowie der WÜ-Koeffizienten entlang der Teststrecke zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Hinweis: HROD ist kürzer als PIPE!

Sodium Pipe; 1M; ATHLET3.1B

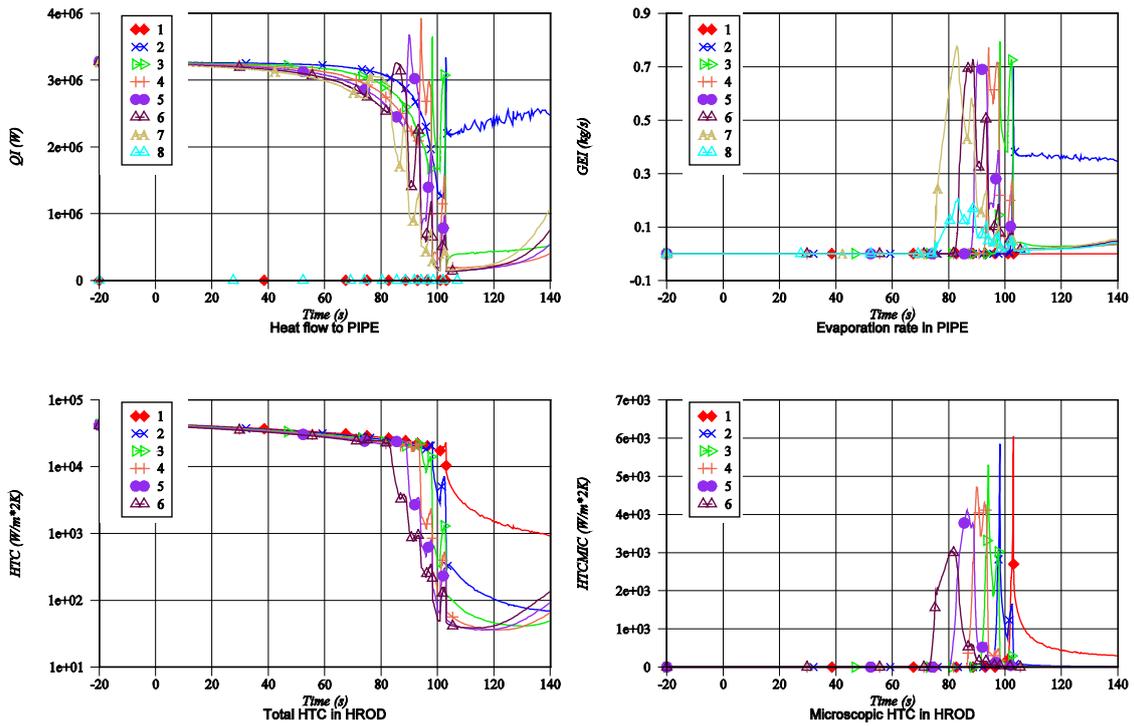


Abb. 6.4 Zeitlicher Verlauf von Wärmestrom, Verdampfungsrate, Gesamt-HTC und HTC durch Wandverdampfung im Testfall PIPE

Sodium Pipe; 1M; ATHLET3.1B

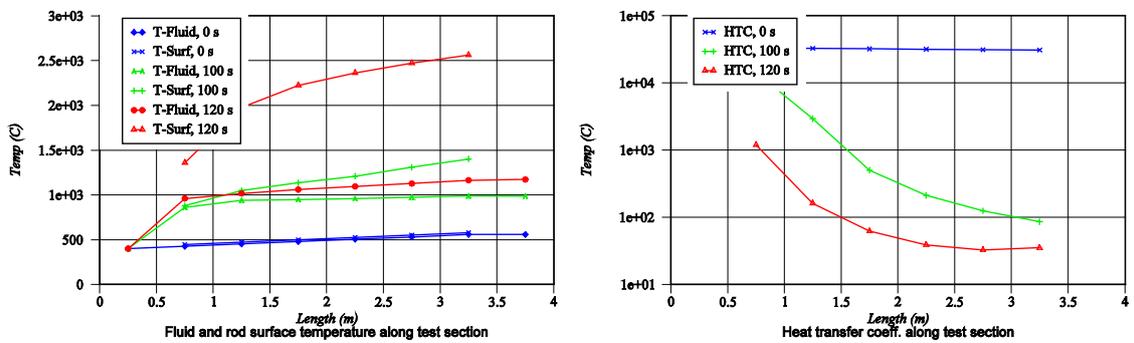


Abb. 6.5 Links: Fluid- und Brennstaboberflächentemperaturen über Länge der Teststrecke. Rechts: WÜ-Koeffizient über Länge der Teststrecke

6.1.1.4.2 Simulation eines Unprotected Loss Of Flow (ULOF) für das Konzept ASTRID

Im Folgenden eine Transiente des Typs „Unprotected Loss Of Flow“ (ULOF) für das Konzept ASTRID mittels ATHLET unter Verwendung von Punktkinetik simuliert und dabei über den Zeitpunkt des Einsetzens des Siedens hinaus gerechnet. Die Simulation bis zum Einsetzen des Siedens wurde bereits im Rahmen des EU-Projekts ESNII+ durchgeführt /ESN 16/ und die Ergebnisse mit den Resultaten der anderen acht Teilnehmer dieses Projekts verglichen. Die Zeitverläufe waren plausibel und lagen im Streubereich der meisten anderen Benchmark-Teilnehmer. Extreme Ausreißer, wie sie in einigen der anderen Simulationen zu beobachten waren, liegen nicht vor. Die Details der ATHLET-Simulation einschließlich der neutronenphysikalischen Modellierung sind in /ESN 16/ beschrieben. Abb. 6.6 zeigt die ATHLET-Nodalisierung des ASTRID-Pool-Reaktors einschließlich Zwischenwärmetauscher, die Nodalisierung des Reaktorkerns ist in Abb. 6.7 genauer dargestellt. Im Folgenden werden nur kurz vor allem thermohydraulische Aspekte beleuchtet.

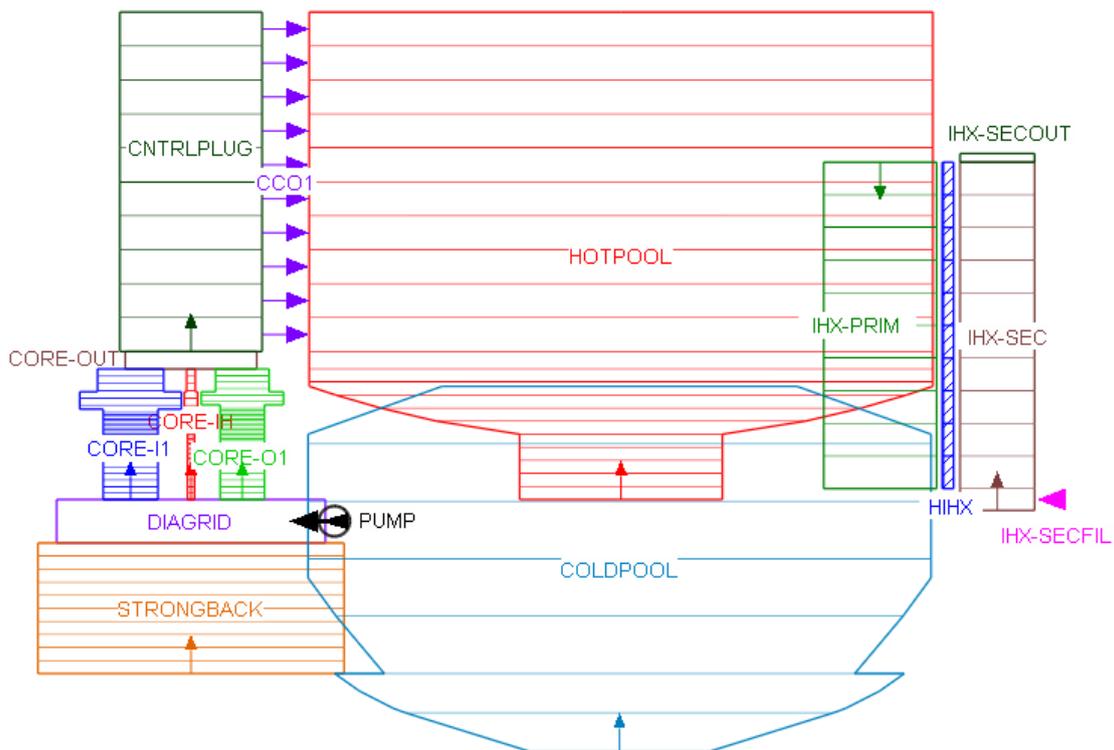


Abb. 6.6 ATHLET-Nodalisierung des ASTRID Pool-Reaktors

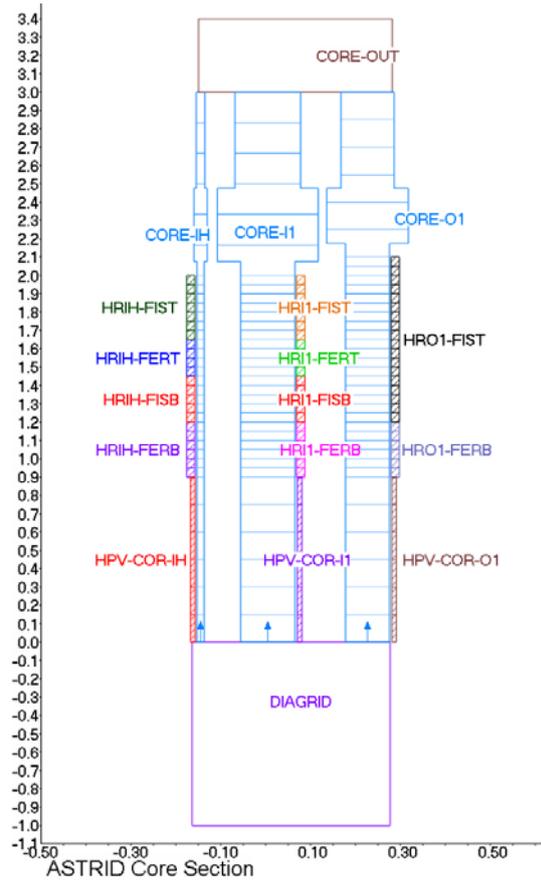


Abb. 6.7 ATHLET-Nodalisierung des ASTRID Reaktorkerns

Die Strömungsverhältnisse in einem Pool-Reaktor wie ASTRID sind auf Grund der fehlenden Strömungsführungen im Hot und Cold Pool von ausgeprägter 3D-Natur. Verstärkt wird das noch durch die Tatsache, dass es vier Wärmetauscher aber nur drei Umwälzpumpen gibt, wodurch die Strömungsverteilung stark asymmetrisch ist. Selbst für ein sehr grobes Simulationsmodell wie das hier verwendete kann eine stationäre Strömungsverteilung kaum vorhergesagt und ATHLET vorgegeben werden, wie das sonst üblich ist. Deshalb wurde hier zur Bestimmung des stationären Anfangszustands ein anderer Weg als gewöhnlich gewählt. Die Simulation wurde bewusst nicht unter stationären Bedingungen gestartet, sondern mit stagnierendem Natrium im gesamten Primärkreis; nur für die Wärmetauscher-Sekundärseiten wurden die tatsächlichen Durchsätze vorgegeben. Die primärseitigen Umwälzpumpen waren abgeschaltet. Die Temperaturverteilung des Kühlmittels wurde entsprechend dem zu erwartenden normalen Betriebszustand abgeschätzt und eingelesen. Um das Punktkinetik-Modell einsetzen zu können, wurde dennoch die Kernleistung mit 100 % vorgegeben. Der von der ATHLET-Startrechnung damit ermittelte Anfangszustand war natürlich nicht wirklich stationär. Zu Beginn der der Startrechnung unmittelbar nachfolgenden sog. Nulltransiente (transiente

Modellierung der Thermohydraulik, stationäre Modellierung der Neutronenkinetik) wurden die Umwälzpumpen eingeschaltet. Nach kurzer Zeit stellte sich dann der „wahre“ stationäre Zustand (im Sinne der ATHLET-Modelle) ein.

Abb. 6.8 und Abb. 6.9 zeigen die Temperaturverteilungen von Kühlmittel- (und Wärmetauscher-)Temperatur beim stationären Betriebszustand sowie am Ende der Simulation, kurz vor dem Sieden des Natriums im Reaktorkern. Die feine graue Linie im oberen Teil des Simulationsmodells stellt den Gemischspiegel dar, der das Natrium vom Polstergas Argon trennt.

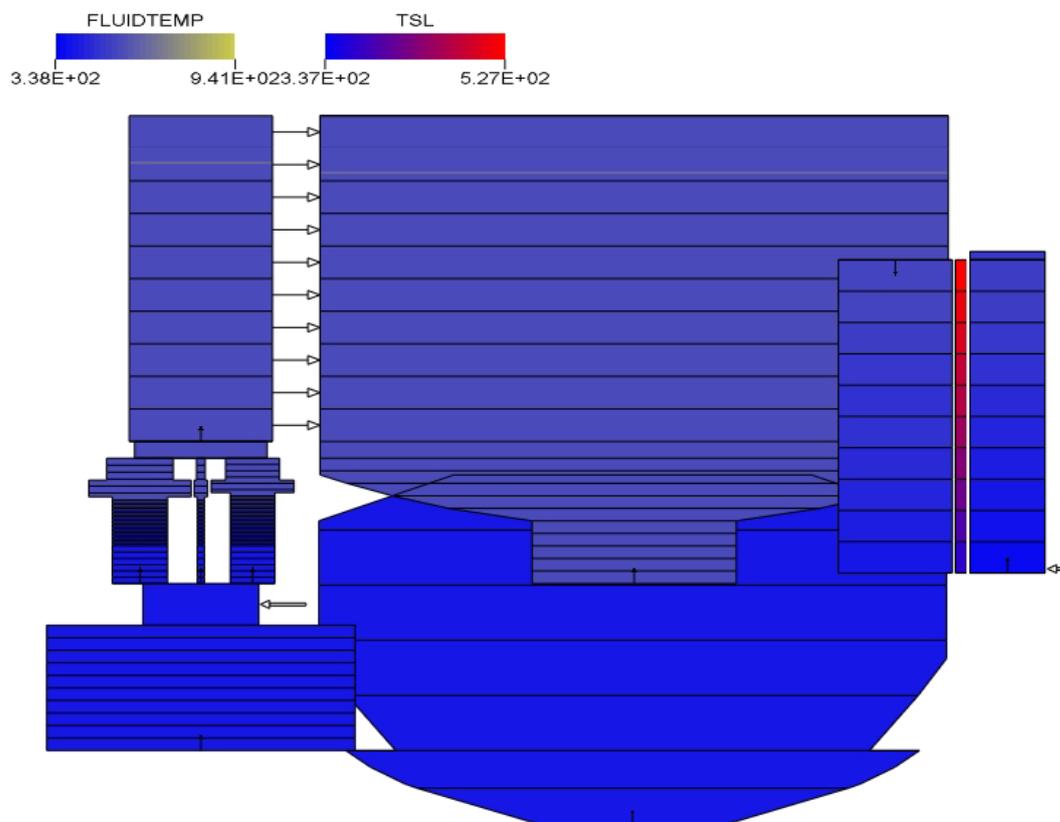


Abb. 6.8 Verteilung der Kühlmittel- und Wärmetauschertemperatur im stationären Betriebszustand

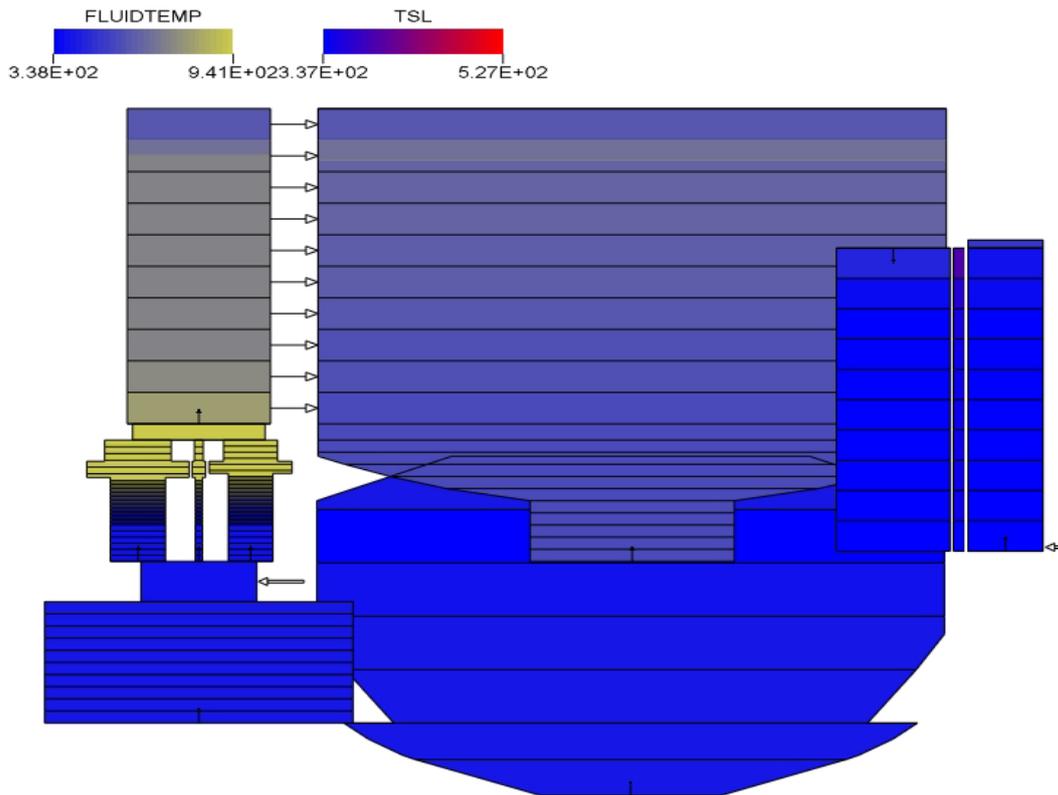


Abb. 6.9 Verteilung der Kühlmittel- und Wärmetauschttemperatur kurz vor Beginn des Natriumsiedens

Mit den oben beschriebenen Modellerweiterungen in ATHLET zum Sieden von Natrium kann nun die Simulation über den Beginn des Siedens hinaus bis $T=300$ s fortgeführt werden. Da für diese Störfallperiode weder experimentelle Daten noch Vergleichsrechnungen vorliegen, kann hier lediglich die Ablauffähigkeit von ATHLET und – mit Einschränkungen – die Plausibilität der erzielten Ergebnisse demonstriert werden.

Hinweis: In der neutronenphysikalischen Simulation wurde die Verdampfung von Natrium (Void-Effekt) nicht detailliert berücksichtigt. Die erzeugte Leistung (Abb. 6.13 o. I.) wird deshalb zu hoch berechnet werden.

Abb. 6.10 und Abb. 6.11 zeigen die Verteilung der Volumendampfgehalts im Pool bzw. in den Kernkanälen bei $T=300$ s. Entsprechend der Leistungsdichten der simulierten Kernkanäle werden unterschiedlich hohe Dampfgehalte in den oberen Kernabschnitten erreicht. Der Dampf strömt auch in den unteren Teil des Control Plugs. Wegen der intensiven Zirkulation zwischen Control Plug und Hot Pool (s. Abb. 6.11, rechts), der sich zwar aufgeheizt hat aber noch immer unterkühltes Natrium enthält, steigt der Natriumdampf nicht weiter hoch, sondern wird vollständig kondensiert.

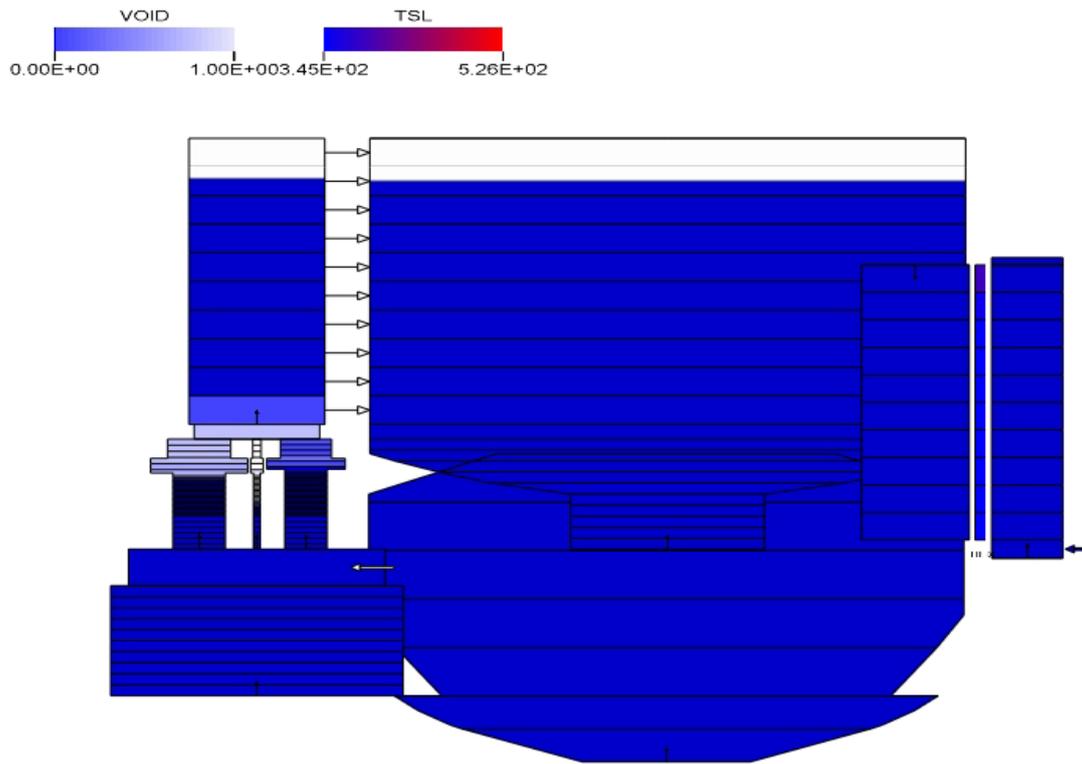


Abb. 6.10 Verteilung des Volumendampfgehalts und der Wärmetauschertemperatur im gesamten Pool bei $T=300$ s

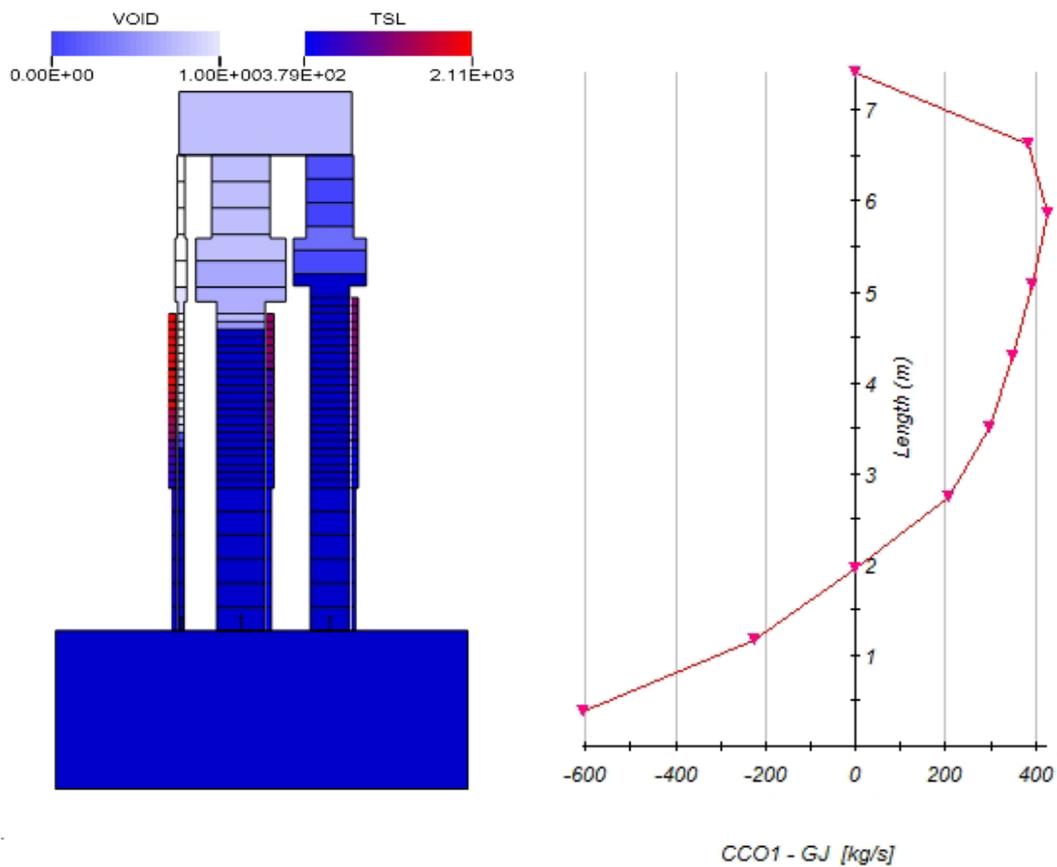


Abb. 6.11 Links: Verteilung des Volumendampfgehalts und der Hüllrohrtemperatur im Kern bei $T=300$ s. Rechts: Verteilung der Massenströme in den Verbindungsleitungen zwischen Control Plug und Hot Pool

Die folgenden Grafiken zeigen die zeitlichen Verläufe einiger thermohydraulischer Größen der ASTRID-Simulation. In Abb. 6.12 o. I. werden Massenströme im Primär- und Sekundärkreis dargestellt. Der sekundärseitige Durchsatz wird konstant gehalten. Beim primärseitigen ist zu beachten, dass die Förderhöhe der Kühlmittelpumpen so vorgegeben wurde, dass der Kerndurchsatz entsprechend der Benchmark-Spezifikation abnimmt. Ab ca. 120 s war dazu ein geringer Druckverlust über die Kühlmittelpumpen von bis zu 10 kPa erforderlich. Ob dies der Realität entspricht, ist ungewiss. Somit ist auch der Naturumlauf durch den Kern in der späten Phase unsicher.

Die blaue Kurve in Abb. 6.12 o. r. zeigt den Druck des Polstergases, der auf Grund der Aufheizung des ASTRID-Pools leicht ansteigt. Die anderen primärseitigen Kühlmitteldrücke werden im Wesentlichen von den sich verringern den Strömungsverlusten in Folge des Abschaltens der Hauptkühlmittelpumpen bestimmt. Die Brennstabtemperaturen überschreiten 4.000 C (Abb. 6.13, u. r.) und damit deutlich den Gültigkeitsbereich der in ATHLET implementierten Materialstoffwerte für Brennstoff und Hüllrohr. Aus diesem Grunde hat zumindest die Spätphase der hier durchgeführten Simulation allenfalls demonstrativen Charakter.

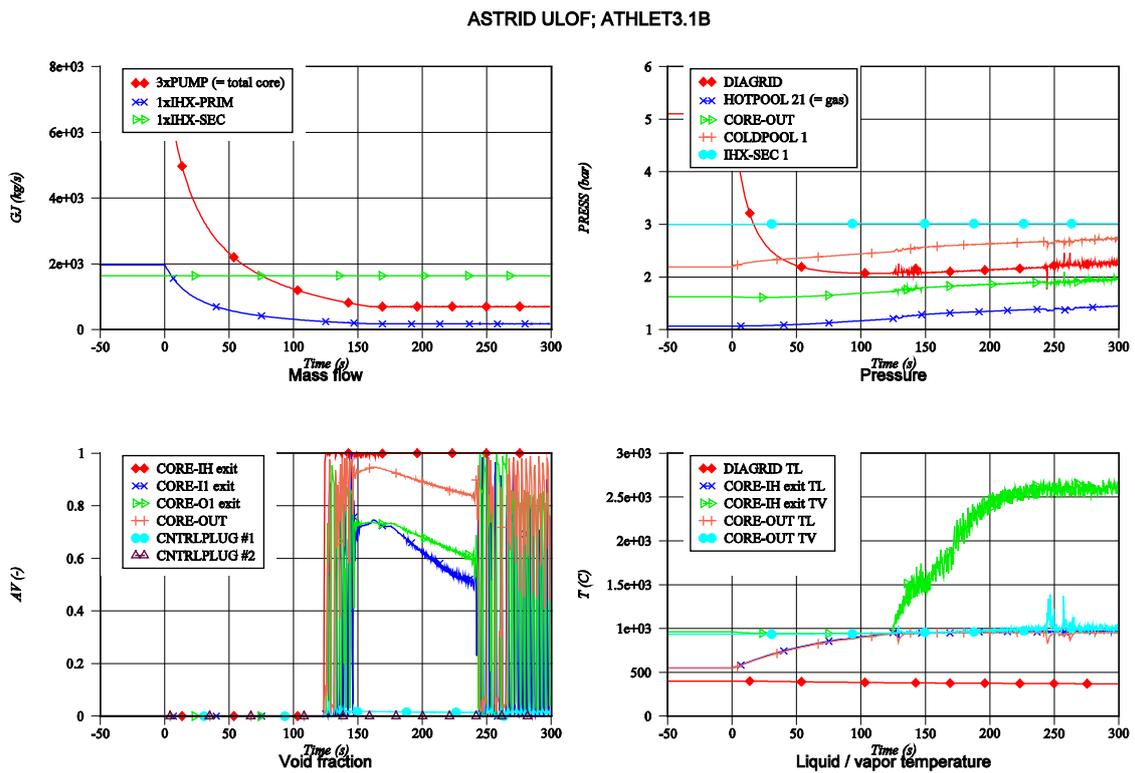


Abb. 6.12 Ergebnisse der ULOF-Transiente (1)

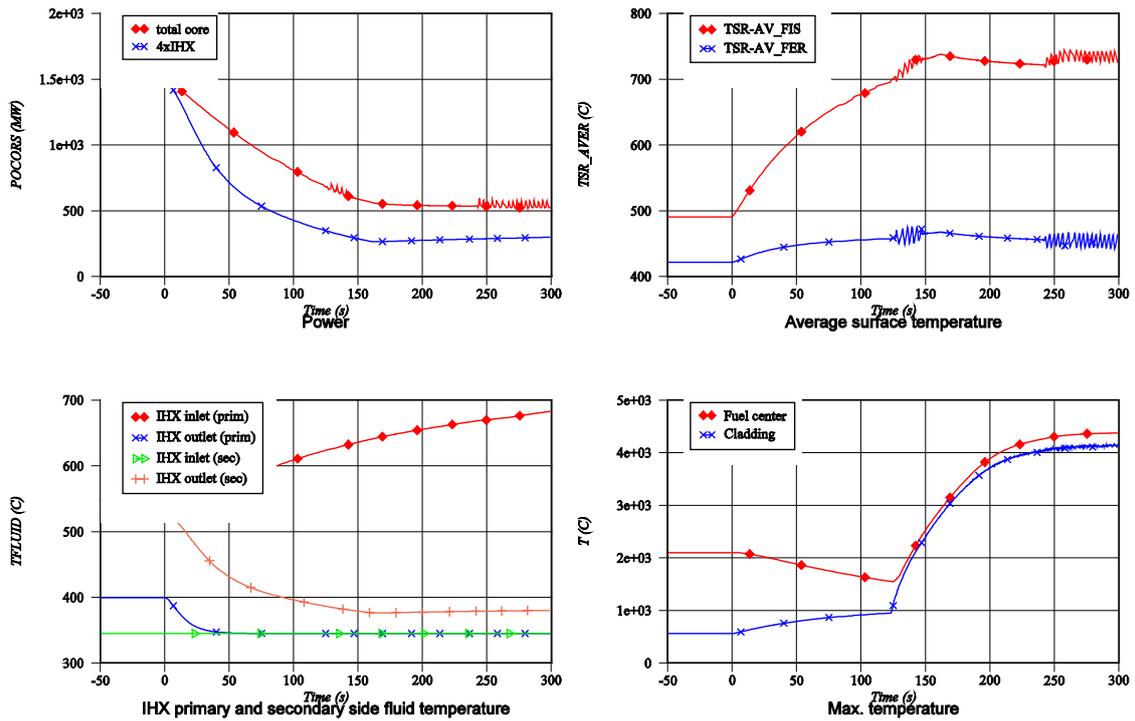


Abb. 6.13 Ergebnisse der ULOF-Transiente (2)

Die Plots zeigen zeitweise starke Oszillationen des Volumendampfgehaltes und der Dampftemperatur im Kern und Kernaustrittsbereich (Abb. 6.12). Diese werden vermutlich von großen Änderungen der WÜ-Koeffizienten beim Übergang zwischen Zweiphasen- und Dampfströmung verursacht. Diese Vorgänge müssen noch genauer untersucht werden. Zur Erinnerung: Der Wärmeübergang auf Natriumdampf wird ggf. mit den für Wasserdampf (bzw. Gas) entwickelten Korrelationen berechnet. Es ist deshalb zu empfehlen, zunächst die Eignung dieser Korrelationen für Natriumdampf zu überprüfen, und erst danach die programmtechnische Optimierung hinsichtlich numerischer Stabilität vorzunehmen.

Abschließend sei betont, dass zur Validierung der in ATHLET neu implementierten Modelle zum Sieden von Natrium geeignete experimentelle Daten erforderlich sind. Die bisher durchgeführten Simulationen sind lediglich Testrechnungen, die die Ablauffähigkeit des Programms und die Plausibilität der Ergebnisse nachweisen sollten.

6.1.1.5 Zusammenfassung und weiteres Vorgehen

Zur Simulation des Siedens von Natrium wurde ATHLET 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. (Ausnahme: Für die Berechnung des Wärmeübergangs an einphasiges flüssiges Natrium stehen spezielle Korrelationen zu Verfügung.)

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die hier durchgeführten Entwicklungsarbeiten einen ersten wichtigen Schritt darstellen, um das Sieden von Natrium im Grundsatz in ATHLET modellieren zu können. Der Bedarf an weiteren Modellverbesserungen betrifft insbesondere die Wärmeübergangs- und Druckverlustmodelle.

6.1.2 Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium

Zur Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium wurden Experimente nachgerechnet, die an der Versuchsanlage Kompakter Natriumsiede-Kreislauf (KNS) durchgeführt wurden /BOT 90/. Ziel dieser Experimente war die Untersuchung des Siedevorgangs von Natrium unter verschiedener Randbedingungen (Leistung, Massenstrom, usw.) sowie die Gewinnung von Messdaten zur Validierung von thermohydraulischen Simulationsmodellen und Rechencodes. Im Rahmen der Überprüfung der ATHLET-Modelle wurde die Testreihe KNS-3 nachgerechnet. Diese Testreihe simuliert den Ausfall der Kühlung ähnlich der ULOF-Transiente (Unprotected Loss Of Flow) in einem elektrisch beheizten Brennelement, die im weiteren Verlauf zum Sieden von Natrium und die Bildung einer zweiphasigen Strömung führt. Das Modell der KNS-Versuchsanlage beinhaltet nur die Teststrecke der Anlage und wurde für ATHLET-3.2 entwickelt. Im Modell wurden die im Folgenden beschriebenen Komponenten nachgebildet.

Brennelementfuß

Der Brennelementfuß wird in der Nodalisierung als Node #2 des KNS_1 Objects dargestellt und durch ein sog. Fill-Objekt definiert zur Vorgabe von korrektem Massenstrom und Enthalpie des Natriums. Bei der Analyse war es wichtig, dass bei der Einspeisung die Enthalpie und so die Temperatur von Natrium exakt von ATHLET berechnet wird.

Elektrisch beheizte Brennstäbe (KNS-37-Brennstabbündel)

Die beheizte Strecke (Heizkanal), die eine Länge von 900 mm aufweist, besteht in ATHLET aus 20 Kontrollvolumina (Nodes #3 bis #22), die das Volumen des Natriums in dem Brennelement repräsentieren. Das Brennelement bildet exakt das KNS-37-Stabbündel (Stabdurchmesser 6 mm, Stabgitterweite 7.9 mm) nach. Dem Heizkanal wurde ein Wärmeleitobjekt (HKNS1) zugeordnet, um die Wärmezufuhr an das Fluid zu modellieren. Die sinusförmig angenommene axiale Leistungsverteilung in den Brennstäben wird folgendermaßen beschrieben:

$$\frac{q}{q_{max}} = 0.38 + 0.62 \sin\left(\pi \frac{z + 25}{900}\right) \quad (6.1)$$

Abstandhalter

Insgesamt wurden 9 Abstandhalter gemäß der Anlagendokumentation nachgebildet. Hier wurden die Widerstandsbeiwerte so angewählt, dass der Druckverlust im Heizkanal während des stationären Zeitraums, innerhalb dessen die Strömung einphasig ist, die Messergebnisse wiedergibt.

Brennelementkopf

Der Brennelementkopf wurde mit einem Kontrollvolumen (Node #23) nachgebildet, um die Flächenänderung im Brennelement sowie die Messstellen zu berücksichtigen zu können.

Druckrandbedingung

Der Rest der Anlage wurde mit einem sog. Time Dependent Volume (TDV) modelliert, welchem der Umgebungsdruck aufgeprägt ist. Das TDV dient im Weiteren als Entnahmepunkt für das eingespeiste Natrium.

Die Nodalisation des Modells der gesamten Teststrecke ist in Abb. 6.14 dargestellt.

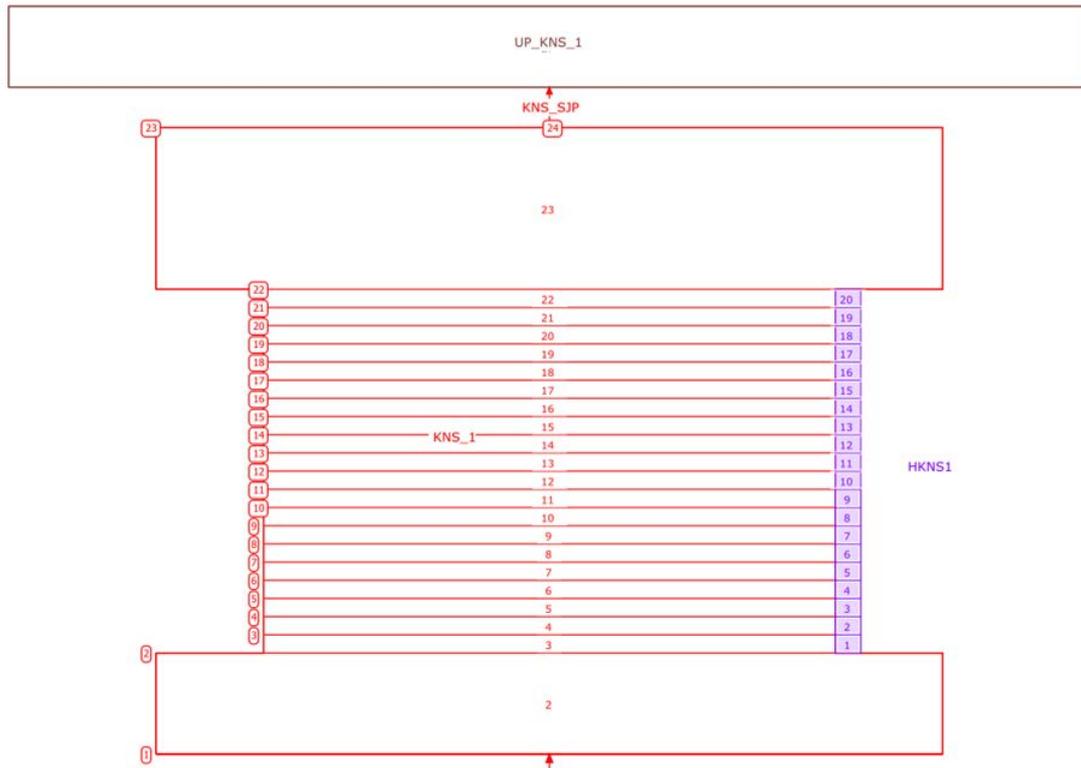


Abb. 6.14 ATHLET-Nodalisation der Teststrecke der Versuchsanlage KNS.

Insgesamt wurden drei verschiedene Analysen mit dem ATHLET-Modell von KNS nachgerechnet, wobei das Sieden von Natrium untersucht wurde. Die Ergebnisse für die Tests L22, L60 und L58 sind im Folgenden näher beschrieben.

Test L22

Im Test L22 wird der Kühlmittelmassenstrom, ausgehend von seinem Nominalwert von 3.41 kg/s, kontinuierlich gemäß dem in Abb. 6.15 wiedergegebenen zeitlichen Verlauf reduziert. Im Verlauf des Experiments kommt es dabei zum Austrocknen (Dampfgehalt 100 %) des beheizten Stabbündels, für welches eine Maximaltemperatur von 1.000 °C gemessen wurde.

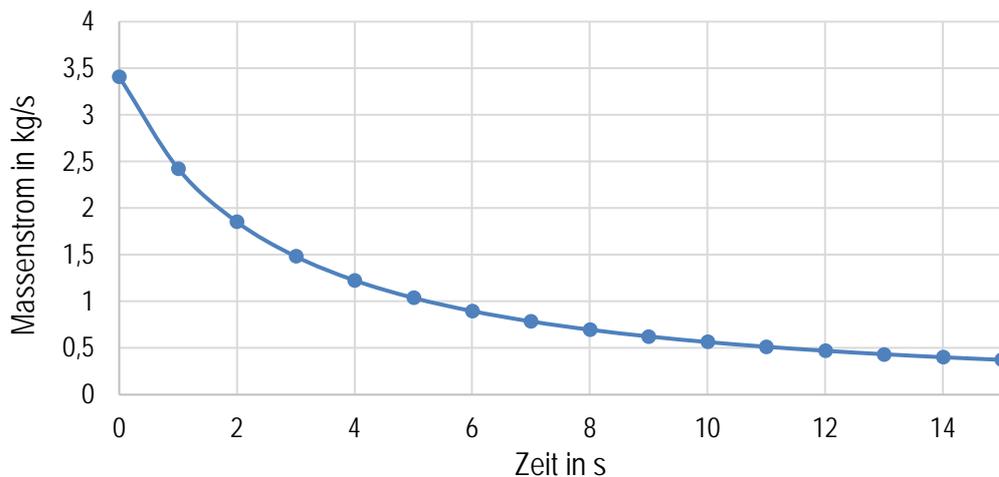


Abb. 6.15 Zeitlicher Verlauf des Einspeise-Massenstroms in ATHLET

Tabelle Tab. 6.1 zeigt in der rechten Spalte die ATHLET-Modellannahmen und -Ergebnisse (kursive Zahlen), wobei für letztere offensichtlich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt werden konnte. In Abb. 6.16 ist der mit ATHLET berechnete Dampfgehalt an verschiedenen Orten in der oberen Hälfte (0-450 mm in 10 Nodes unterteilt) des Stabbündels als Funktion der Zeit dargestellt. Während der gesamten Analyse blieb der Dampfgehalt in der unteren Hälfte (< 450 mm) des Stabbündels bei null. Dieses Verdampfungsprofil entspricht recht gut der experimentellen Beobachtung (s. Abb. 6.17). ATHLET konnte die axiale Dampfgehaltverteilung im BE im Rahmen der verfügbaren Messergebnisse akzeptabel wiedergeben. Die von ATHLET berechneten Oberflächentemperaturen der Heizstäbe sind in Abb. 6.18 dargestellt. Die ermittelte Maximaltemperatur beträgt 1.050 °C und liegt somit etwa 50 K über den im Experiment ermittelten ca. 1.000 °C. Eine mögliche Ursache dafür könnte in der fehlenden 3D-Modellierung in ATHLET liegen, die infolge einer zu erwartenden verbesserten radialen Vermischung bessere Kühlungsbedingungen schaffen und dadurch zu niedrigeren berechneten Temperaturen führen sollte.

Tab. 6.1 Test L22 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET

	Run L22		
	Experiment	BACCHUS-3D	ATHLET
Test section outlet pressure (bar)	1.0	1.0	1.0
Bundle inlet / outlet pressure (bar)	2.241 / 1.045	2.268 / 1.131	2.225 / 1.049
Inlet / outlet temperature (°C)	380 / 539	380 / 543	380 / 543
Inlet coolant velocity (m/s)	3.38	3.38	3.38
Inlet mass flow (kg/s)	3.41	3.41	3.41
Heated length (mm)	900	900	900
Peak heat flux (W/cm ²)		148.4	149.9
Average pin linear power (W/cm)	215.4	213.3	215.4
Total power (MW)	0.7174	0.7102	0.7174
Power tilt (%)	0	0	0
Mass flow rate /Transient/	$\frac{m}{m_0} = (1 + 0.3003 * t)^{-1.297}$		
Time at which the mass flow is reduced by 50% (s)	2.35	3.35	2.9
Type of voiding initialization	Rapid flow reduction		
Boiling inception (s)	6.11	6.28	5.97
Peak coolant temperature rise rate (K/s)		62.0	60.0
Coolant velocity at boiling inception (m/s)	0.87	0.86	0.84
Dryout onset (s)	9.25	9.2	9.2
Power switch-off time (s)	9.45	9.45	9.45
Duration of two-phase flow (s)	6.2	8.04	7.5

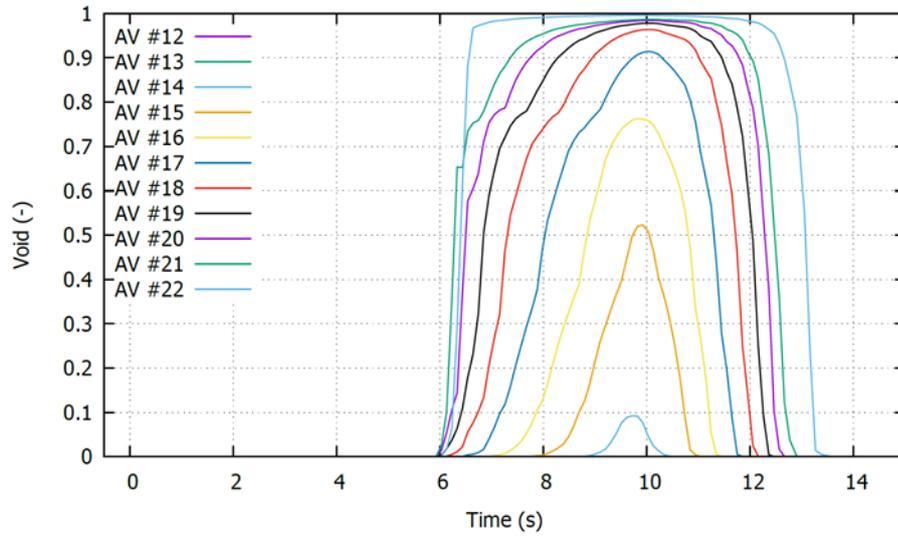


Abb. 6.16 Mit ATHLET berechnete zeitliche Verläufe der Dampfgehalte in den einzelnen Nodes der oberen Hälfte des Stabbündels

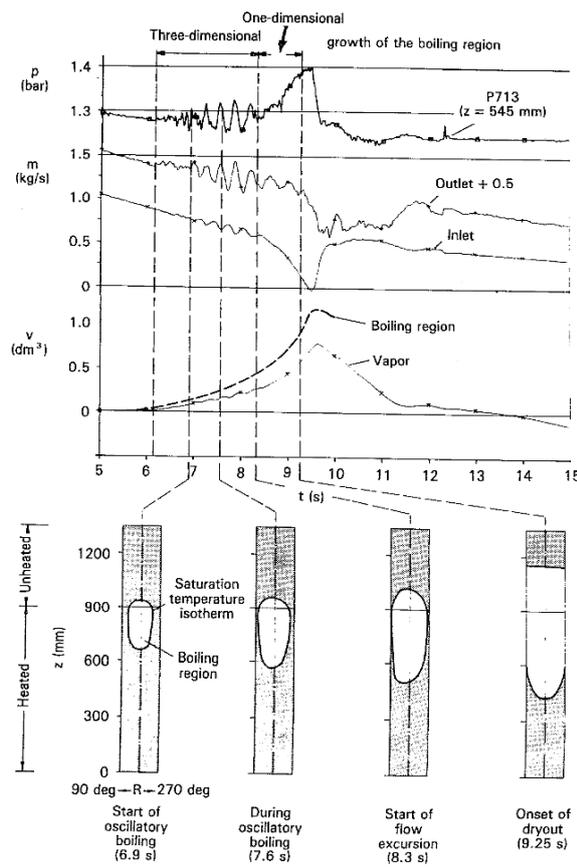


Abb. 6.17 Ausgewählte Messergebnisse zu Test L22 /BOT 90/

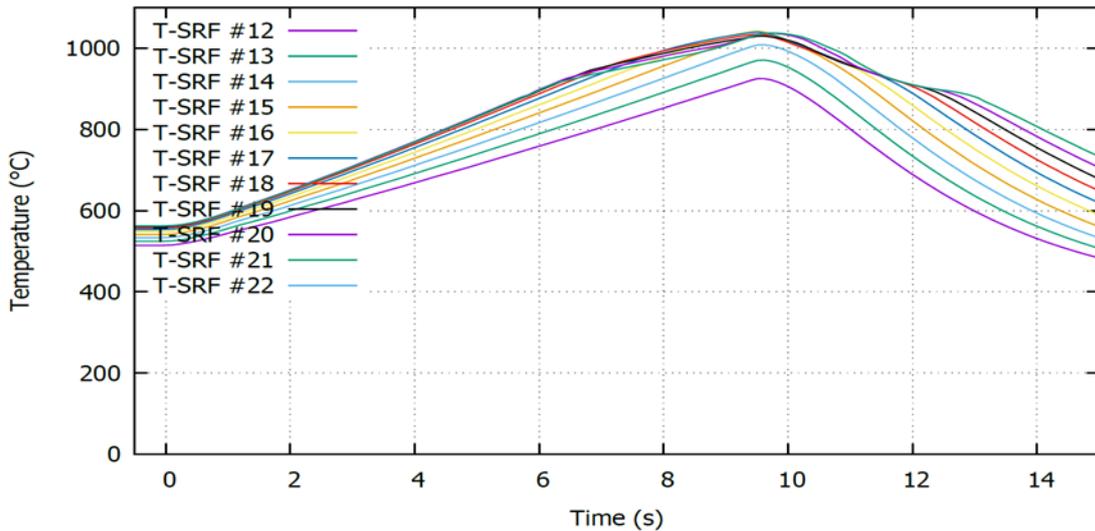


Abb. 6.18 Mit ATHLET berechnete zeitliche Verläufe der Heizstab-Oberflächentemperaturen an verschiedenen axialen Positionen während der Transiente

Die Tabellen Tab. 6.1 zeigen, dass ATHLET die experimentellen Daten sehr gut berechnen kann. Die Unterschiede zwischen den berechneten und experimentellen Daten sind weniger als eine Sekunde. Die Analysen haben bewiesen, dass in ATHLET implementierte Stoffwerte sowie empirische Gleichungen für die Zweiphasenströmung richtig sind. Im Weiteren plant die GRS ähnliche Nachrechnungen von Transienten. Ziel wird dabei komplette Forschungsanlagen / Forschungsreaktoren nachzurechnen wo auch asymmetrische Phänomene (Kühlungsbedingungen) auftreten. Wichtig werden noch die Untersuchungen der Kondensation von Natrium.

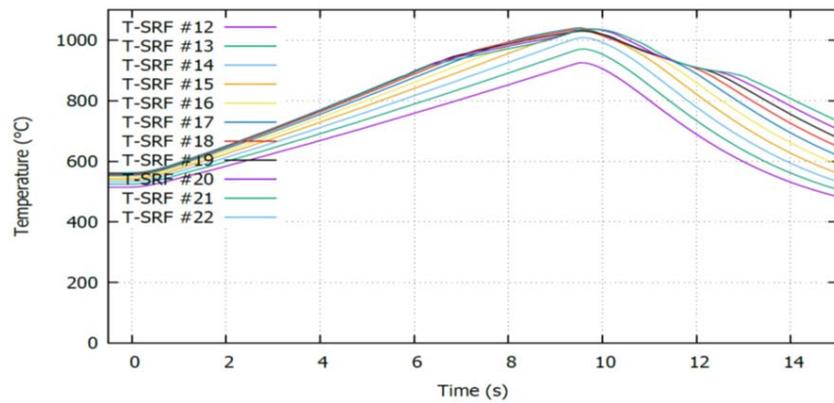
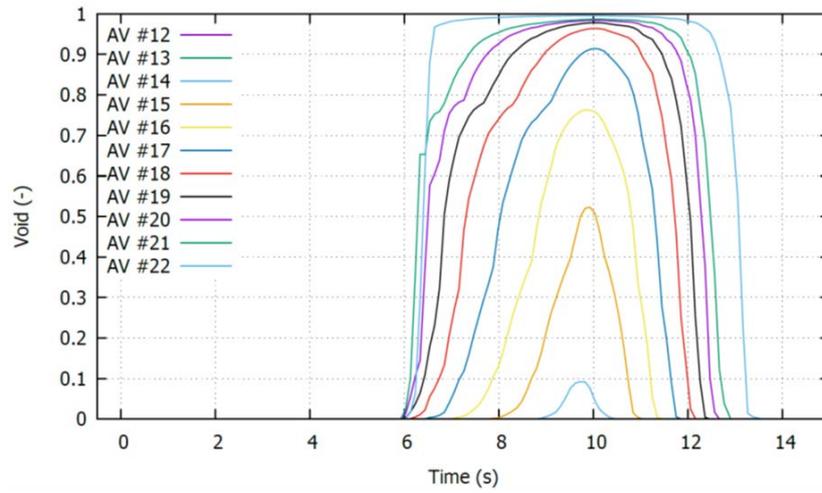


Abb. 6.19 Test L22 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)

Tab. 6.2 Test L60 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET

	Run L60		
	Experiment	BACCHUS-3D	ATHLET
Test section outlet pressure (bar)	1.0	1.0	1.0
Bundle inlet / outlet pressure (bar)	2.286 / 1.046	2.158 / 1.131	2.225 / 1.049
Inlet / outlet temperature (°C)	385 / 539	385 / 549	385 / 548
Inlet coolant velocity (m/s)	3.18	3.18	3.18
Inlet mass flow (kg/s)	3.20	3.20	3.20
Heated length (mm)	900	900	900
Peak heat flux (W/cm ²)		175.5	174.6
Average pin linear power (W/cm)	204.0	201.8	204.0
Total power (MW)	0.6788	0.6720	0.6788
Power tilt (%)	0	+/- 25	+/- 25
Mass flow rate /Transient/	$\frac{m}{m_0} = (1 + 0.2740 * t)^{-1.357}$		
Time at which the mass flow is reduced by 50% (s)	2.4	2.43	2.7
Type of voiding initialization	Rapid flow reduction		
Boiling inception (s)	6.00	6.04	6.03
Peak coolant temperature rise rate (K/s)		61.0	60.0
Coolant velocity at boiling inception (m/s)	0.87	0.85	0.85
Dryout onset (s)	9.8	9.4	9.2
Power switch-off time (s)	9.44	9.44	9.44
Duration of two-phase flow (s)	6.3	8.00	7.7

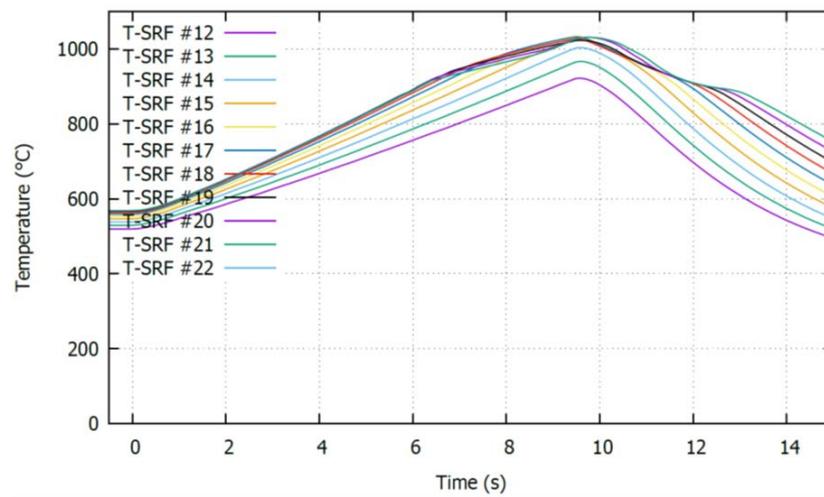
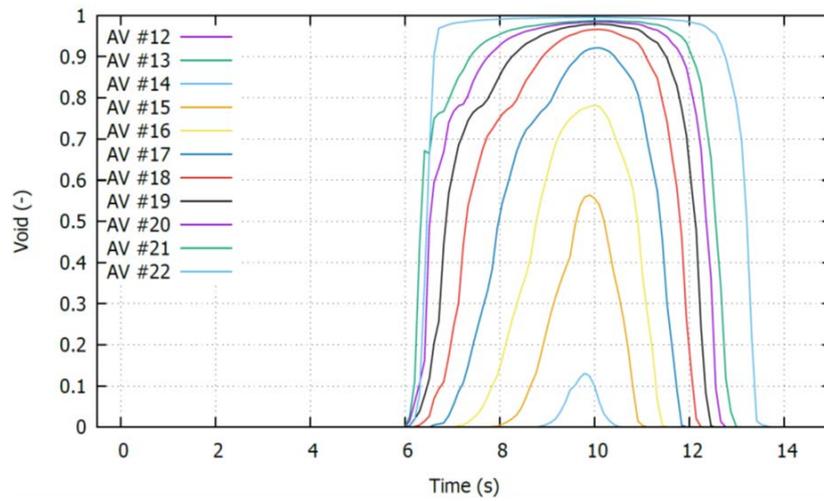


Abb. 6.20 Test L60 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)

Tab. 6.3 Test L58 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET

	Run L58		
	Experiment	BACCHUS-3D	ATHLET
Test section outlet pressure (bar)	1.0	1.0	1.0
Bundle inlet / outlet pressure (bar)	1.436 / 1.047	1.436 / 1.047	1.445 / 1.049
Inlet / outlet temperature (°C)	600	601 / 693	600 / 693
Inlet coolant velocity (m/s)	1.90	1.90	1.90
Inlet mass flow (kg/s)	1.80	1.80	1.80
Heated length (mm)	900	900	900
Peak heat flux (W/cm ²)		44.8	44.8
Average pin linear power (W/cm)	65	64.4	65
Total power (MW)	0.2167	0.2167	0.2167
Power tilt (%)	0	0	0
Mass flow rate /Transient/	$m = m_0 - 0.0127t - 0.129\sin(\pi t/128)$		
Time at which the mass flow is reduced by 50% (s)	59	60	62
Type of voiding initialization	Slow flow reduction		
Boiling inception (s)	87.9	88.48	87.1
Peak coolant temperature rise rate (K/s)		3.8	3.7
Coolant velocity at boiling inception (m/s)	0.61	0.61	0.65
Dryout onset (s)	110.0	111.0	113.0
Power switch-off time (s)	114.2	114.2	114.2
Duration of two-phase flow (s)	32.1	33.8	34.0

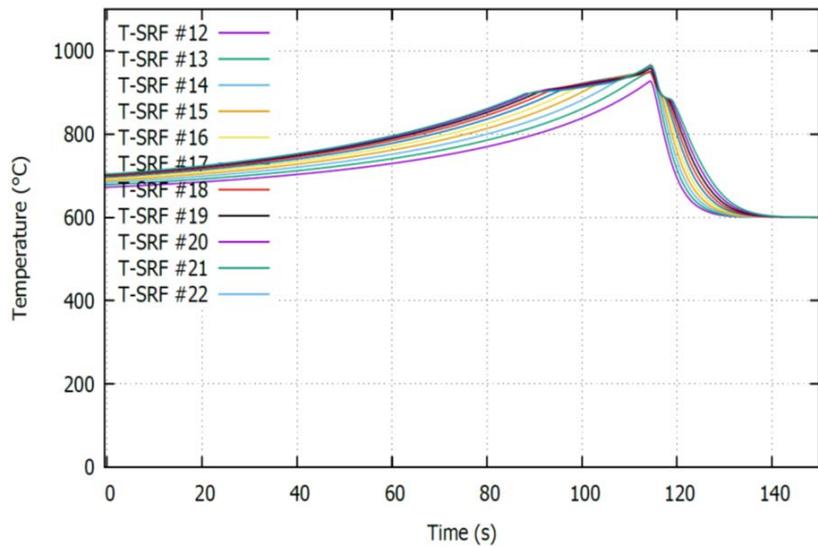
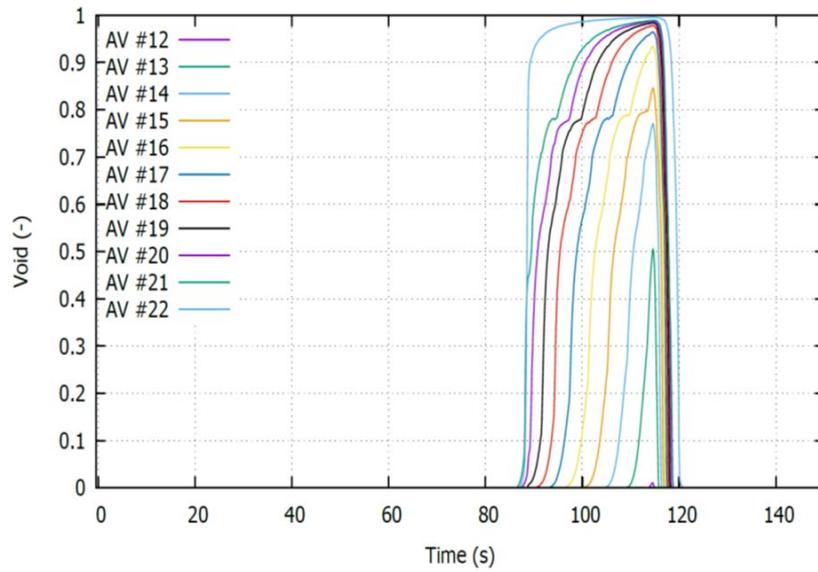


Abb. 6.21 Test L58 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)

6.1.3 Erweiterungen von ATHLET zur Simulation von Salzschnmelzen in Kühlkreisläufen

Salzschnmelzen (Molten Salt, MS) werden in der Energie- und Verfahrenstechnik vielfältig eingesetzt. Sie dienen als Wärmespeicher, beispielsweise für Solaranlagen, aber auch als Brennstoff-Kühlmittel in Salzschnmelzereaktoren (Molten Salt Reactor, MSR), einem der sechs Reaktordesigns der innovativen Generation IV Reaktortypen. Um ATHLET im Rahmen der nationalen und internationalen Forschungsaktivitäten für sicherheitsrelevante Fragestellungen zu Salzschnmelzesystemen einsetzen zu können, wurde das Programm erweitert. Es können nun die Salzschnmelzen FL-NaK (LiF-NaF-KF) und FLiBe (LiF-BeF₂) als nicht-siedende Arbeitsmedien simuliert werden. Dazu wurden für die beiden Salzschnmelzen Stoffwerte implementiert. Die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten erfolgt mit der Dittus-Boelter-Korrelation. Weitere Modelle wurden nicht verändert. Alle Modelle werden jedoch mit den Salzschnmelze-Stoffwerten versorgt. Die Arbeitsmedien können für das gesamte Simulationsmodell oder Teile davon über die ATHLET-Eingabedaten ausgewählt und mit allen anderen Arbeitsmedien (H₂O, He, etc.) in getrennten Thermofluid-Systemen kombiniert werden. Zusätzlich können alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase innerhalb eines Thermofluid-Systems auch als zweiphasige Strömung (MS – Gas) modelliert werden.

Um die Ablauffähigkeit der Programmerweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse nachzuweisen, wurden erste Testrechnungen durchgeführt, jedoch keine Vergleichsrechnungen mit Experimenten.

6.1.3.1 Vorarbeiten

In einer Masterarbeit /DEM 15/ wurde die Eignung von ATHLET für die Simulation von MSR untersucht. Dazu wurde in einer älteren Programmversion ATHLET 2.2A, für die der Quelltext der TUM zur Verfügung stand, das Arbeitsmedium Wasser durch eine nicht näher bezeichnete Salzschnmelze ersetzt. Ferner wurde mit Hilfe des GCSM-Moduls die im Reaktorkern erzeugte Leistung berechnet und dem Kühlmittel als Quellterm zugeführt. Die Nachzerfallsleistung im übrigen Primärkreis wurde vernachlässigt. Mit dieser ATHLET-Version wurden mehrere Reaktivitätstransienten simuliert und die Ergebnisse mit TRACE bzw. ORNL Daten verglichen. Ergebnis der Studie war der Nachweis, dass ATHLET grundsätzlich in der Lage ist, das dynamische Verhalten eines MS-gekühlten Reaktors zu beschreiben.

6.1.3.2 Salzschnmelzen als Arbeitsmedien

Es wurden die Salzschnmelzen FLiNaK (LiF-NaF-KF) und FLiBe (LiF-BeF₂) in ATHLET implementiert. Beide Arbeitsmedien werden als einphasig flüssig, unterkühlt und unterkritisch betrachtet. Das Erreichen des Sättigungszustands und die dann einsetzende Verdampfung können nicht modelliert werden. Dennoch müssen formal Sättigungswerte auch für die gasförmige Phase der Metalle bereitgestellt werden. Diese werden entweder mit Hilfe der idealen Gasgleichung zum jeweiligen Druck und zur Sättigungstemperatur berechnet oder einfach nur abgeschätzt (Tab. 6.4; Formelzeichen s. Kap. 6.1.3.3).

Der in ATHLET erlaubte Temperaturbereich für die neuen Arbeitsmedien erstreckt sich von der Schmelztemperatur bis zu 10 K unterhalb der Siedetemperatur (s. Tab. 6.5 und Tab. 6.5), der Druckbereich von 100 Pa bis 2 MPa (könnte auch erhöht werden). Werden diese Grenzen überschritten, so wird zunächst die Integrationsschrittweite verkürzt und ggf. die Simulation abgebrochen.

Tab. 6.4 Sättigungsstoffwerte für die Salzschnmelzen

Stoffwert	FLiNaK	FLiBe	Quelle
$T' = T''$ [°C]	1570.0	1400.0	/HOL 10/
ρ'' $\left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$2.891 \cdot 10^{-6} \cdot p$	$2.380 \cdot 10^{-6} \cdot p$	Ideale Gasgl.
$\frac{\partial \rho''}{\partial p}$ $\left[\frac{kg}{m^3 Pa} \right]$	$2.891 \cdot 10^{-6}$	$2.380 \cdot 10^{-6}$	Ideale Gasgl.
h' $\left[\frac{J}{kg} \right]$	$3.2997 \cdot 10^6$	$3.36 \cdot 10^6$	@ T'
h'' $\left[\frac{J}{kg} \right]$	$h' + 1.0 \cdot 10^6$	$h' + 1.0 \cdot 10^6$	$h' + r$
r $\left[\frac{J}{kg} \right]$	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^6$	geschätzt
$\frac{\partial h''}{\partial p}$ $\left[\frac{J}{kg Pa} \right]$	0.0		Dummy

6.1.3.3 Stoffwertkorrelationen für Salzschnelzen

Die von ATHLET benötigten thermodynamischen Stoffwerte und Transportgrößen für die Salzschnelzen wurden – soweit verfügbar - den Berichten /HOL 10/ und /INL 10/ entnommen. Die Werte für den kritischen Punkt, die hier nicht relevant sind, stammen aus /INL 05/. Die erforderlichen partiellen Ableitungen wurden aus den Stammfunktionen gewonnen, die spezifische Enthalpie durch Integration der spezifischen Wärmekapazität, wobei bei 0 °C der Wert Null gewählt wurde. Die Flüssigkeitsstoffwerte werden in diesen Berichten nur als Funktion der Temperatur dargestellt. Für die von ATHLET benötigten partiellen Ableitungen nach dem Druck wurden aus der isothermen Kompressibilität gewonnen; diese wurden dann auch für die Stammfunktionen eingesetzt. Tab. 6.5 gibt einen Überblick über die in ATHLET verwendeten Stoffwertbeziehungen.

Tab. 6.5 Stoffwerte für die Salzschnmelzen (T in K, falls nicht anders beschrieben)

Stoffwert*	FLiNaK	FLiBe	Quelle
$T_{schmelz}$ [$^{\circ}C$]	454.0	458.0	/HOL 10/
T' [$^{\circ}C$]	1570.0	1400.0	/HOL 10/
r [$\frac{J}{kg}$]	$1.0 \cdot 10^6$	$1.0 \cdot 10^6$	geschätzt
$\frac{\partial h}{\partial T}$ [$\frac{J}{kg K}$]	$976.78 + 1.0634 T$	2400.0	/INL 10/
h [$\frac{J}{kg}$]	$976.78 T + 0.5317 T^2 - 3.06478 \cdot 10^5$	$2400 \cdot T$ [$^{\circ}C$]	/INL10/
$\kappa _T$ [$\frac{1}{Pa}$]	k. A.; von FLiBe übernommen	$2.3 \cdot 10^{-11} e^{0.001 T}$	/INL 05/
$\frac{\partial \rho}{\partial p}$ [$\frac{kg}{m^3 Pa}$]	$\kappa _T \rho$		
$\rho _{1 bar}$ [$\frac{kg}{m^3}$]	$2.730 \cdot 10^3 - 0.73 T$	$2.413 \cdot 10^3 - 0.488 T$	/INL 10/
ρ [$\frac{kg}{m^3}$]	$\rho _{1 bar} + \rho _{1 bar} \cdot (p - 1.0 \cdot 10^5) \cdot \kappa _T$		
$\frac{\partial \rho}{\partial T}$ [$\frac{kg}{m^3 K}$]	-0.73	-0.488	/INL 10/
$\frac{\partial v}{\partial T}$ [$\frac{m^3}{kg K}$]	$-\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial T}$		
$\frac{\partial h}{\partial p}$ [$\frac{J}{kg Pa}$]	$\frac{1}{\rho} - T \frac{\partial v}{\partial T}$		
η [$\frac{kg}{s m}$]	$4.0 \cdot 10^{-5} e^{\frac{4170}{T}}$	$1.16 \cdot 10^{-4} e^{\frac{3755}{T}}$	/HOL 10/
λ [$\frac{W}{K m}$]	$0.43482 + 5.0 \cdot 10^{-4} T$	$0.6268 + 5.0 \cdot 10^{-4} T$	/HOL 10/ MolMass equ.
σ [$\frac{N}{m}$]	$0.27269 - 1.014 \cdot 10^{-4} T$	$0.295778 - 1.2 \cdot 10^{-4} T$	/INL 10/
c [$\frac{m}{s}$]	H ₂ O equation	H ₂ O equation	

*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	[°C; in Tab. 6.5: auch K]
v	spez. Volumen	[m ³ /kg]
η	dynamische Viskosität	[kg/s m]
λ	Wärmeleitfähigkeit	[W/m K]
$\kappa _T$	isotherme Kompressibilität	[1/Pa]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
σ	Oberflächenspannung	[N/m]

Graphische Darstellungen der Stoffwerte sind der Technischen Notiz /LER 18/ zu entnehmen.

6.1.3.4 Modellierung nichtkondensierender Gase

Analog zu natriumgekühlten Systemen wurde ATHLET so modifiziert, dass auch für die Salzschnmelzen das Mehrkomponentenmodell (MC-Modell) eingesetzt werden kann. Ebenso steht das Gemischspiegelmodell zur Verfügung. Damit kann man einen Ausgleichsbehälter modellieren, der teilweise mit Salzschnmelze gefüllt ist und darüber eines der in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase enthält. Entleert sich der Ausgleichsbehälter infolge eines Druckverlustes (z. B. beim Kühlmittelverluststörfall), so kann das Polstergas in den Kühlkreislauf gelangen und sich dort verteilen. Der Transport und die lokale Konzentration des Gases können mit ATHLET berechnet werden.

Das Modell gleicht dem für nicht-siedende Flüssigmetalle (Pb, LBE). Es unterscheidet sich in folgenden Punkten vom MC-Modell mit Wasser:

- Der Dampfpartialdruck der Salzschnmelzen ist Null.
- Zwischen Salzschnmelze und Gas wird kein Massenaustausch berechnet (auch nicht an einem Gemischspiegel).
- Zwischen MS und Gas wird mit Hilfe eines vereinfachten Modells ein Wärmestrom zwischen den beiden Phasen berechnet. Diese sehr einfachen Wärmeaustauschmodelle sollen lediglich gewährleisten, dass sich Temperaturunterschiede zwischen Salzschnmelze und Gas abbauen.

Insgesamt ist das MC-Modell in Verbindung mit Salzschnmelze gegenwärtig weder als ausgereiftes und validiertes noch als vollständiges Modell zu verstehen. So müssten – falls diese Strömungsvorgänge realistisch simuliert werden sollen – auch noch das Driftmodell sowie die Modelle für Wand- und Zwischenphasenreibung ertüchtigt werden.

6.1.3.4.1 Wärmeaustausch zwischen Salzschnmelze und Gas im Kontrollvolumen

In homogenen Kontrollvolumen und in den Teilvolumen unterhalb eines Gemischspiegels wird ein Wärmestrom zwischen MS und Gas berechnet:

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

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

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

mit

Q	Wärmestrom von Salzschnmelze zum Gas	[W]
A_{IP}	Zwischenphasenfläche	[m ²]
HTC_{IP}	Wärmeübergangskoeffizient an der Zwischenphasenfläche	[W/m ² K]
TL_i	Flüssigkeitstemperatur im Kontrollvolumen	[°C]
TV_i	Dampf(Gas)temperatur im Kontrollvolumen	[°C]

V_i	Volumen des Kontrollvolumen	[m ³]
d_B	Blasen- / Tropfendurchmesser (gegenwärtig festgelegter Wert: 0.01m)	[m]
d_{hyd}	Hydraulischer Durchmesser	[m]
Re	Reynolds-Zahl	[-]
Pr	Prandtl-Zahl	[-]
λ_v	Wärmeleitfähigkeit des Dampfes	[W/m K]

6.1.3.4.2 Wärmeaustausch zwischen Salzschnmelze und Gas am Gemischspiegel

Am Gemischspiegel (ML) wird wie folgt ein Wärmestrom zwischen Salzschnmelze und Gaspolster berechnet:

$$Q_{ML} = A_{ML} HTC_{ML} (TL_i - TV_{io}) \quad (6.2)$$

mit

Q_{ML}	Wärmestrom vom unteren zum oberen ML-Teilvolumen	[W]
A_{ML}	ML-Oberfläche	[m ²]
HTC_{ML}	Wärmeübergangskoeffizient am ML	[W/m ² K]
TL_i	Flüssigkeitstemperatur im unteren ML-Teilvolumen	[°C]
TV_{io}	Dampf(Gas)temperatur im oberen ML-Teilvolumen	[°C]

Es werden zwei unterschiedliche Werte für HTC_{ML} verwendet:

- $HTC_{ML} = 2.0 \text{ W/m}^2/\text{K}$ für stabile Temperaturschichtung $T_{\text{oben}} > T_{\text{unten}}$; hier wird davon ausgegangen, dass am ML die Temperaturen sich angleichen und somit isolierende Schichten sowohl in der Flüssigkeit unterhalb als auch im Gas oberhalb des ML ausbilden.
- $HTC_{ML} = 20.0 \text{ W/m}^2/\text{K}$ für instabile Temperaturschichtung $T_{\text{oben}} < T_{\text{unten}}$; hier wird davon ausgegangen, dass am ML die Temperaturen sich zwar annähern, die isolierenden Schichten sich aber wegen der Auf- und Abtriebskräfte immer wieder erneuern.

6.1.3.5 Wand-Wärmeübergangsmodell

Sowohl für heizende als auch kühlende Oberflächen wird die Nusselt-Zahl für den Wärmeübergangskoeffizient zwischen Wand und Salzschnmelze mit der Dittus-Boelter-Korrelation berechnet:

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.4} \text{ mit } Re \geq 100 \quad (6.3)$$

Da die Nusselt-Zahl bei stagnierendem Kühlmittel gegen Null geht, ist eine Begrenzung der Reynolds-Zahlen für kleine Strömungsgeschwindigkeiten erforderlich. Eine für Strömungsstagnation geeignete Wärmeübergangs-Korrelation (ähnlich McAdams für Wasser) ist gegenwärtig nicht implementiert.

Siedekrise

Um zu verhindern, dass ATHLET DNB oder Dryout berechnet, wurde für die Salzschnmelzen die minimale Filmsiedetemperatur auf 10.000 °C hoch- und die maximale Wiederbenetzungstemperatur auf 0 °C herabgesetzt.

6.1.3.6 Weitere Programmänderungen

Zur Berechnung von kritischen Ausströmraten in Leckleitungen wird in ATHLET in der Regel das Programm-Modul CDR1D eingesetzt. Dieses Programm berechnet für vorzugebende Zustände am Beginn einer Leckleitung Tabellen mit kritischen Massenstromdichten. Während der Rechnung interpoliert ATHLET daraus für aktuelle Fluidzustände und Leckquerschnitte kritische Massenströme. Da die implementierten Salzschnmelzen nicht siedend können, kann CDR1D nicht zur Berechnung von kritischen Ausströmraten herangezogen werden. Deshalb wird die Strömungsgeschwindigkeit am Leck – wie auch an allen anderen Orten der Simulation - auf die Schallgeschwindigkeit des Arbeitsmediums begrenzt.

Weitere Modelländerungen wurden nicht vorgenommen. Es werden also die für das Arbeitsmedium Wasser vorgesehenen Modelle eingesetzt, wobei die Stoffwerte der Salzschnmelzen verwendet werden.

6.1.3.7 Erste Testrechnungen: ASTRID ULOF mit FLiNaK

Da kein MSR-Simulationsmodell zur Verfügung stand, wurde ein bereits existierendes ATHLET-Modell für das natriumgekühlte Reaktorkonzept ASTRID für die Testrechnungen herangezogen. Das ASTRID-Design weicht zwar stark von dem eines MSR ab (fester Brennstoff in Brennstäben, kein Brennstoff im MS gelöst), hat aber den Vorteil, dass ein Polstergas zum Einsatz kommt. Mit den Testrechnungen wird somit auch das MC-Modell in ATHLET in Kombination mit MS-Kühlmittel getestet.

Die im Folgenden eine der beiden durchgeführten Testrechnungen beschrieben, die zweite und weitere Details sind der Technischen Notiz /LER 18/ zu entnehmen. Zweck ist die Überprüfung der Programmerweiterungen hinsichtlich der Ablauffähigkeit und der Plausibilität der Ergebnisse. Die Validierung muss in Zukunft anhand von Versuchsnachrechnungen erfolgen. Da Gemischspiegel simuliert werden müssen, wurden die Rechnungen mit dem 5-Gleichungsmodell durchgeführt.

6.1.3.7.1 ASTRID ULOF mit FLiNaK

In diesem Simulationsmodell wurde primärseitig Natrium durch die neu implementierte Salzschnmelze ersetzt. Sekundärseitig wird weiterhin Natrium verwendet, um eine Anwendung mit mehreren Arbeitsmedien zu testen. Um die Anlage an die Eigenschaften der Salzschnmelzen anzupassen, mussten weitere Änderungen der Eingabedaten vorgenommen werden:

- Erhöhung des Temperaturniveaus der Primär- und Sekundärseite (wg. höherer Schmelztemperatur von MS)
- Erhöhung des Startdrucks für die ATHLET-Startrechnung im unteren Teil der Anlage (wg. höherer Dichte von MS)
- Vergrößerung des Wärmetauschers (wg. schlechterer Wärmeübergangskoeffizienten von MS)

Abb. 6.22 zeigt die stationäre Kühlmittelverteilung mit dem Polstergas Argon im oberen Teil der Anlage.

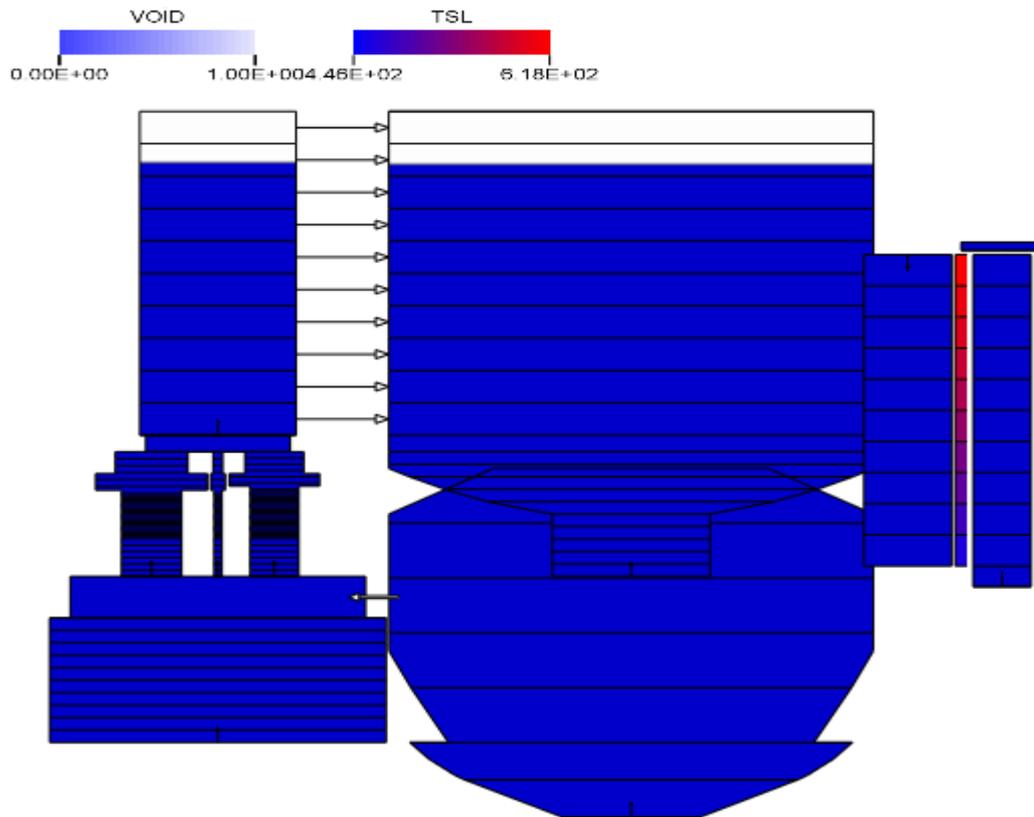


Abb. 6.22 Stationäre Kühlmittelverteilung in ASTRID

In einem Poolreaktor ist die stationäre Massenstromverteilung im Voraus schwer abzuschätzen, da durch die zahlreichen Bohrungen in der Wand des Control Plugs (CNTRPLG bzw. CCO1 in Abb. 6.6) Kühlmittel in den Hot Pool (HOTPOOL) strömt und dort sowohl nach oben als auch nach unten zum Eintritt des Wärmetauschers (IHX-PRIM) fließt. Deshalb wurde – wie auch beim ULOF-Benchmark – die Simulation mit laufenden Pumpen und nominaler Kernleistung, aber ohne Durchsatz gestartet. Schon nach wenigen Sekunden stellt sich die – im Sinne der ATHLET-Modelle – korrekte stationäre Massenstromverteilung ein (Abb. 6.23).

Die zu Beginn der transienten Rechnung (genauer: Einschwingrechnung) auftretenden heftigen Druckwellen kann man in ATHLET per Eingabedaten durch die vorübergehende Reduzierung der Massenträgheitsterme der Junctions deutlich verringern. Andernfalls würden mit hoher Wahrscheinlichkeit lokal negative Kühlmitteldrücke auftreten.

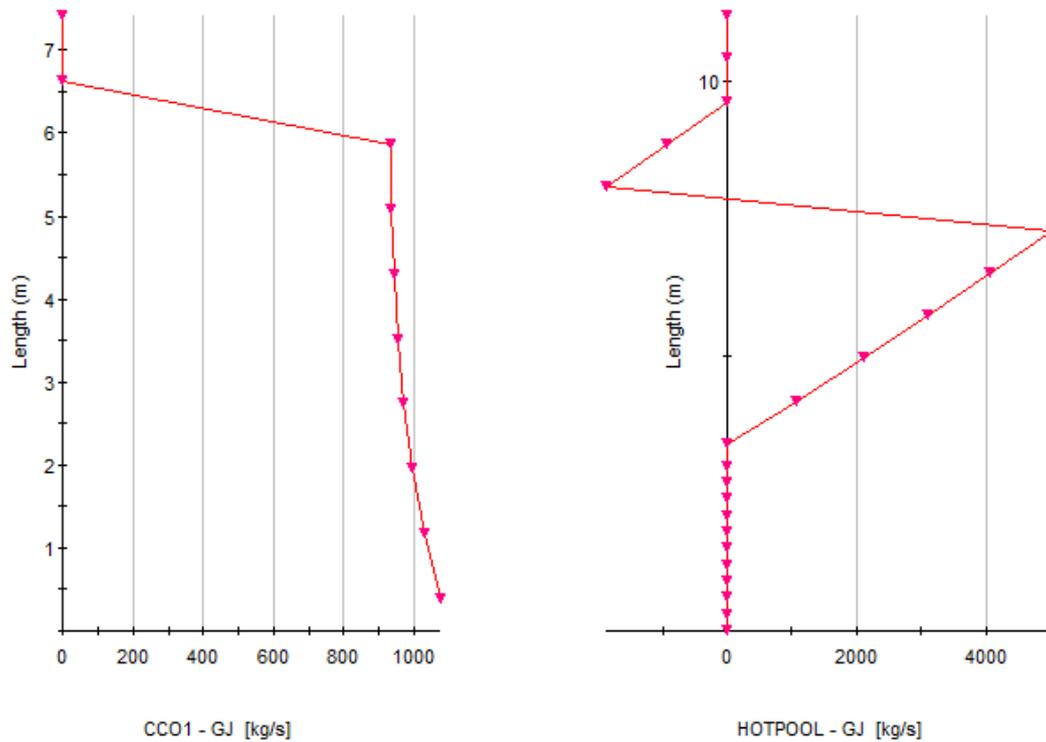


Abb. 6.23 ASTRID: Stationäre Massenstromverteilung am Austritt des Control Plugs (li.) und im Hot Pool (re.)

Nach einer Einschwingzeit von 1.000 s, in der nicht nur die Durchsätze sondern auch die Kühlmitteltemperaturen einen stationären Zustand erreichen (Abb. 6.24), wird der ULOF-Störfall durch das Abschalten der Umwälzpumpen eingeleitet. Wie im ENSII+ Benchmark wird angenommen, dass diese nach etwas mehr als 100 s keinen Förderdruck mehr erzeugen.

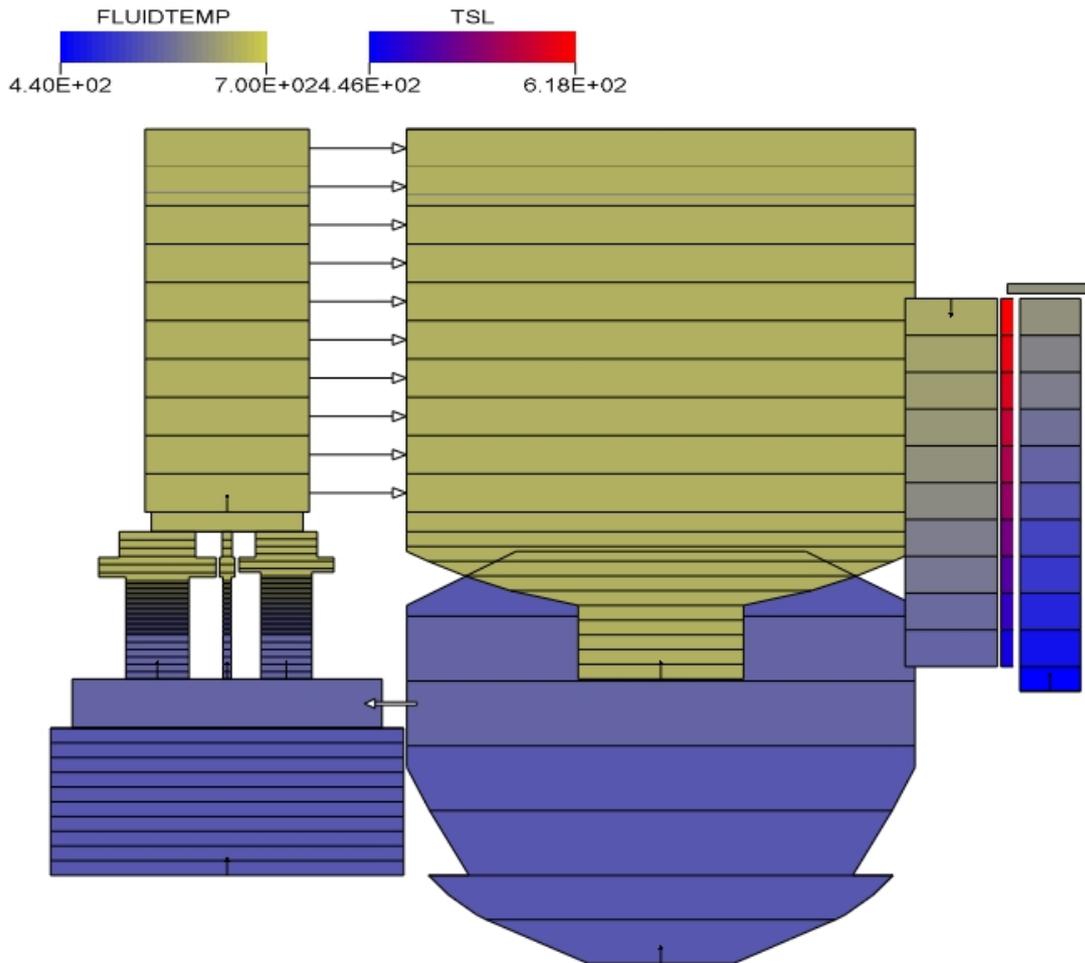


Abb. 6.24 ASTRID: Stationäre Kühlmitteltemperaturverteilung

Abb. 6.25 zeigt die zeitlichen Verläufe der wichtigsten thermohydraulisch Größen im Kurzzeitbereich. Nach etwa 150 s stellt sich ein nur noch vom Naturumlauf getriebener Massenstrom von etwa 700 kg/s ein. Durch den geringeren Kerndurchsatz (bei reduzierter Kernleistung) steigt die Kernaustrittstemperatur rasch von 660 °C auf über 900 °C an, während das Kühlmittel im Hot Pool sich auf Grund der großen thermischen Trägheit – die Anlage enthält (in dieser Simulation) etwa 5.000 t Salzschnmelze – nur langsam erwärmt. Am Kerneintritt (DIAGRID) nimmt die Kühlmitteltemperatur sogar leicht ab, da der Wärmetauscher weiter betrieben wird und an dessen primärseitigem Austritt wegen des geringeren Durchsatzes die Kühlmitteltemperatur sinkt. Wegen der thermisch bedingten Ausdehnung des Kühlmittels wird das Polstergas komprimiert und der Druck in der Anlage steigt leicht an. Für die Berechnung der Kernleistung wird hier das Punktkinetikmodell eingesetzt. Die Rückwirkungen infolge der Änderungen der Kühlmittel- und

Brennstoffzustände sowie der thermischen Ausdehnungen von Brennstoff und Strukturen auf die erzeugte Leistung wird mit den gleichen Koeffizienten wie im ASTRID-Originalmodell mit Natrium bestimmt.

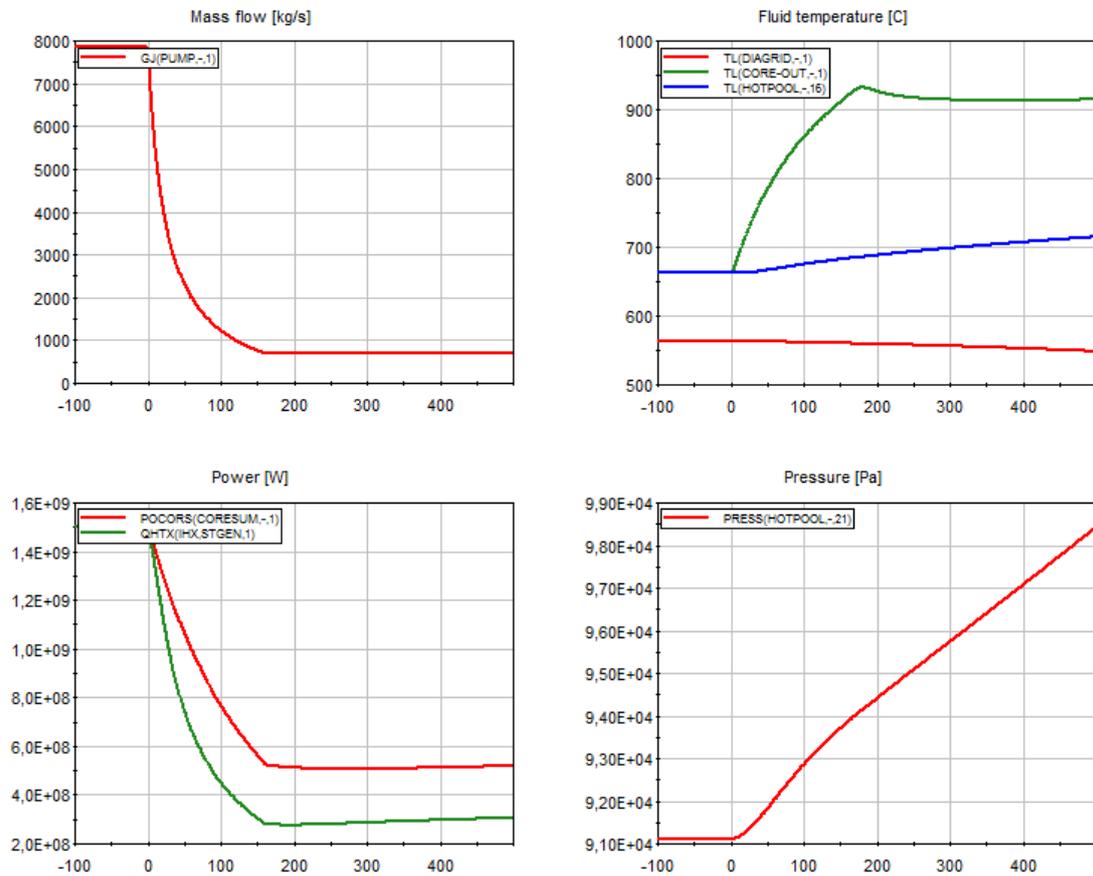


Abb. 6.25 Im Uhrzeigersinn: Massenstrom durch die Umwälzpumpe, Kühlmitteltemperaturen, Kühlmitteldruck, Kern- und Wärmetauscherleistung (FLiNaK, Kurzzeitplots)

Abb. 6.26 zeigt die gleichen Zeitverläufe wie Abb. 6.25, jedoch im Langzeitbereich. Hier wird die große thermische Trägheit der Anlage deutlich. Es dauert etwa 3 Stunden, bis ein stationärer Zustand erreicht wird, bei dem Kern- und Wärmetauscherleistung sich angeglichen haben und sich die Kühlmitteltemperaturen kaum mehr ändern.

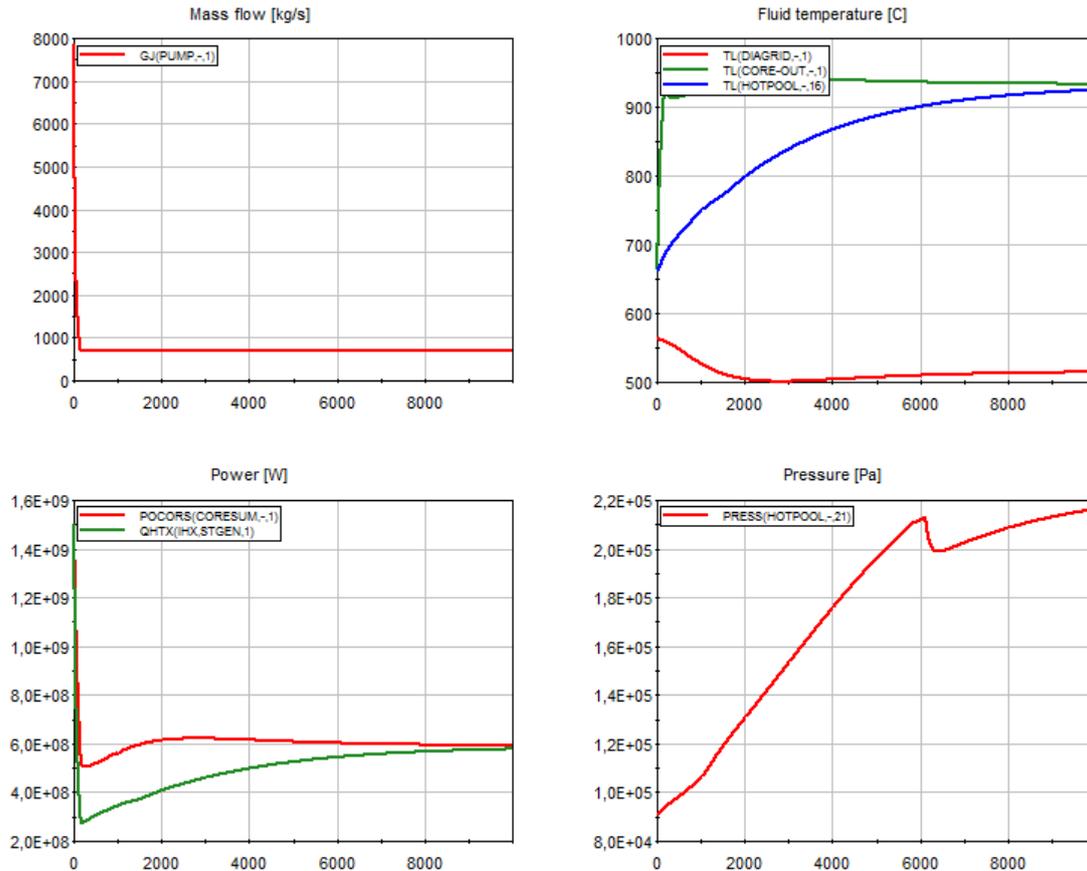


Abb. 6.26 Im Uhrzeigersinn: Massenstrom durch die Umwälzpumpe, Kühlmitteltemperaturen, Kühlmitteldruck, Kern- und Wärmetauscherleistung (FLiNaK, Langzeitplots)

Der Systemdruck sinkt bei 6.000 s um etwa 0.1 bar ab. Dieser Vorgang hat keine physikalische Ursache, sondern weist auf generische Schwächen eines eindimensionalen Lumped-Parameter-Modells hin. Diese sollen an Hand von Abb. 6.27 näher erläutert werden:

Wegen der Volumenausdehnung des Kühlmittels steigt der ML kontinuierlich an (o. li.). Bei 6.000 s erreicht er im Pipe HOTPOOL die Oberkante des CVs 20 und wechselt in das darüber liegende CV 21. Die Gastemperatur TV in diesem CV 21 (blaue Kurve u. li.) liegt zu diesem Zeitpunkt auf Grund der adiabaten Kompression etwa 100 K höher als die Temperatur der Salzschnmelze unmittelbar unterhalb des ML (grüne gestrichelte Kurve). Gelangt nun kaltes Kühlmittel in das CV 21, wird am ML ein hoher Wärmestrom berechnet (u. re.), der das Gas abkühlt und damit den Gasdruck reduziert.

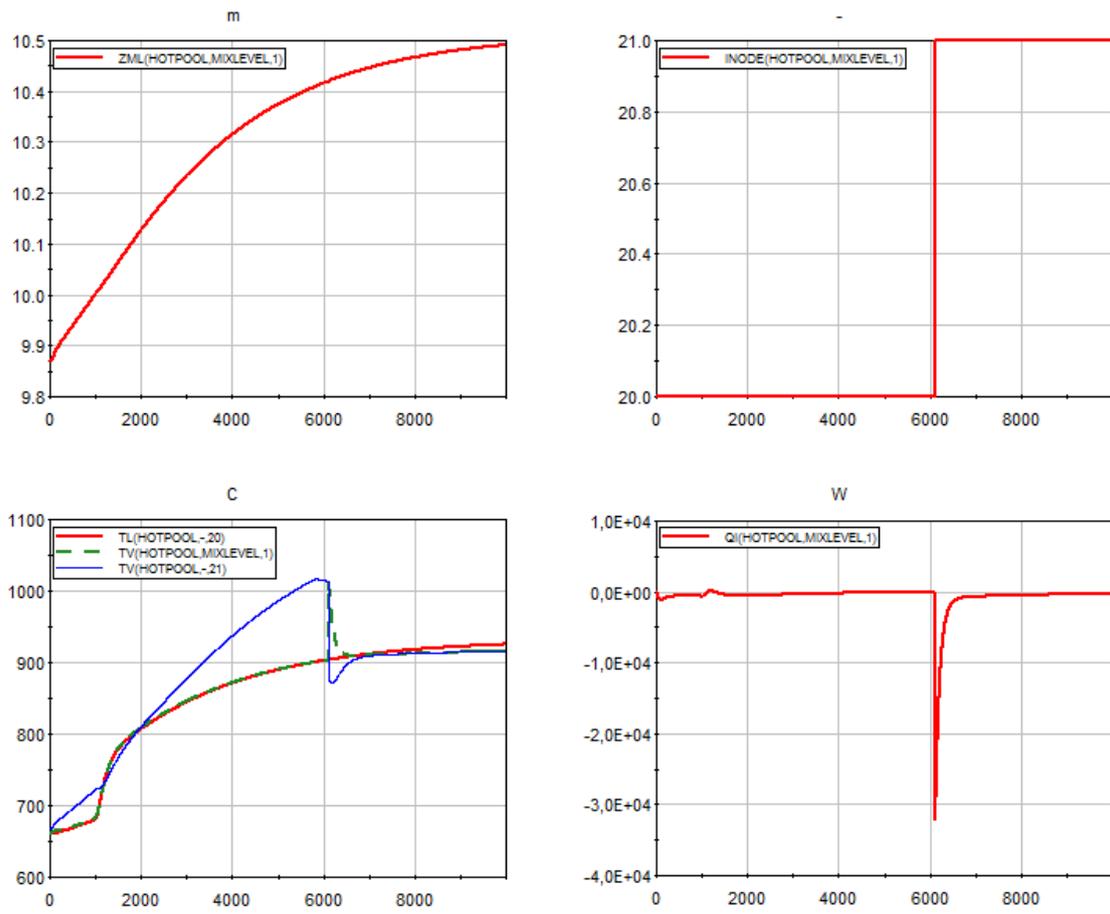


Abb. 6.27 Am Gemischspiegel im Hot Pool; im Uhrzeigersinn: Gemischspiegelhöhe, CV-Index mit ML, Wärmestrom vom oberen zum unteren ML-Teil-CV, Temperaturen am ML

6.1.3.8 Schnittstelle für vom Anwender vorzugebenden Stoffwerte

Es wurden die Stoffwerte für die Salzschnmelzen FLiNaK und FLiBe in ATHLET implementiert. Für die Implementierung der Stoffwerte zusätzlicher Salzschnmelzen wurden zwei weitere frei anwählbare Arbeitsmedien implementiert und eine auf der in ATHLET bereits eingesetzten Plug-in Technik basierende Schnittstelle entwickelt, die es dem Anwender erlaubt, die Stoffeigenschaften der beiden Arbeitsmedien selbst vorzugeben. Damit ist es möglich, die typischerweise unterschiedlichen Kühlmittel auf der Primär- und der Sekundärseite eines MSR frei zu wählen. Die Schnittstelle ist nicht auf Salzschnmelzen beschränkt. Die vom Anwender vorgegebenen Arbeitsmedien haben jedoch folgende gemeinsame Eigenschaften bzw. Einschränkungen:

- Die Medien können nicht siedern und müssen während der gesamten Simulation deutlich unterkühlt bleiben.
- Es wird die Dittus-Boelter-Korrelation für die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Wand und Kühlmittel verwendet. Die Siedekrise wird nicht simuliert.
- Die Stoffe können mit dem NC-Gasmodell kombiniert werden.
- Es werden die für Wasser entwickelten thermohydraulischen ATHLET-Modelle verwendet, wobei die bereitgestellten Stoffwerte zum Einsatz kommen.

Die genaue Beschreibung der Schnittstelle ist der Technischen Notiz /LER 18/ zu entnehmen.

6.2 AP 4.2: Schnittstelle für Wärmestrukturparameter

Für die in AP 2.2 beschriebenen, weiterentwickelten Modelle zur Simulation thermisch bedingter Strukturausdehnungseffekte sind die benötigten Temperaturverteilungen aus ATHLET auszulesen und in die 3D-Neutronenkinetik (PARCS) zu übertragen. Dazu wurden Erweiterungen an der Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und PARCS vorgenommen.

6.2.1 Übertragung der Hüllrohrtemperaturverteilungen

Zunächst wurde für die Übertragung der axialen Hüllrohrtemperaturprofile ein neues Array `TCKN3(:)` eingeführt, welches im Modul `cn3d.f` definiert wird und für jeden der insgesamt `IN3TOT` 3D-Neutronenkinetik-Nodes die dort vorliegende Hüllrohrtemperatur gespeichert. Die Dimensionierung dieses Arrays erfolgt im Unterprogramm `ALLOCN3D.f`. Die Hüllrohrtemperatur ist durch die rechtsseitige Randtemperatur (ATHLET-Array `TSR(:)`) das dem jeweiligen Thermofluidobjekt (TFO) zugeordneten ROD-Modells gegeben. Die Übertragung der Temperaturverteilungen von `TSR(:)` in das Array `TCKN3(:)` erfolgt durch eine Erweiterung im Unterprogramm `N3SET.f`. Wegen der in der Regel unterschiedlichen axialen Nodalierungen in PARCS und ATHLET ist eine Interpolation zwischen den jeweiligen Diskretisierungen erforderlich, für die das Unterprogramm `N3FBOU.f` verwendet wird. Im PARCS-Kopplungsmodul `cpl_athletM_plugin.f90` wird schließlich die so berechnete Hüllrohrtemperaturverteilung bei aktiviertem axialen Kernaussdehnungsmodell aus `TCKN3(:)` an das Array `ekanal(i, j)%temperature(k)` übergeben, welches für jede Brennelementposition (i, j) im Kern die Hüllrohrtemperatur an der axialen Masche k enthält.

6.2.2 Übertragung der Temperatur der Kerngitterplatte

Die Kerngitterplatte ist eine massive Stahlkonstruktion, auf der die Füße der Brennelemente fixiert sind. Das in den Kern eintretende Kühlmittel durchströmt zunächst die Kerngitterplatte, bevor es die Brennelemente erreicht. Die radiale Kernaussdehnung wird maßgeblich durch die radiale Ausdehnung der Kerngitterplatte infolge Aufheizung bestimmt. Aufgrund der großen Masse der Kerngitterplatte erfolgt ihre Temperaturänderung gegenüber der Änderung der Kühlmitteltemperatur am Kerneintritt zeitlich stark verzögert. Die Temperatur der Kerngitterplatte wird in ATHLET daher mit Hilfe eines dem TFO der Kerngitterplatte zugeordneten Wärmestrukturobjekts berechnet. Die Modellierung dieses Wärmestrukturobjekts erlaubt die realistische Simulation der zeitabhängigen Aufheiz- und Abkühlereffekte. Als Temperatur der Kerngitterplatte wird die Temperatur im obersten Node dieser Wärmestruktur angenommen, die aus ATHLET mittels eines GCSM-Signals ausgelesen und an PARCS übergeben wird. Die nachfolgende Abb. 6.28 zeigt dies anhand des ATHLET-Open-Core-Modells von ASTRID.

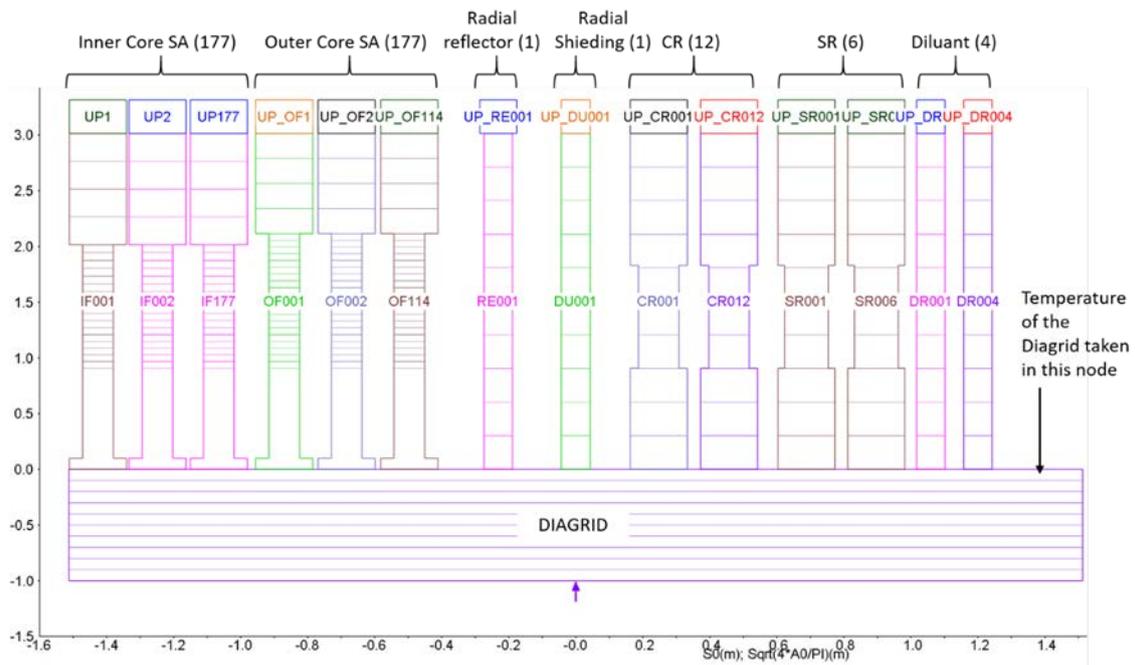


Abb. 6.28 Übernahme der Temperatur der Kerngitterplatte am Beispiel des ATHLET-Open-Core-Modells von ASTRID

6.3 AP 4.3: Erstellung thermohydraulischer Modelle schneller Systeme

6.3.1 ATHLET-Modell für den Reaktor Phénix

Für den Forschungsreaktors Phénix wurde ein ATHLET-Anlagenmodell unter Verwendung der ATHLET-Version 3.1A entwickelt. Das Modell wurde so gestaltet, dass gemäß der Zielsetzung des Arbeitspunktes AP 4.4 (s. Abschnitt 6.4) die thermohydraulischen Randbedingungen für die gekoppelten ATHLET-OpenFOAM-Simulationen liefern kann. Das Modell beinhaltet die folgenden Reaktorbereiche:

- Oberes Plenum (Hot-Pool),
- Unteres Plenum (Cold-Pool),
- Strömungsweg zur Reaktorwandkühlung,
- drei Kühlmittelpumpen mit den entsprechenden homologen Pumpencharakteristiken,
- Sechs Wärmetauscher (IHX),
- Abbildung des Zwischenkreises („Intermediate-Loop“, keine geschlossene Schleife).

Der Reaktorkern wurde durch eine Parallelkanaldarstellung modelliert, in der jedes Brennelement sowie Steuer- und Reflektorelemente einschließlich der zugehörigen Strukturen dargestellt wird. Die innere Kernzone enthält 54 Brennelemente, die äußere Kernzone 64 Brennelemente. Um den korrekten Druckverlust im Kern zu reproduzieren, wurde der Kern in drei Teile unterteilt (Diagrid, Core und Coreout). Die Druckverlustbeiwerte wurden so eingestellt, dass der Druckverlust über den Kern die Spezifikation entspricht. Das heiße Plenum über dem Kern besteht aus fünf PIPE-Elementen (HPcore2IHX, HPmix, HPupper und HPtorAr). An diesen Bereich wurden die Pumpen gekennzeichnet (mit PP1in, PP1mix und PP1out) sowie die Wärmetauscher (gekennzeichnet mit IHX11in, IHX11upmix und IHX11b) angeschlossen. Die Wärmetauscher sind mit den Zwischenkühlkreislauf über das Wärmeleitobjekt (H-IHX11) verbunden. Der Zwischenkühlkreislauf ist mit „ILoop“ gekennzeichnet und bildet nur die Wärmeübergangsstrecke ab. Massenstrom und Temperatur wurden in tabellarischer Form als Randbedingung festgelegt. Im unteren Bereich des Reaktordruckbehälters (RDB) teilt sich der Gesamtpumpenfluss zwischen dem Kern (~ 90 %) und der RDB-Wandkühlung (vessel cooling) (~ 10 %) auf, wie von der CEA angegeben. Da die Geometrie der Kerngitterplatte (Diagrid) komplex ist und nicht detailliert in den Spezifikationen angegeben war, wurden die Flächen- und Reibungsverluste so angepasst, dass die genannte Massenstromverteilung entsteht. Zur Simulation der Wärmeströme, Wärmekapazität und Temperaturverteilung in den Brennelementen wurden die in ATHLET vorhandenen Standard-Wärmeleitobjekte (Hohlzylinder) verwendet. Dabei wurden die Materialeigenschaften von Uran, MOX und Zirconium berücksichtigt. Abb. 6.29 zeigt Komponenten und Nodalisierung des ATHLET-Modells.

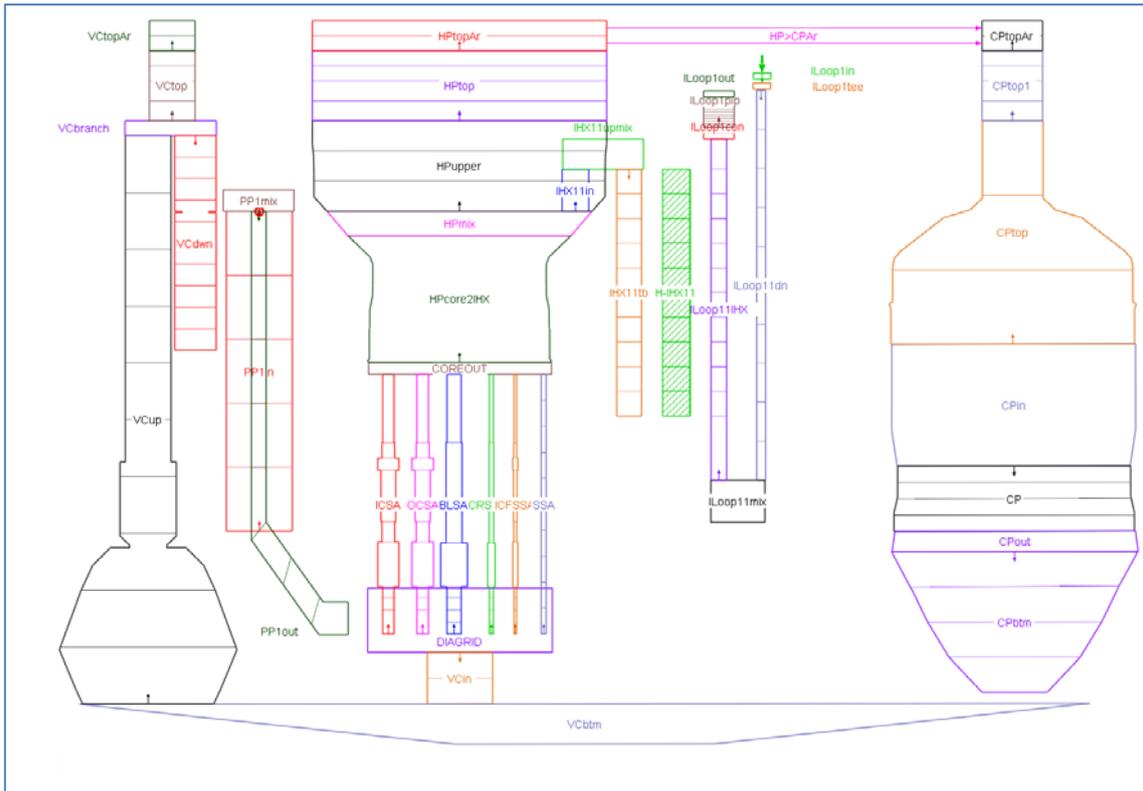


Abb. 6.29 ATHLET-Modell des Reaktors Phénix

6.3.2 Der Phénix-Dissymmetric-Test

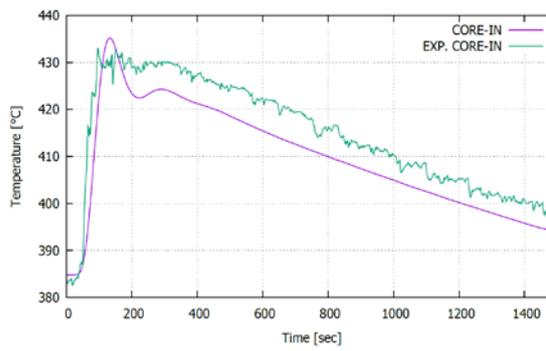
Das im vorigen Abschnitt beschriebene ATHLET-Modell von Phénix wurde anhand des sog. *Dissymmetric Tests* überprüft. Die in diesem Experiment gewonnenen Messdaten wurden über das FRKP-Portal (Fast Reactor Knowledge Preservation) bezogen. Im Rahmen der Nachrechnungen wurden mit dem ATHLET-Modell verschiedene globale und lokale thermohydraulische Größen (Druckverlust, Brennelement- und Kühlmitteltemperaturen etc.) berechnet. Der Dissymmetric Test besteht aus verschiedenen Szenarien, die wie folgt ablaufen:

- Im stationären Ausgangszustand befindet sich der Reaktor im 2-Loop-Betrieb bei einer thermischen Leistung von 350 MW.
- Eine sekundärseitige Umwälzschleife ist nicht im Betrieb.
- Eine Pumpe in der Sekundärseite fällt aus.
- Automatische Abschaltung, Turbinenabschaltung, Reduzierung der Pumpendrehzahl in der anderen Schleife nach 5 Sekunden.

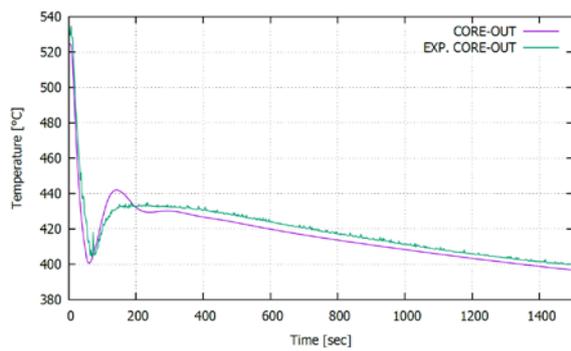
- Es kommt zum Austrocknen der Wärmeübertragungsrohre sowie zum Ausfall der Pumpen im Zwischenkreis.
- Nach 48 Sekunden wird Reaktorschnellabschaltung (SCRAM) eingeleitet.
- Nach weiteren 1.800 Sekunden (30 Minuten) ist das Ende der Tests erreicht.

Nach dem Ausfall der sekundärseitigen Pumpe steigt die Temperatur im Kern. Auf den Bildern sind die Ein- und Austrittstemperaturen dargestellt. Innerhalb von 170 Sekunden steigt die Eintrittstemperatur von 385 °C auf 435 °C. Während dieser Phase wurde in der Analyse die Reduzierung der Pumpendrehzahl in der anderen Schleife simuliert. Nach 48 Sekunden wurde auch die Reaktorschnellabschaltung ausgeführt, wodurch die Kernleistung auf die Nachzerfallsleistung zurückfiel. In der Langzeitphase berechnete ATHLET eine um ca. 8 °C niedrigere Eintrittstemperatur im Kern als im Experiment. Die abgeführte Wärme aus dem System ist bei ATHLET größer als im Experiment beobachtet. In Abb. 6.30 c) bis f) werden die ATHLET-Ergebnisse mit den Ergebnissen von CEA, NRG und KIT verglichen. Hier haben auch zwei Teilnehmer (NRG und KIT) deutlich schnellere Temperaturabsenkungen im System berechnet. Bezüglich der Austrittstemperatur berechnet ATHLET ebenfalls eine schnellere Temperaturabsenkung. Im Vergleich mit anderen Instituten konnte KIT den Ablauf am realistischsten nachbilden.

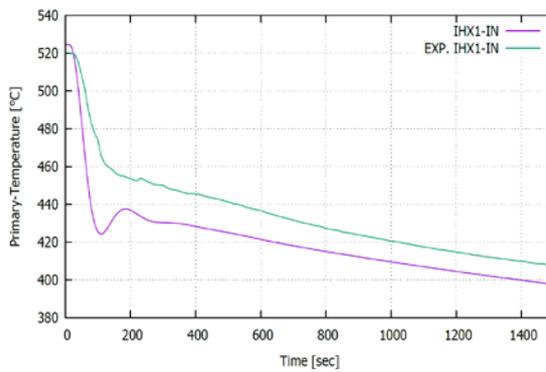
Die Ergebnisse der ATHLET Analyse zeigen eine akzeptable Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Das Modell berechnet Zustandsgrößen wie z. B. Massenströme, Druckverteilung sowie die Temperaturen im Kern und an den Pumpen hinreichend gut. Es ist aber auch zu erkennen, dass die Wärmeübertragung an den Zwischenkühlkreislauf (IHX) falsch berechnet wird. Hier berechnet ATHLET unterschiedliche Temperaturgradienten, vor allem in der Langzeitphase. Die Ursachen hierfür sind bislang nicht eindeutig geklärt. Dieser Effekt soll deshalb in der Zukunft noch näher untersucht und geklärt werden. Vermutlich wird wegen des nicht vollständig modellierten Zwischenkreislaufs der Wärmeübergang überschätzt. Der Auslauf der Pumpen im Zwischenkreislauf kann zur Stagnation des Fluids oder zur Strömungsumkehr führen, die deutlich schlechtere Wärmeabfuhr zur Folge hätte.



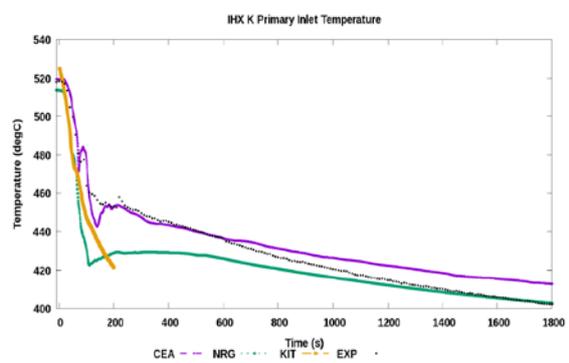
(a) Eintrittstemperatur im Kern



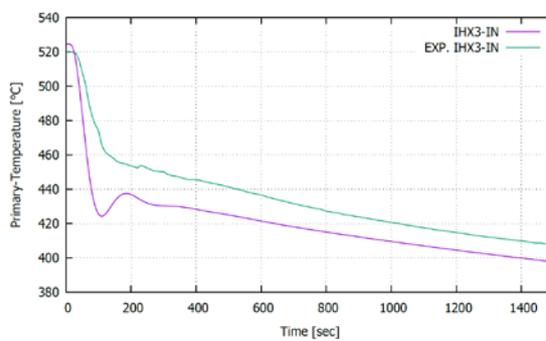
(b) Austrittstemperatur im Kern



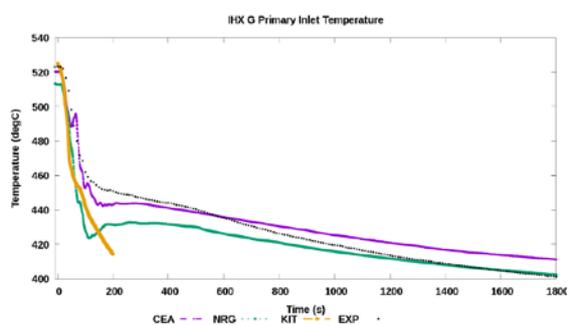
(c) Wärmetauscher IHX1 (K) Eintrittstemperatur



(d) Wärmetauscher IHX-K Eintrittstemperatur

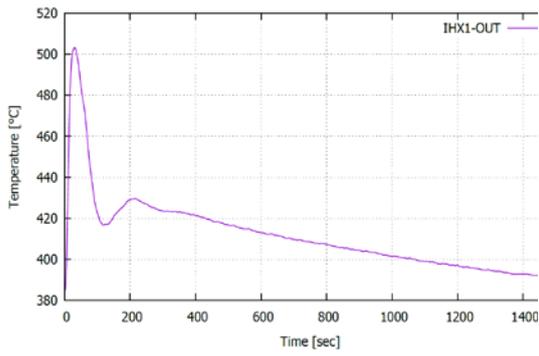


(e) Wärmetauscher IHX1 (G) Eintrittstemperatur

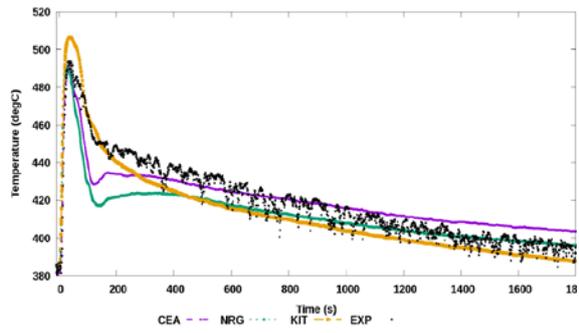


(f) Wärmetauscher IHX-G Eintrittstemperatur

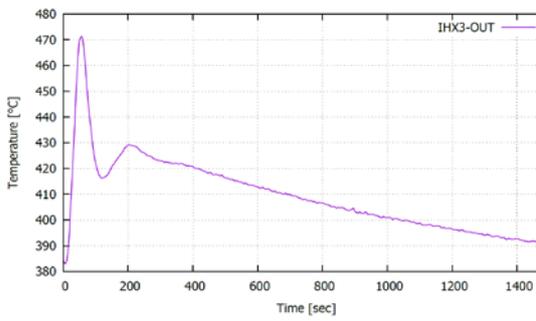
Abb. 6.30 Mit ATHLET berechnete zeitliche Temperaturverläufe zum Dissymmetric-Test in Phénix (Teil 1)



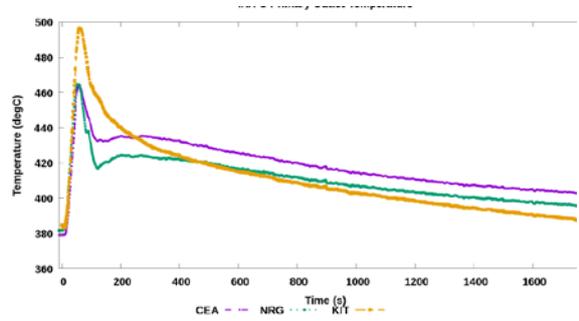
(g) Wärmetauscher IHX1 (K) Austrittstemperatur



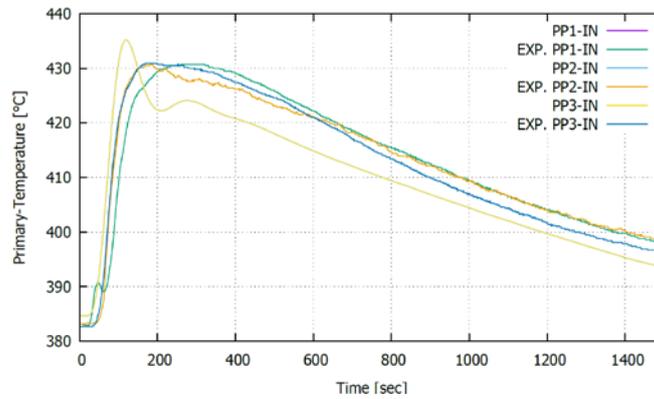
(h) Wärmetauscher IHX-K Austrittstemperatur



(i) Wärmetauscher IHX3 (K) Austrittstemperatur



(j) Wärmetauscher IHX1 (K) Austrittstemperatur



(k) Temperatur an den Pumpeneintritten

Abb. 6.31 Mit ATHLET berechnete zeitliche Temperaturverläufe zum Dissymmetric-Test in Phénix (Teil 2)

6.4 AP 4.4: Kopplung OpenFOAM mit Systemcodes

In verschiedenen vergangenen Projekten wurde eine Kopplungsschnittstelle zwischen dem GRS-Systemcode ATHLET und verschiedenen Solvern auf Basis von OpenFOAM entwickelt /SEU 16/, /PAP 19/. Ziel der Arbeiten in diesem Projekt war es, diese Kopplungsschnittstelle für den Einsatz mit realistischen Geometrien von schnellen Reaktorsystemen weiterzuentwickeln und zu testen. Dabei sollten insbesondere auch gezeigt werden, dass die Codes mit mehr als zwei Schnittstellen gekoppelt werden können. Dazu flossen auch die im Rahmen des teilweise parallellaufenden Vorhabens RS1540 durchgeführten Arbeiten zu einer Verbesserung des Kopplungsverfahrens zwischen ATHLET und OpenFOAM ein.

Da keine Informationen zur ursprünglich geplanten Reaktorgeometrie (MONJU) und damit auch kein ATHLET Modell verfügbar war (vgl. Hinweis (b) in Kapitel 2 auf Seite 3), wurde stattdessen ein ATHLET-Modell und zwei CFD Rechengitter des im Jahr 2009 stillgelegten französischen natriumgekühlten Reaktors Phénix für die gekoppelten Rechnungen verwendet, die der GRS vom KIT zur Verfügung gestellt wurden /WAN 19/.

Da in der Projektplanung vorgesehen war, das mit OpenFOAM mitgelieferte Werkzeug snappyHexMesh, das der Gittergenerierung dient, zu testen, wurde für diesen Arbeitspunkt die Geometrie des unteren Plenums eines deutschen Druckwasserreaktors verwendet. Dabei zeigte sich, dass kein ausreichend gutes Rechengitter erstellt werden konnte, weil die vorhandene CAD-Daten nicht den Qualitätsanforderungen von snappyHexMesh, insbesondere an die Geschlossenheit der Oberflächen, erfüllten.

Die gekoppelten Rechnungen mit entsprechenden Anpassungen der vom KIT bereitgestellten ATHLET- und OpenFOAM Modelle konnten erfolgreich durchgeführt werden. Mit Hilfe der im Projekt weiterentwickelten Kopplungsrandbedingungen und Anpassungen an der Kopplungsmethode liefen die gekoppelten Simulationen stabil.

Es wurde eines der im Rahmen des THINS Projekts entwickelten Turbulenzmodelle für Flüssigkeiten mit niedrigen Prandtl-Zahlen implementiert und an Beispielrechnungen überprüft. Dabei zeigte sich, dass es insbesondere an die Gitterauflösung in Wandnähe so hohe Anforderungen stellt (hohe Anzahl der Gitterzellen), dass ein praktischer Einsatz in den Rechnungen für den Phénix nicht möglich war. Teile der in diesem Projekt durchgeführten Entwicklungen und erzielten Ergebnisse wurden auf dem 14th OpenFOAM Workshop 2019 in Duisburg vorgestellt /HER 19a/. Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurden die Einsatzfähigkeit von OpenFOAM für re-aktorsicherheitstechnische Fragestellungen getestet und weiter verbessert. Zum einen wurde getestet, wie gut sich die mit OpenFOAM mitgelieferten Gittergenerierungstools eignen, um für Reaktorgeometrien CFD-Rechengitter zu erstellen. Außerdem wurde die Kopplung zwischen ATHLET und OpenFOAM für die Simulation des Primärkreises des natriumgekühlten Reaktors Phénix verwendet. Abschließend wurde exemplarisch ein Turbulenzmodell für Fluide mit kleinen Prandtl-Zahlen in OpenFOAM implementiert und anhand von einfachen Geometrien getestet.

6.4.1 Test des Gittergenerierungstools snappyHexMesh

Mit OpenFOAM werden standardmäßig zwei Gittergenerierungstools mitgeliefert. Eines davon, blockMesh, kann nur zur Erstellung einfacher Geometrie verwendet werden, da keine CAD-Daten importiert werden können, sondern die Geometrie in der Eingabedatei manuell spezifiziert werden muss. Das zweite Tool, snappyHexMesh, kann eine Geometrie im Format STL importieren und dann das zu generierende Gitter an diese Geometrie anpassen.

Um die Einsatzfähigkeit von snappyHexMesh für reaktortypische Geometrien zu testen, wurde die Geometrie des unteren Plenums eines Konvoi-Reaktors verwendet, da für diese die Geometriedateien vorliegen und die Geometrie die für Kernreaktoren typische Komplexität aufweist. Dies trifft insbesondere auf die Siebtonne zu, die viele hundert Löcher besitzt, die den Regeln der Best-Practice-Guidelines im Gitter aufgelöst werden sollen (statt sie als poröses Medium zu modellieren) /MAH 15/.

Die dazu notwendigen Arbeitsschritte bestanden darin, aus der Geometrie (im IGES- bzw. STEP-Format) eine Geometriedatei der Oberflächen innerhalb und an den Rändern des Rechengebiets (im STL-Format) zu generieren.

Im Format STL wird die Geometrie durch ein Gitter der Oberflächen dargestellt, wobei das Gitter aus Dreiecken besteht. Um die STL-Datei mit snappyHexMesh verwenden zu können, ist es notwendig, dass die Dreiecke auch an den Übergängen zwischen verschiedenen Flächen gemeinsame Knoten besitzen, d. h. die Oberfläche ist geschlossen (s. Abb. 6.32). Liegt die Ausgangsgeometrie nur als Oberflächendaten und nicht als Volumendaten vor, so muss diese geschlossene Oberfläche erst manuell erstellt werden. Für die Geometrie des unteren Plenums gelang dies mit der Open Source Software Salome, wobei ein erheblicher manueller Aufwand notwendig war. In einem anderen Projekt wurde die Geometrie eines natriumgekühlten Reaktors erstellt. Dort wurde die Oberfläche mit geringerem manuellem Aufwand mit der Software Space Claim vorbereitet /HER 19b/.

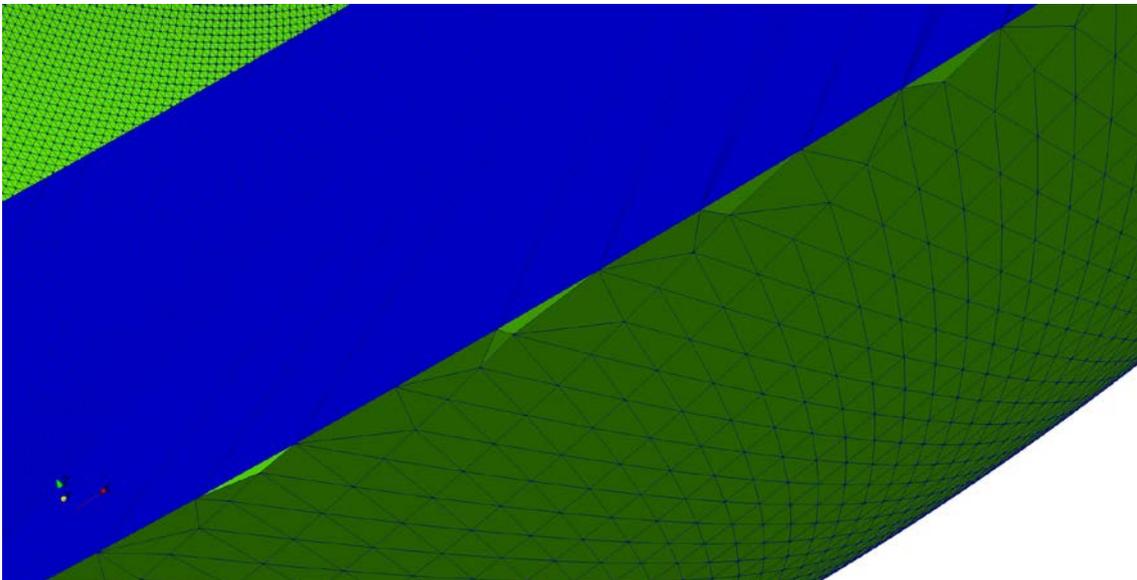


Abb. 6.32 Beispiel für ein Oberflächengitter im STL-Format (innere Wand des RDB grün, Fläche zwischen Downcomer und unterm Plenum blau)

Auf Basis der STL-Datei des unteren Plenums konnte dann die Gittergenerierung mit Hilfe von snappyHexMesh gestartet werden. Es wurde auch getestet, ob eine Verbesserung der zur Verfügung stehenden Geometrie möglich war (z. B. durch Schließen von Löchern in den Oberflächen, Vereinfachung von Schnittlinien von Oberflächen, Erhöhung der Auflösung der Oberflächenrepräsentation der Geometrie).

Es zeigte sich, dass snappyHexMesh sehr empfindlich auf Probleme in der Oberflächenrepräsentation der Geometrie, z. B. Löcher, reagiert. Teilweise war es gar nicht möglich, ein Rechengitter des durchströmten Bereichs zu erhalten, teilweise wiesen die erzeugten Gitter eine schlechte Qualität bezüglich üblicher Metriken, wie z. B. der (nicht-)Orthogonalität auf. Als Problem wurde die Geometriedatei identifiziert, die als Ausgangsbasis diente (im IGES- bzw. STEP-Format). Diese Probleme traten aber nicht im besonders komplexen Bereich der Geometrie, d. h. in der direkten Umgebung der Siebtonne, sondern am Rand des Rechengebiets im Bereich der Einhüllenden des unteren Plenums auf. Dies betraf insbesondere die nicht korrekte Abbildung von Kanten im Gitter (s. Abb. 6.33) und das Fehlen von Schlitzern in der Siebtonne (s. Abb. 6.34), d. h. das Erzeugen von Gittern für das Fluid im Bereich der Schlitze.

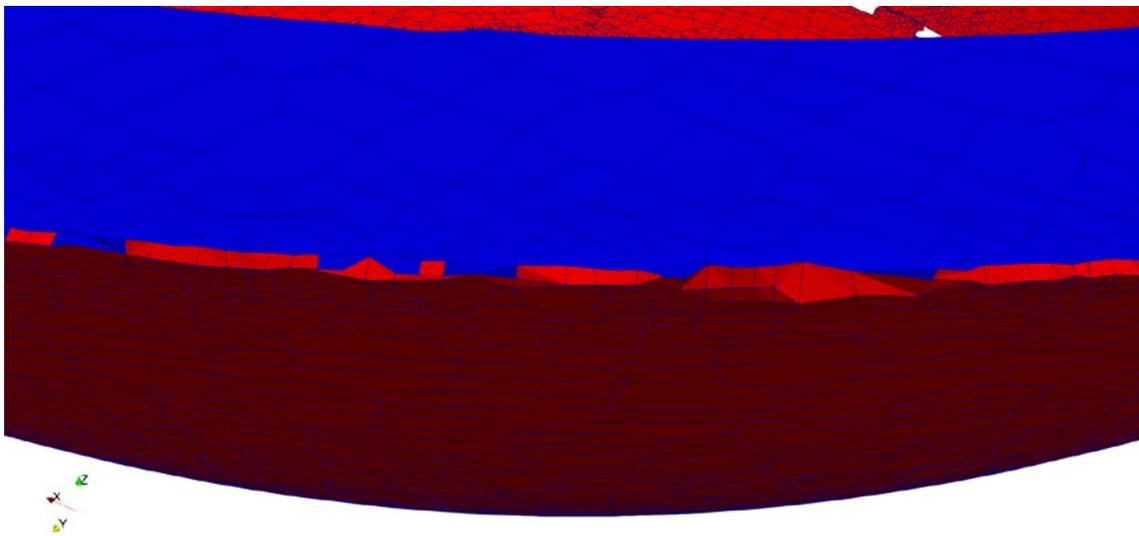


Abb. 6.33 Probleme bei der Gittererstellung an der Kante zwischen äußerer Wand des unteren Plenums (rot) und der Schnittstelle zwischen Downcomer und unterem Plenum (blau)

Für die Simulationen eines flüssigmetallgekühlten Reaktors wurden der GRS vom KIT /WAN 19/ mit snappyHexMesh erzeugte Rechengitter für das heiße und kalte Plenums des Reaktors Phénix zur Verfügung gestellt. Auch diese wiesen Probleme an den Übergängen zwischen verschiedenen Oberflächen und der korrekten Auflösung von Kanten auf. Diese Probleme erforderten spezielle Maßnahmen bei der Durchführung von Simulationen mit OpenFOAM, die in Abschnitt 6.4.2.3 beschrieben sind. Insgesamt zeigte sich, dass mit der getesteten Version (OpenFOAM-4.0) von snappyHexMesh ein erheblicher manueller Aufwand notwendig ist, um Gitter von guter Qualität für komplexe Geometrien zu erhalten. Dies betrifft insbesondere die Qualität der verwendeten Geometriedaten.

6.4.2 Gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulation des natriumgekühlten Reaktors Phénix

Für die gekoppelte ATHLET-OpenFOAM Simulation kam die in diesem Projekt weiterentwickelte Kopplungsmethode zwischen OpenFOAM und ATHLET zum Einsatz, die ursprünglich auf der ATHLET Schnittstelle für die Kopplung mit CFX beruhte und in verschiedenen GRS-Projekten weiterentwickelt wurde /SEU 16/, /PAP 19/. Im Rahmen dieses Projekts wurde insbesondere die Kopplung von mehr als zwei Schnittstellen für einphasige Fluide zwischen ATHLET und OpenFOAM verifiziert.

Gekoppelte Simulationen von reaktortypischen Geometrien, wie geschlossene Kreisläufe oder die Verwendung von mehr als zwei Kopplungsschnittstellen, sind numerisch nicht einfach. Es sind Maßnahmen notwendig, um stabile Lösungen zu erhalten, die über eine explizite Kopplung, d. h. den einmaligen Austausch von Strömungsgrößen an den Kopplungsschnittstellen pro Zeitschritt, hinausgehen. Eine Möglichkeit ist, die Strömungsgrößen mehrmals pro Zeitschritt auszutauschen und geeignete Maßnahmen zur Erhöhung der Stabilität durchzuführen. Für die Kopplung zwischen ATHLET und CFX und dann auch für die Kopplung zwischen ATHLET und OpenFOAM wurde zunächst die Methode der Unterrelaxation verwendet /GLA 12/, /SEU 16/. Basierend auf der in /TOT 17/ veröffentlichten quasi-Newton (Newton-ähnlichen) Methode für die Kopplung von RELAP und Fluent wurde in /IGL 17/ und /PAP 19/ diese Methode für die Kopplung von ATHLET mit OpenFOAM implementiert. Die Methoden werden im Abschnitt 6.4.2.2 ausführlicher beschrieben.

Die quasi-Newton Methode wurde dann angewandt, um den Start der Pumpen im Phénix Reaktor bis zum Erreichen von stationären Bedingungen zu simulieren.

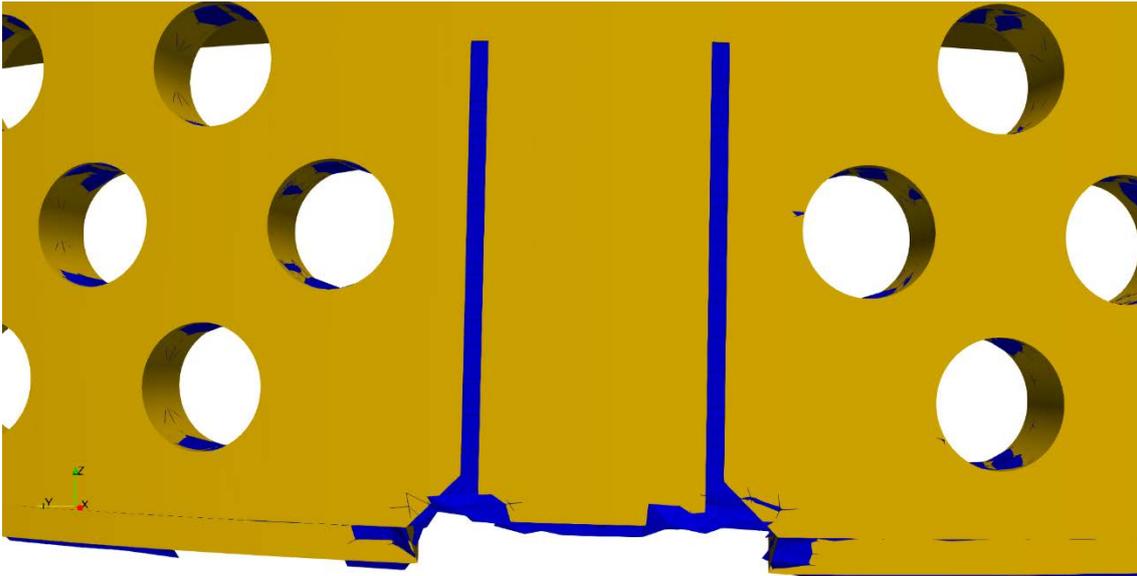


Abb. 6.34 Fehlende Schlitzte der Siebtonne im erzeugten Gitter (blau) im Vergleich zur STL-Geometrie (braun)

6.4.2.1 Kopplungsarchitektur

In gekoppelten Rechnungen von ATHLET mit OpenFOAM laufen die beiden Solver in unterschiedlichen Prozessen. Gegebenenfalls verwendet OpenFOAM bei Parallelrechnungen selbst mehrere Prozesse, die untereinander mit MPI gekoppelt sind. ATHLET verwendet zur Parallelisierung mehrere Threads. Die interne Kommunikation der Programme hat dabei keinen Einfluss auf die Kopplung.

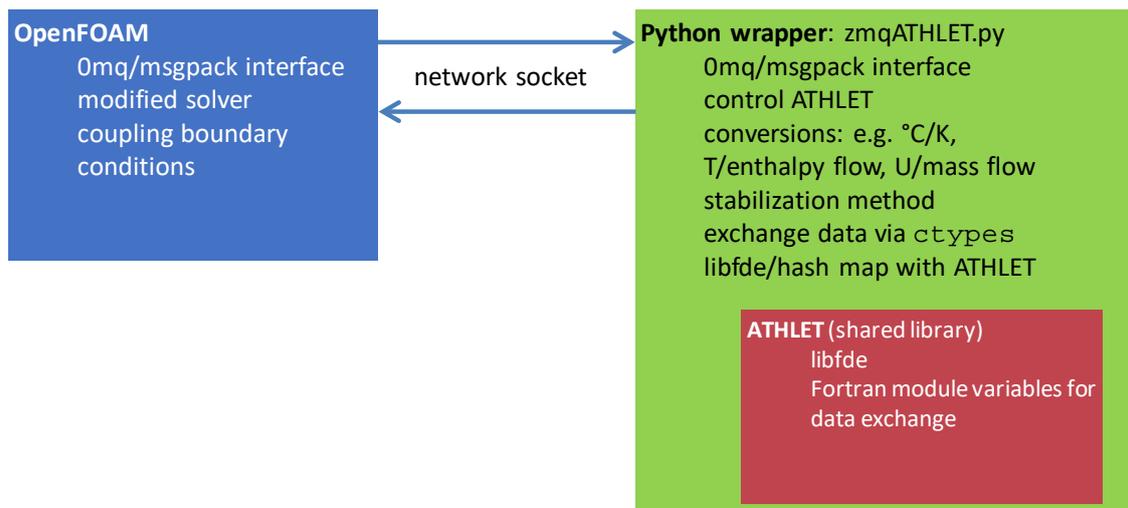


Abb. 6.35 Kopplungsarchitektur /HER 16/, /PAP 19/

Die Kopplungsseite von OpenFOAM besteht dabei aus speziellen C++-Klassen für den Datenaustausch und der Synchronisation der Programme (s. Abb. 6.36). Außerdem wurden auf Basis verschiedene vorhandene Randbedingungen neue erstellt, die die Daten mit dem gekoppelten Programm (hier ATHLET) austauschen. Sie übernehmen dabei die Umrechnung von zweidimensionalen Feldern auf den Kopplungsschnittstellen von OpenFOAM mit den eindimensionalen Werten auf den Kopplungsschnittstellen von ATHLET.

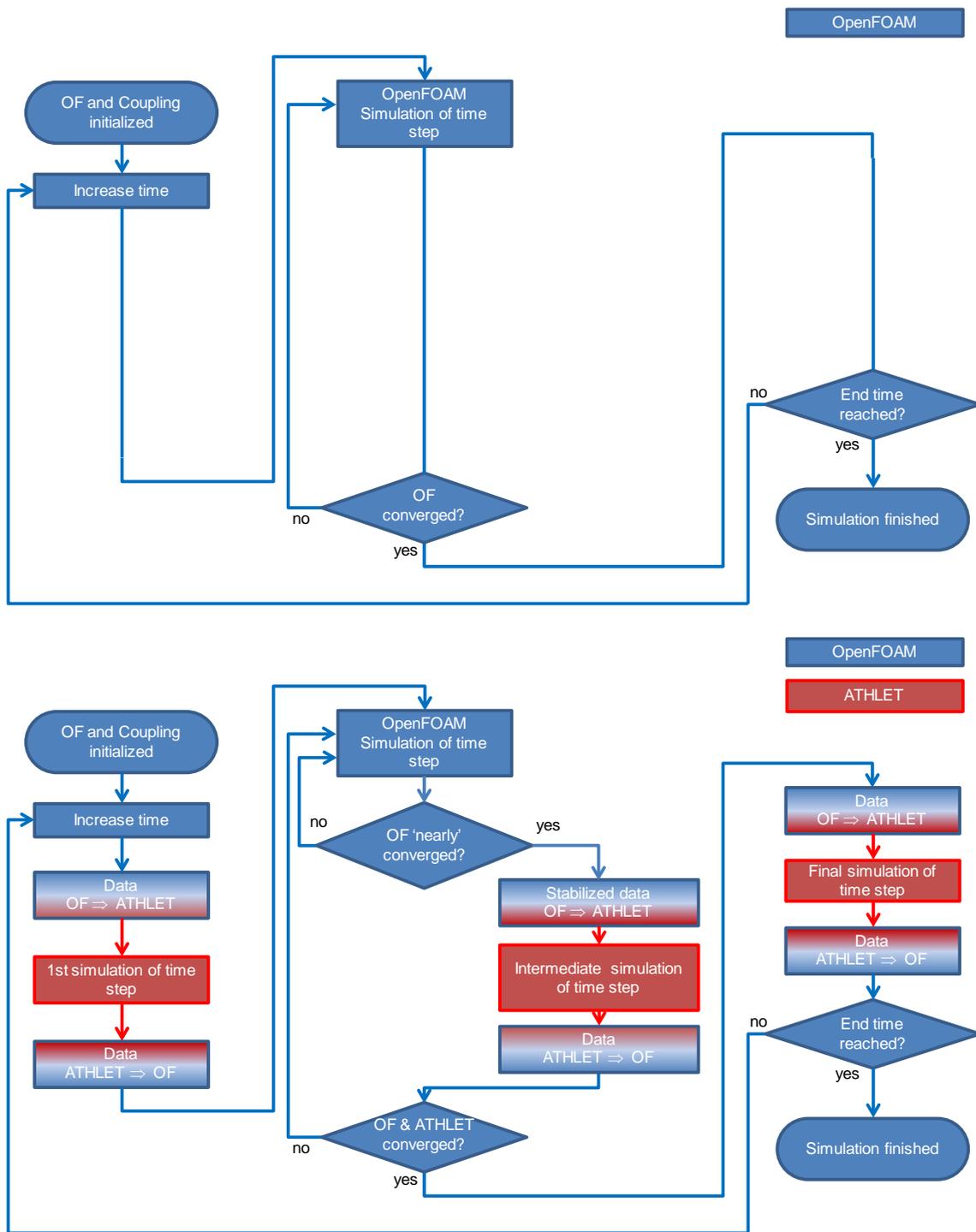


Abb. 6.36 Modifikation der OpenFOAM Pimple Solver /HER 16/

Für die Simulation der Strömungen in Phénix wurde der Solver `buoyantPimpleFoam-Coupled` verwendet, der auf dem Solver `buoyantPimpleFoam` basiert. Dieser dient zur Simulation einphasiger Strömung unter Berücksichtigung von Auftriebseffekten durch temperaturbedingte Dichteänderungen des Fluids. Der Datenaustausch zwischen den Programmen erfolgt über eine Netzwerksschnittstelle mit Hilfe der Open Source Bibliothek `ZeroMQ` [19], wobei die Daten unter Verwendung der Open Source Bibliothek `msgpack` [19] so codiert werden, dass sie programmiersprachenunabhängig ver- und entpackt werden können.

Die Kopplung auf ATHLET-Seite erfolgt über ein Wrapperskript in der Programmiersprache Python. Dieses wartet auf an der Netzwerkschnittstelle auf Befehle des gekoppelten Programms (hier der OpenFOAM Solver), führt den Datenzugriff auf die internen Kopplungsfelder von ATHLET durch und steuert den Simulationslauf von ATHLET.

Im Pythonwrapper von ATHLET werden auch die unten beschriebenen Stabilisierungsmethoden angewandt, um eine numerisch stabile gemeinsame Lösung der beiden Simulationsprogramme zu erreichen.

6.4.2.2 Stabilisierungsmethoden

Die beiden Simulationsprogramme müssen an allen Kopplungsschnittstellen gemeinsame Lösungen finden. Um unphysikalische Schwingungen der Kopplungsgrößen zu vermeiden, ist eine besondere Behandlung der Kopplungsgrößen notwendig. Wie in Abb. 6.35 und Abb. 6.36 dargestellt, wird die Stabilisierungsmethode im Pythonwrapper von ATHLET beim Austausch von Kopplungsdaten von OpenFOAM zu ATHLET eingesetzt.

Die Stabilisierungsmethode berechnet die neuen Eingangsgrößen α^n für ATHLET an den Kopplungsschnittstellen für die aktuelle Iteration n der gekoppelten Rechnung für den aktuellen Zeitschritt. Die Eingangsgrößen α^n werden auf Basis der aktuellen Ausgangsgrößen von OpenFOAM σ^n an den Kopplungsschnittstellen und den Eingangsgrößen von ATHLET α^{n-1} für die vorhergehende Iteration $n - 1$ der Kopplung berechnet.

Die erste Methode besteht in der Unterrelaxation der Kopplungsdaten. Dazu werden gemäß Gleichung (6.4) die neuen Eingabedaten für ATHLET α^n aus der Summe der alten ATHLET-Eingangsgrößen α^{n-1} plus einer mit dem Unterrelaxationsfaktor w gewichteten Differenz der alten ATHLET-Eingangsgrößen α^{n-1} und den neuen OpenFOAM-Ausgangsgrößen o^n gebildet.

$$\alpha^n = \alpha^{n-1} + w(o^n - \alpha^{n-1}) \quad (6.4)$$

Eine stabile Lösung für den aktuellen Zeitschritt ist dann erreicht, wenn das nach Gleichung (6.5) berechnete Residuum den Wert 0 erreicht.

$$R^n = o^n - \alpha^{n-1} \quad (6.5)$$

Dies führt zu der zweiten Methode, die für die Kopplung des Systemcodes RELAP mit dem CFD-Simulationsprogramm Fluent in /TOT 17/ beschrieben wurde. Dabei wird angenommen, dass das Residuum als eine Funktion gemäß Gleichung (6.6) geschrieben werden kann, wobei Ω die Ergebnisse von OpenFOAM an den Kopplungsschnittstellen abbildet, die auf den Ergebnissen von ATHLET A basiert, die wiederum mit Hilfe der Eingabe α für ATHLET berechnet wurden.

$$R(\alpha) = \Omega(A(\alpha)) - \alpha = 0 \quad (6.6)$$

Dann sollen die Eingaben α^n bestimmt werden, die zu einem Residuum von 0 führen, wobei die Funktion für das Residuum gemäß Gleichung (6.7) linearisiert wird.

$$R(\alpha) = 0 \approx R^n + (\alpha^n - \alpha^{n-1})J(\alpha^n) \quad (6.7)$$

Dazu muss die Jacobimatrix (6.8) numerisch bestimmt werden.

$$J_{ij} = \frac{R_i(\alpha + \delta\alpha_j) - R_i(\alpha)}{\delta\alpha_j} \quad (6.8)$$

Die numerische Bestimmung der Jacobimatrix erfordert zusätzlich Iterationen der gekoppelten Solver für den aktuellen Zeitschritt. Wurde bereits für einen vorherigen Zeitschritt eine Jacobimatrix bestimmt, wird deshalb zunächst überprüft, ob das Residuum schneller als ein vom Nutzer vorgegebener Wert zwischen aufeinanderfolgenden Iterationen reduziert wird. Ist dies der Fall, so wird die alte Jacobimatrix wiederverwendet. Ansonsten erfolgt eine Neubestimmung. Die Parameter für die Störgrößen in Gleichung (6.8) basieren auf Erfahrungswerten. Für die Simulation der Strömung im Phénix-Reaktor wurden für die Störgröße für Schnittstellen, bei denen ATHLET der Druck von OpenFOAM vorgegeben wird, der 10^{-4} -fache aktuelle Druckwert und für Massenströme der 10^{-1} -fache aktuelle Massenstrom verwendet.

Wurde die Jacobimatrix numerisch bestimmt, so können die neuen Eingabewerte für ATHLET an den Kopplungsschnittstellen mit Hilfe von Gleichung (6.9) bestimmt werden.

$$\alpha^n = \alpha^{n-1} - wJ^{-1}R^n \quad (6.9)$$

Es wurde zusätzlich ein Unterrelaxationsfaktor w eingefügt, um die Stabilität der Methode zu erhöhen.

Die Anwendung dieser Methode bei verschiedenen Verifizierungstests hat gezeigt, dass keine stabile Lösung gefunden werden kann, wenn die Inverse der Jacobimatrix positive Diagonalelemente besitzen. Entsprechend wird nach der numerischen Bestimmung überprüft, ob dies der Fall ist. Falls ja, wird die neu berechnete Jacobimatrix verworfen und die bis dahin verwendete weiterbenutzt. Im nächsten Zeitschritt wird gegebenenfalls ein weiterer Versuch unternommen, sie neu zu bestimmen.

Die quasi-Newton Methode wurde zuvor /IGL 17/ für einfache Beispiele mit zwei und drei Kopplungsschnittstellen verifiziert. Im Rahmen dieses Projekts wurde sie erstmals für die Kopplung einer deutlich höheren Zahl von Kopplungsschnittstellen verwendet.

6.4.2.3 Simulationsmodelle des Phénix Reaktors für ATHLET und Open-FOAM

Der GRS wurden von Xi Wang vom KIT sowohl ein ATHLET Eingabedatensatz wie auch Rechengitter für das heiße und das kalte Plenum des Phénix-Reaktors zur Verfügung gestellt [WAN 19]. Diese modellieren den Primär- und in vereinfachter Form den Sekundärkühlkreislauf des Reaktors.

Der Primärkreis von Phénix bestand aus einem Reaktorbehälter, in dem sich ein Becken mit dem Kühlmittel Natrium befindet und dessen obersten Bereich mit dem Inertgas Argon gefüllt war.

Das Natrium zirkulierte im Primärkreislauf, angetrieben durch Pumpen durch den Kern des Reaktors und floss dann in den heißen Pool. Von dort wurde es durch Wärmetauscher (intermediate heat exchangers, IHX) geleitet und dabei abgekühlt. Phénix besaß sechs IHX, wovon im hier betrachteten Fall aber nur vier in Betrieb waren. Durch die IHX strömte das Natrium in das kalte Plenum. Von dort wurde es von drei Pumpen angesaugt und über das „Diagrid“ wieder in den Kern geleitet. Sowohl der obere Bereich des heißen wie des kalten Plenums waren mit Argon gefüllt, um Dichte- und damit Volumenschwankungen des Natriums auszugleichen. Alle Argonvolumina waren miteinander verbunden und damit auf dem gleichen Druckniveau.

An der Außenseite des heißen und kalten Pools befand sich ein Behälterkühlssystem („vessel cooling system“), das von Natrium aus dem Diagrid gespeist wurde und dessen Auslass sich im kalten Plenum befand. Es enthielt ebenfalls ein Argonpolster.

Das ATHLET-Modell des Primärkreises ist in Abb. 6.37 dargestellt, wobei jeweils nur ein IHX und eine Pumpe abgebildet ist und in der Abbildung das Behälterkühlssystem nicht dargestellt ist. Die einzelnen Thermofluidobjekte sind dabei eindimensional modelliert worden. Entsprechend konnten keine Auftriebseffekte innerhalb der Pools modelliert werden,

Die blau hinterlegten Bereiche in Abb. 6.37 wurde in der gekoppelten Simulation von OpenFOAM simuliert.

Vor der Abschaltung von Phénix wurden verschiedene Tests durchgeführt, unter anderem der Übergang zum Naturumlauf. Zur Verifizierung der Kopplung wurde der Zustand des Reaktors vor Einsetzen des Naturumlaufs simuliert: Die Reaktorleistung war 120 MW, die Drehzahl der Pumpen 350 Umdrehungen pro Minute, der sekundärseitige Durchsatz der vier aktiven IHX 190 kg/s und die Einlasstemperatur des Natriums auf der Sekundärseite 308 °C.

Für die Simulation wurde die jeweils aktuelle Entwicklungsversion von AHTLET verwendet, die in die Release 2019 des GRS-Simulationspakets AC² einging.

Im ATHLET Modell repräsentierten sechs verschiedene Kernkanäle den Reaktorkern. Diese Kernkanäle entsprachen den Brennelementen („sub assemblies“) im inneren Kern, im äußeren Kern, in der „Blanketzone“ und dem Lagerbereich von Brennelementen im Sicherheitsbehälter („containment fuel storage“), den Steuer- und Abschaltstäben und der „Stahlzone“ („steel zone“). Das heiße Plenum wurde durch verschiedene eindimensionale Thermofluidelemente modelliert.

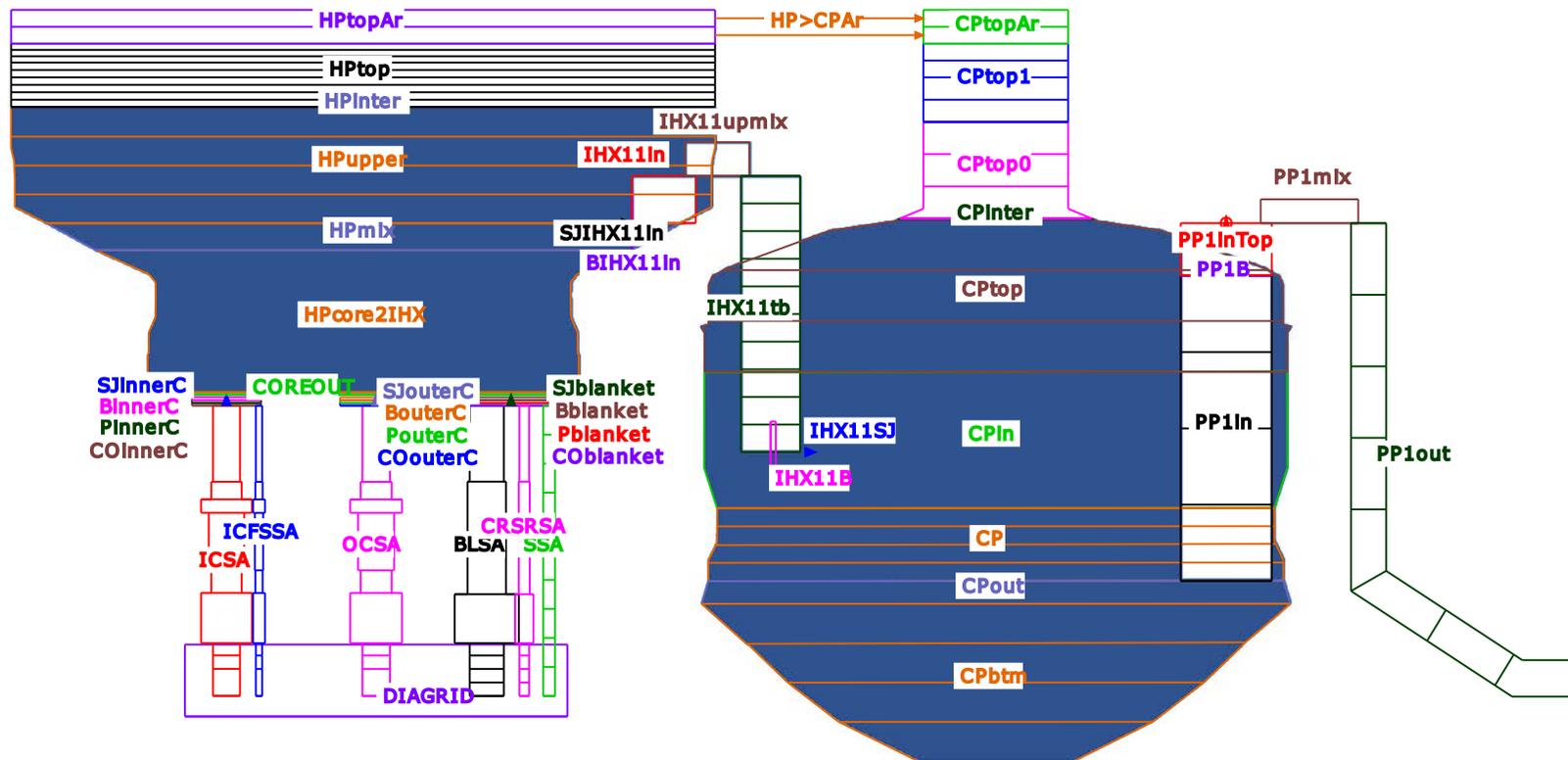


Abb. 6.37 ATHLET-Modell des Phénix-Reaktors, basierend auf dem Modell aus /WAN 19/, mit Kopplungsschnittstellen zum OpenFOAM Modell /HER 19a/

Argon wurde in ATHLET als nicht kondensierbares Gas simuliert, wobei ein Gemischspiegel für den Übergang von Natrium zu Argon von ATHLET bestimmt wurde.

Der Wärmeübergang zwischen Primär- und Sekundärkühlkreis in den IHX wurde mit Wärmeleitobjekten in ATHLET simuliert. Der Sekundärkühlkreislauf wurde vereinfacht, indem durch Fill-Elemente der Massenstrom und die Einlasstemperaturen an den IHX auf Basis der Messdaten des Versuchs fest vorgegeben wurde. Der Tertiärkühlkreislauf (mit Wasser als Kühlmittel) wurde nicht modelliert.

Das kalte Plenum des Primärkühlkreises wurde auf die gleiche Weise modelliert.

Drei Pumpen trieben die Strömung im Primärkreis an, die im ATHLET-Modell mit einer fest vorgegebenen Drehzahl simuliert wurden. Dabei wurde das Anlaufen der Pumpen von 0 auf 350 Umdrehungen pro Minute innerhalb von 0,2 s. angenommen.

Für die gekoppelte Simulation wurde das ATHLET-Modell so modifiziert, dass es 17 Kopplungsschnittstellen enthielt (s. Abb. 6.37 und Abb. 6.38).

Drei konzentrische Ringe simulierten den Kernausslass, in die die sechs Kernkanäle entsprechend Abb. 6.37 einspeisen. Jeweils eine Schnittstelle befand sich am oberen Ende des heißen und des kalten Plenums. Die vertikale Position war dabei so gewählt, dass sich die Kopplungsschnittstellen immer unterhalb des Gemischspiegels des Natrium-/Argongemisches befand. Die Strömung im gesamten OpenFOAM Rechengebiet konnte deshalb als einphasig (flüssig) simuliert werden. An den Ein- und Auslässen der IHX befanden sich jeweils vier Kopplungsschnittstellen, zusammen also acht. Im kalten Plenum befanden sich außerdem drei Kopplungsschnittstellen an den Einlässen der Pumpen und eine Kopplungsschnittstelle am Auslass des Behälterkühlsystems zum unteren Plenum hin.

Insgesamt enthielt die gekoppelte Simulation somit 17 Kopplungsschnittstellen.

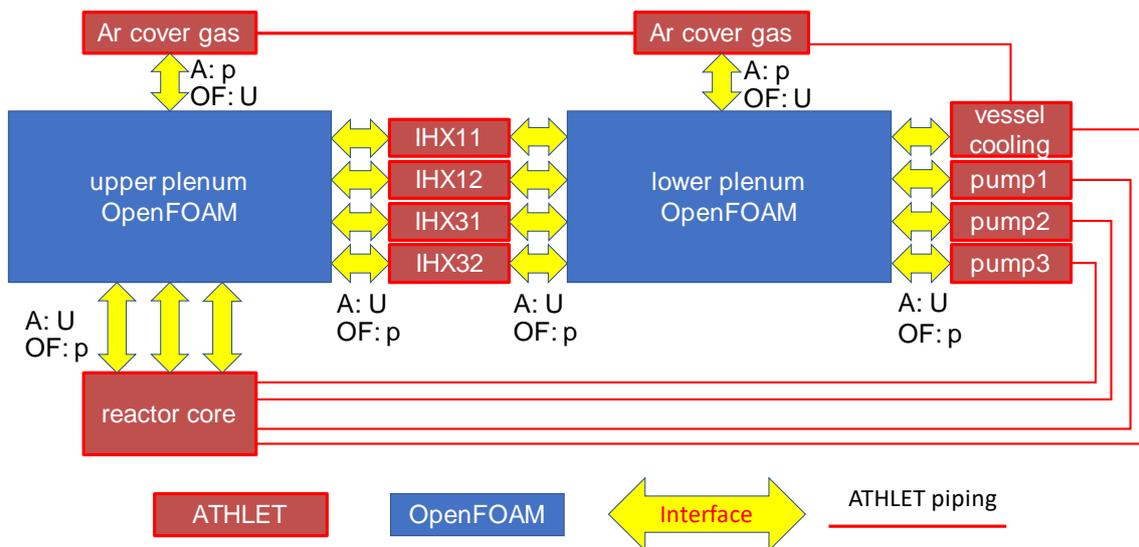


Abb. 6.38 Kopplungsschnittstellen zwischen den ATHLET- und OpenFOAM Modellen des Primärkühlkreislaufes /HER 19a/

Die Basis des CFD-Teils der gekoppelten Simulation waren Rechengitter des heißen und kalten Plenums, die der GRS ebenfalls von Xi Wang vom KIT zur Verfügung gestellt wurden /WAN 19/. Die Anzahl der Gitterelemente der beiden Rechengitter sind in Tab. 6.6 und Tab. 6.7 aufgeführt.

Tab. 6.6 Parameter des CFD-Rechengitters des heißen Plenums

Gitterelementtyp	Anzahl
Hexaeder	1.400.396
Prismen	30.924
Tetraederkeile	268
Tetraeder	4
Polyeder	21.559

Tab. 6.7 Parameter des CFD-Rechengitters des kalten Plenums

Gitterelementtyp	Anzahl
Hexaeder	2.377.328
Prismen	90.606
Tetraederkeile	945
Tetraeder	2
Polyeder	96.734

Die beiden Rechengitter wurden zu einer OpenFOAM Simulation zusammengeführt, obwohl sie keine gemeinsamen Schnittstellen besaßen. Die Kopplung der Strömung zwischen den beiden Fluidzonen erfolgte in der gekoppelten Rechnung stattdessen über entsprechende Kopplungsschnittstellen, die mit den ATHLET-Rechengebieten verbunden wurden. Über diese konnte dann der Transport des flüssigen Natriums zwischen den beiden CFD-Rechengittern erfolgen.

Im CFD-Teil der gekoppelten Simulation wurde des SST-Turbulenzmodell und zur Simulation von Wandeffekten wurde Wandfunktionen verwendet. Ein Wärmetransport über die Wände wurde durch die Nutzung von adiabate Temperaturrandbedingungen (zeroGradient) nicht berücksichtigt.

In Abb. 6.38 ist für die Kopplungsschnittstellen aufgeführt, welches Programm den Druck bzw. die Geschwindigkeiten/Massenströme vorgab: ATHLET bestimmte den Druck für die Schnittstellen am oberen Ende des heißen und kalten Plenums. Dort berechnete OpenFOAM die Geschwindigkeiten. Für die restlichen Kopplungsrandbedingungen wurde die Randbedingungen umgekehrt ermittelt: ATHLET gab die Geschwindigkeiten vor, OpenFOAM den jeweiligen Druck.

Die Temperaturen an den Kopplungsschnittstellen bestimmte effektiv das Programm das stromaufwärts lag.

Die Turbulenzrandbedingungen an den Kopplungsschnittstellen wurde durch inletOutlet Randbedingungen fest vorgegeben, falls die Strömung in das OpenFOAM Rechengebiet hineinströmte. Für die umgekehrte Strömungsrichtung wurden die internen Werte von OpenFOAM verwendet (zeroGradient).

Für den CFD-Teil der Simulation waren weitere Maßnahmen notwendig, um eine numerisch stabile Simulation zu erhalten. Dies betraf insbesondere die flächenmäßig großen Kopplungsschnittstellen an den oberen Enden der beiden Plenen, durch die aber nur ein kleiner Massenstrom und entsprechend sehr kleine Geschwindigkeiten zu erwarten war.

Zum einen wurde eine gekoppelte Version der OpenFOAM Randbedingung `pressureInletUniformVelocity` implementiert. Diese erzwingt für einen vorgegebenen Druck, der in der gekoppelten Version von ATHLET bestimmt wird, eine einheitliche Geschwindigkeit auf der gesamten Randbedingungsfläche.

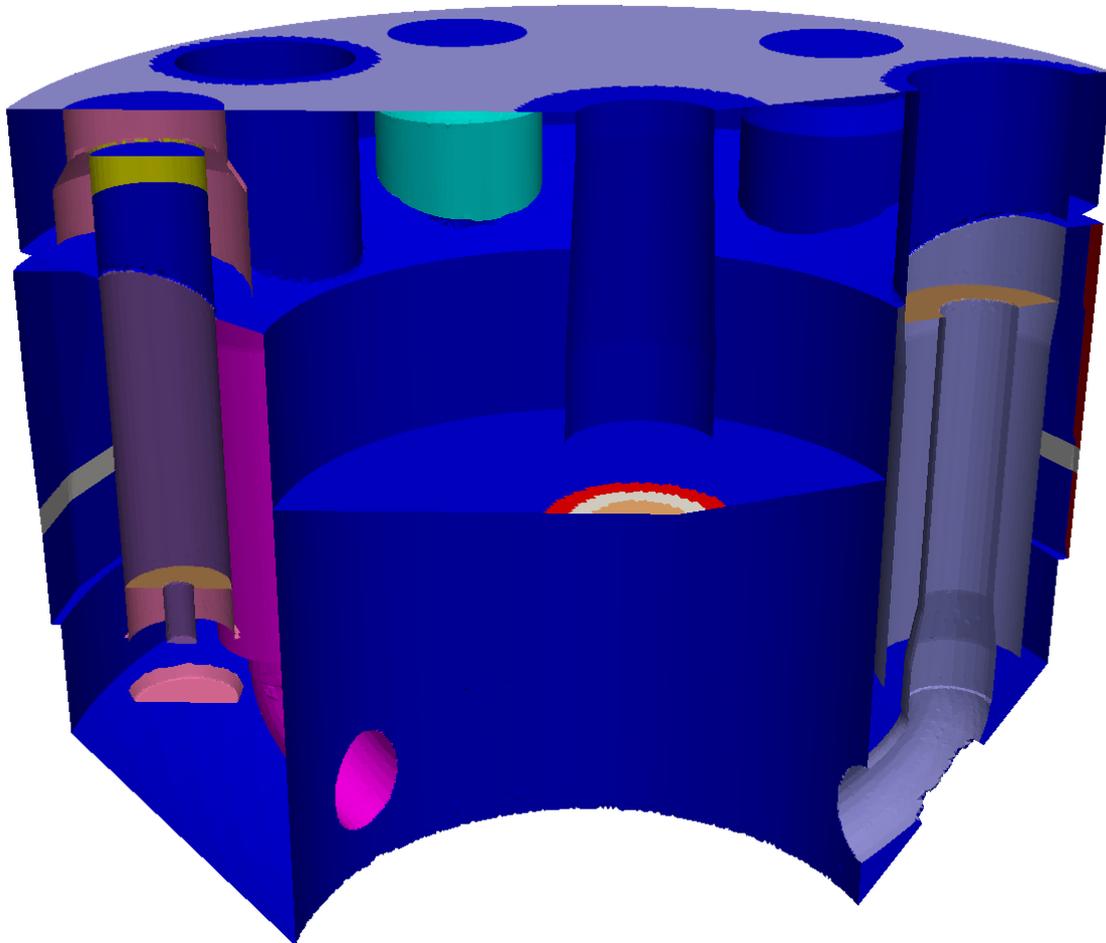


Abb. 6.39 Fluidzonen von OpenFOAM im heißen und kalten Plenum /WAN 19/

Als weiterer Grund für numerische Instabilitäten wurden Gitterzellen geringer Qualität an den Kanten zwischen der oberen Fläche des heißen bzw. kalten Plenums und anderen Flächen, z. B. der Kerneinbauten, identifiziert. Dies entsprach den Problemen, die in Abschnitt 6.4.1 beschrieben wurden. Da auf diesen beiden Schnittstellenflächen nur sehr geringe Strömungsgeschwindigkeiten erwartet wurden und diese somit das Strömungsbild innerhalb des jeweiligen Plenums nur sehr gering beeinflussen sollten, wurden zusätzliche Wände in diesen Bereichen mit Hilfe der Tools `topoSet` und `createPatch` eingefügt. Die entsprechenden Wände sind in Abb. 6.40 grau dargestellt.

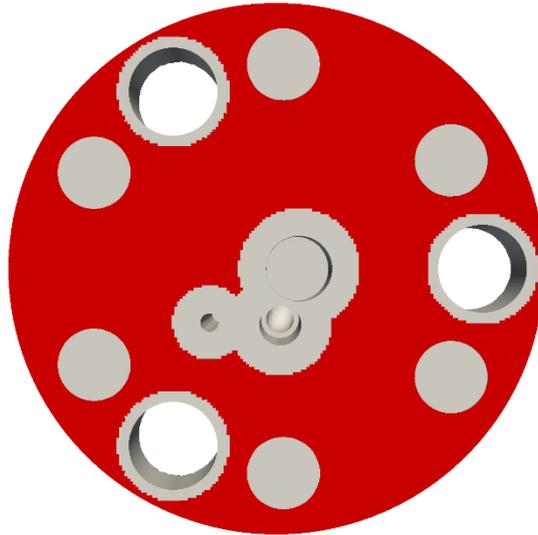


Abb. 6.40 Zusätzliche Wände auf der Oberseite des heißen Plenums

Als weitere Maßnahme zur Vermeidung von unphysikalischen lokalen Geschwindigkeitsspitzen wurden im Bereich der obersten drei Zellenebenen im heißen und kalten Plenum jeweils ein nicht-isotropes poröses Medium mithilfe der Darcy-Formulierung simuliert. Dies führte zu einem richtungsabhängigen Druckverlust proportional zur Geschwindigkeit, wobei nur die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu den Oberflächen berücksichtigt wurde. Die beiden Schichten sind in Abb. 6.41 dargestellt.

Die Feldgleichung in OpenFOAM wurden mit einem Diskretisierungsverfahren erster Ordnung gelöst. Die Simulation wurde zunächst mit der damals aktuellen Version 5.x von OpenFOAM durchgeführt und später mit OpenFOAM 6 wiederholt.

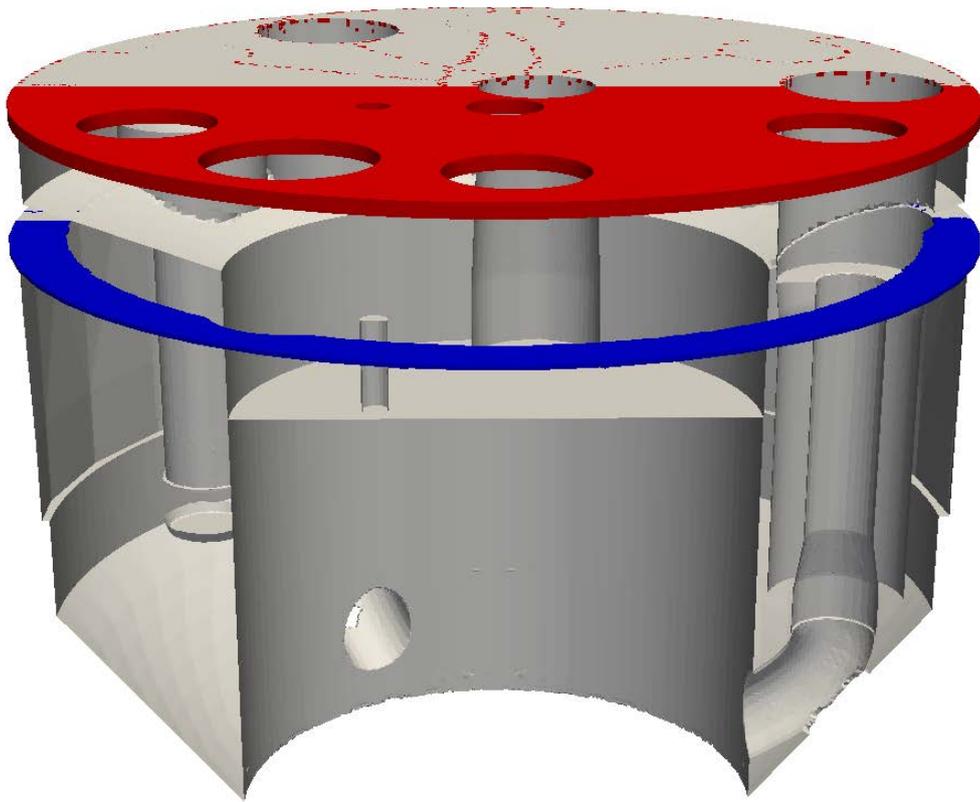


Abb. 6.41 Schichten, die als poröses Medium simuliert wurden im heißen (rot) und kalten (blau) Plenum

6.4.2.4 Ergebnisse der gekoppelten Simulation

Durch die Simulation der beiden Plena mit Hilfe von OpenFOAM wurden dreidimensionale Effekte berücksichtigt, die zu einer Veränderung der Ergebnisse, verglichen mit einer ATHLET-Stand-Alone-Simulation, führten.

In Abb. 6.42 ist die Temperaturverteilung im heißen und kalten Plenum für zwei Zeiten nach dem Start der Pumpen dargestellt (130 s oben und 1.000 s unten). Deutlich zu erkennen ist, wie die heiße Strömung zunächst sowohl wegen der Einspeiserichtung aus dem Kern wie auch aufgrund der geringeren Dichte in den oberen Teil des heißen Plenums strömte. Von dort kehrte sich dann die Strömungsrichtung um (nach unten) und die heiße Strömung trat seitlich in die Umhüllung der IHX ein, strömte wieder nach oben und dann in die Einlässe der IHX. Im unteren Plenum trat das in den IHX abgekühlte flüssige Natrium unten an den IHX aus, strömte zunächst auch wieder nach oben und dann wieder die Strömungsrichtung zu ändern und von unten durch die Umhüllung der Pumpen nach oben zu den Einlässen der Pumpen zu strömen.

Im Gegensatz dazu war aufgrund der eindimensionalen Modellierung im ATHLET Modell der Plenen keine dichtegetriebene Strömung, die zunächst nach oben und dann wieder nach unten erfolgen müsste, möglich. Stattdessen floss das flüssige Natrium in der ATHLET-Stand-Alone-Simulation direkt vom Kernausslass in die Einlässe der IHX und von den Auslässen der IHX direkt zu den Einlässen der Pumpen. Die Bereiche der Plenen, die jeweils ober bzw. unterhalb dieser Ein- und Auslässe lagen, wurden gar nicht durchströmt. Dieser Unterschied kann z. B. auch gut in Abb. 6.43 beobachtet werden. In der ATHLET-Stand-Alone-Simulation war keine Aufheizung im Bereich des oberen heißen Plenums zu beobachten, während diese für die gekoppelte Simulation deutlich sichtbar wurde.

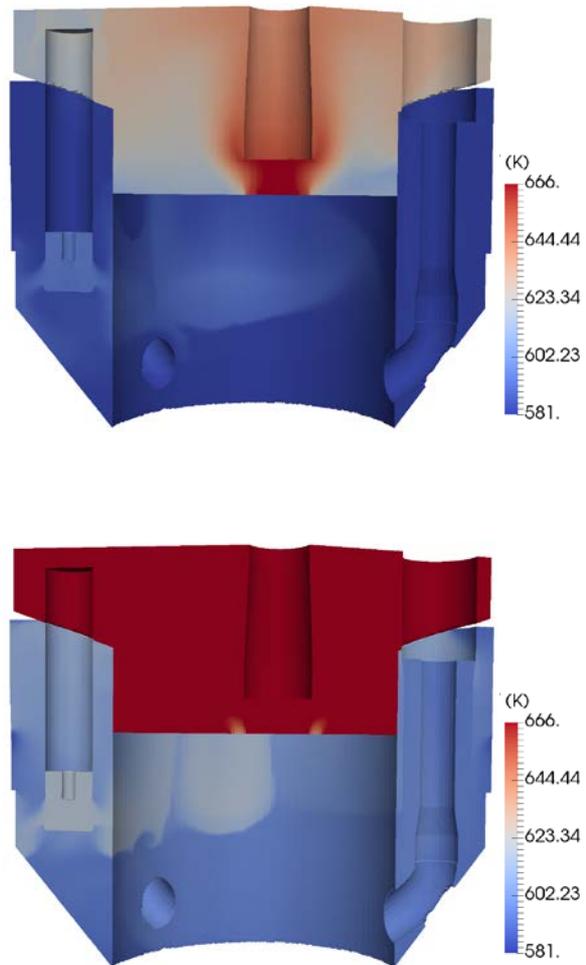


Abb. 6.42 Temperatur im heißen und kalten Plenum in der transienten Simulation für die Zeiten 130 s (oben) und 1.000 s (unten) /HER 16/

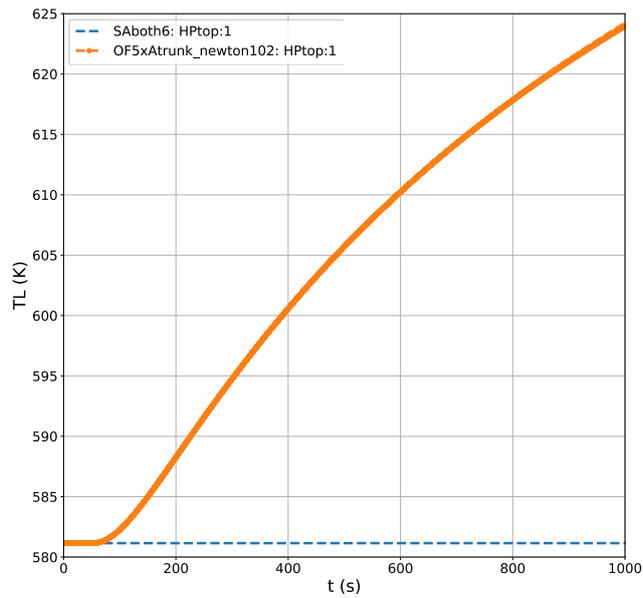


Abb. 6.43 Temperaturverlauf im oberen Bereich des heißen Plenums für die ATHLET-Stand-Alone-Simulation (blau gestrichelt) und die gekoppelte Rechnung (orange durchgezogen) /HER 19a/

In Abb. 6.44 ist der zeitliche Verlauf des maximalen Residuums aller Kopplungsschnittstellen und die Anzahl der äußeren Schleifendurchläufen pro Zeitschritt von OpenFOAM dargestellt.

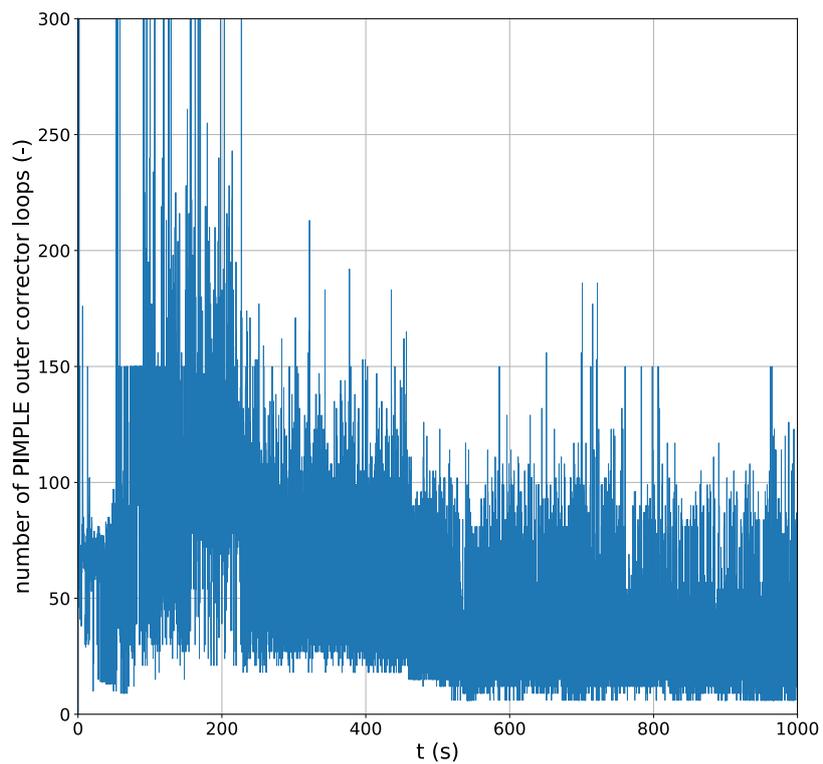
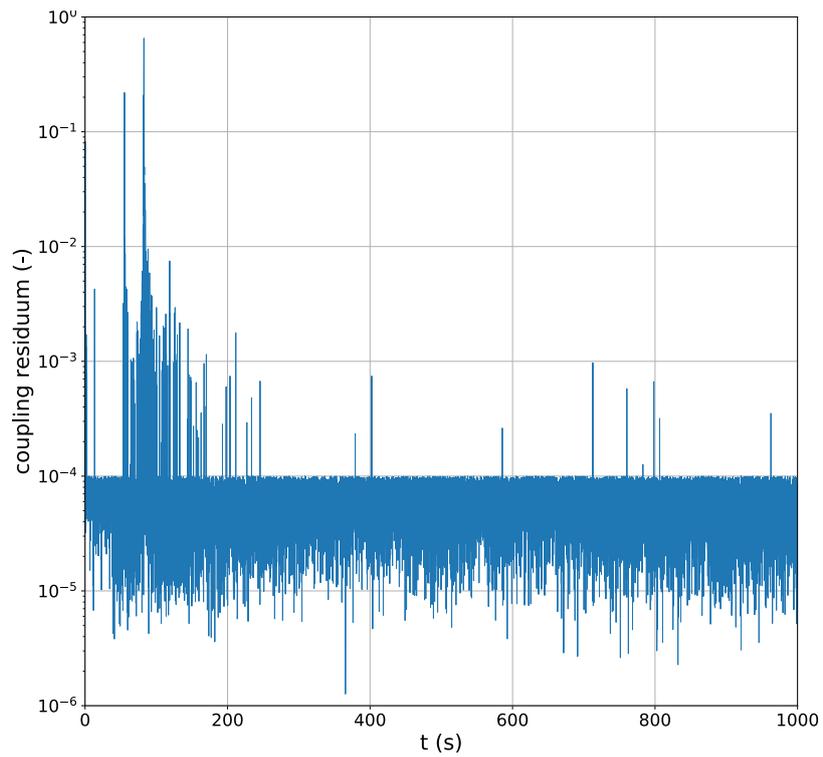


Abb. 6.44 Zeitlicher Verlauf des maximalen Residuums aller Kopplungsschnittstellen und Anzahl der äußeren Schleifendurchläufen pro Zeitschritt von Open-FOAM /HER 19a/

Ein Vergleich der Massenströme, die den Kern an den drei konzentrischen Ringen verließen mit den Werten, die als Eingangsrandbedingungen an den entsprechenden Kopplungsrandbedingungen in OpenFOAM verwendet wurden, zeigte einen relativen Fehler von kleiner 10^{-5} . Die Werte an den anderen Kopplungsstellen lieferten Ergebnisse in der gleichen Größenordnung.

Insgesamt lief die gekoppelte Simulation unter Verwendung des quasi-Newton-Verfahrens numerisch stabil.

6.4.3 Implementierung eines Turbulenzmodells für Strömungen mit niedrigen molekularen Prandtl-Zahlen

Im Rahmen des EU-Projekts THINS wurden verschiedene Turbulenzmodelle entwickelt, die das Verhalten von Fluiden mit kleiner molekularer Prandtl-Zahl in Wandnähe besser wiedergeben soll als Zweigleichungsturbulenzmodelle wie z. B. das k - ε -Turbulenzmodell bzw. SST-Modell /PAP 15/.

Die Prandtl-Zahl Pr ist nach Gleichung (6.10) definiert als das Verhältnis von Viskosität ν zu Temperaturleitfähigkeit a .

$$Pr = \frac{\nu}{a} \quad (6.10)$$

Für kleine Prandtl-Zahlen ist die Temperaturleitfähigkeit deutlich größer als die Viskosität. Dies führt dazu, dass die Grenzschicht der Temperatur, d. h. der Übergangsbereich zwischen Wandtemperatur und Zentraltemperatur des Fluids, deutlich größer ist als die viskose Grenzschicht für das Geschwindigkeitsfeld.

Im Rahmen des THINS-Projekts wurde ein „algebraisches Wärmetransport Modell“ („algebraic heat flux model“, AHFM) untersucht, das den turbulenten Wärmestrom im Fluid $\overline{u_i t}$ durch eine algebraische Gleichung implizit berechnet /SHA 19a/, /SHA 19b/, /PAP 15/. Dazu wird in die Gleichung zur Bestimmung des Temperaturfelds (6.11) der Beitrag der Turbulenz zum Wärmetransport durch einen zusätzlichen Quellterm modelliert.

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + U_k \frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - (\rho c_p \overline{u_i t}) \right] \quad (6.11)$$

Wird der turbulente Wärmetransport gemäß der Reynolds-Analogie bestimmt, so kann der Term $\overline{u_i t}$ wie in Gleichung (6.12) geschrieben werden und damit direkt aus der mit dem Turbulenzmodell bestimmten turbulenten Viskosität und der turbulenten Prandtl-Zahl bestimmt werden. In allen folgenden Gleichungen wird nach Einsteinnotation summiert.

$$\overline{u_i t} = - \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (6.12)$$

Im AHFM wird hingegen die algebraische Gleichung (6.12) gelöst, um aus Größen des Turbulenzmodells ($k, \varepsilon, \overline{u_i u_j}$), der Gravitationsbeschleunigung g_i , dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten β und den turbulenten Schwankungen der Temperatur $\overline{t^2}$, die mit einer eigenen Feldgleichung (6.13) modelliert werden, den turbulenten Wärmestrom zu bestimmen.

$$\overline{u_i t} = -C_{t_0} \frac{k}{\varepsilon} \left(C_{t_1} \overline{u_i u_j} \frac{\partial T}{\partial x_j} + C_{t_2} \overline{u_i t} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + C_{t_3} \beta g_i \overline{t^2} \right) + C_{t_4} a_{ij} \overline{u_j t} \quad (6.13)$$

Dabei ist $a_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij}$ der Reynoldsspannungsanisotropietensor.

$$\frac{\partial(\rho \overline{t^2})}{\partial t} + U_k \frac{\partial(\rho \overline{t^2})}{\partial x_k} = 2P_t - 2\rho \varepsilon_t + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_{\overline{t^2}}} \right) \frac{\partial \overline{t^2}}{\partial x_i} \right] \quad (6.14)$$

In Gleichung (6.14) wird dann $P_t = -\rho \overline{u_i t} \frac{\partial T}{\partial x_i}$ und $\varepsilon_t = \overline{t^2} \frac{\varepsilon}{k}$ verwendet /DES 19/.

Insgesamt müssen also für das modifizierte Turbulenzmodell die Feldgleichung für k , ε und $\overline{t^2}$ und die algebraische Gleichung für $\overline{u_i t}$ gelöst werden.

Die freien Parameter in Gleichung (Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.17) wurden analog zum AHFM-2005 Modell /SHA 19a/ mit den Werten in Tab. 6.8 belegt.

Tab. 6.8 Modellkonstanten den AHFM-2005 Modells /SHA 19a/

C_{t_0}	C_{t_1}	C_{t_2}	C_{t_3}	C_{t_4}
0.15	0.6	0.6	0.6	1.5

Die Gleichungen für k und ε entsprechen dabei einer low-Reynolds-Variante des k - ε -Modells. Dieses ist in OpenFOAM nach /LIE 96/, /APS 07/ implementiert, wobei es um Quellterme für den Einfluss des Auftriebs auf die Turbulenz erweitert wurde. Deshalb wurde das AHFM-2005 Modell in OpenFOAM basierend auf dem LienCubicKE-Modell implementiert.

Das neu implementierte Turbulenzmodell wurde anhand des in /SHA 14/ veröffentlichten Beispiels einer Rayleigh-Bènard-Konvektion getestet. Dazu wurde ein Kanal mit einer heißen unteren und einer kälteren oberen Platte zweidimensional modelliert und unter Verwendung des neuimplementierten Turbulenzmodells simuliert.

Während der Simulation kam es regelmäßig zu Abbrüchen, da unphysikalische Temperaturen auftraten. Da für die Untersuchung nur der stationäre Endzustand betrachtet werden sollte, wurde eine Begrenzung der Feldgröße für den turbulenten Transport $\overline{u_i t}$ der Temperatur in das Modell eingefügt. Diese Begrenzung reduzierte am Anfang der Simulation den turbulenten Wärmetransport und führte dazu, dass ein stationärer Zustand erreicht wurde, wobei für diesen die Begrenzung nicht mehr notwendig war.

In Abb. 6.45 ist die zweidimensionale Temperaturverteilung für die beiden untersuchten Fälle mit Prandtl-Zahlen von 0,7 (oben) und 0,025 (unten) dargestellt. Es sind die für eine Rayleigh-Bènard-Konvektion typischen Zellen von auf- und absteigendem Fluid sichtbar.

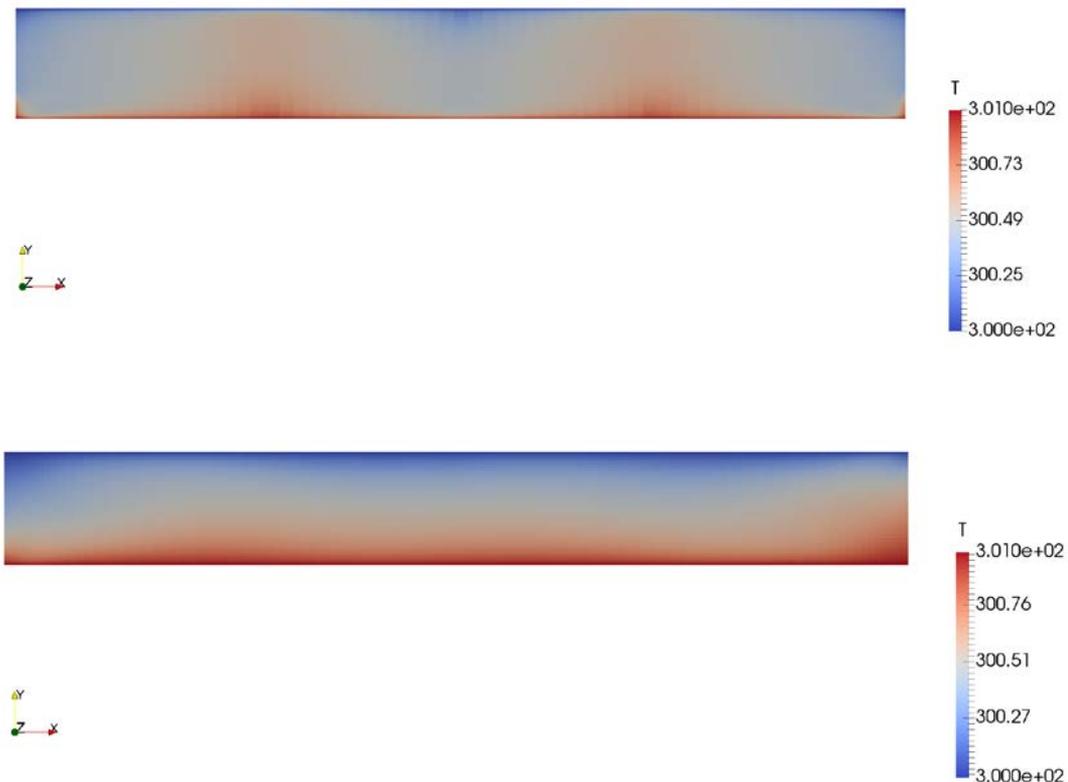


Abb. 6.45 Temperatur im Rechengebiet für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten)

Im Folgenden werden die Ergebnisse der OpenFOAM-Implementierung mit denen in /SHA 13/ veröffentlichten verglichen, wobei dort eine Implementierung im CFD-Programm STAR-CCM+ verwendet wurde.

Ein quantitativer Vergleich ist allerdings nur bedingt möglich, da nicht alle Informationen über die Simulationen in /SHA 13/ verfügbar waren, wie z. B. die genauen Randbedingungen an den Seiten des Kanals oder die Art der Mittelung.

In Abb. 6.46 wurden der über eine Ebene in unterschiedlichen Höhen gemittelte Temperaturverlauf für die beiden Prandtl-Zahlen mit /SHA 13/ verglichen. Für $Pr = 0,7$ wurde der Temperaturverlauf durch die OpenFOAM Implementierung (gepunktet) im Vergleich zu /SHA 13/ nicht genau getroffen, während für $Pr = 0,025$ eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt werden konnte.

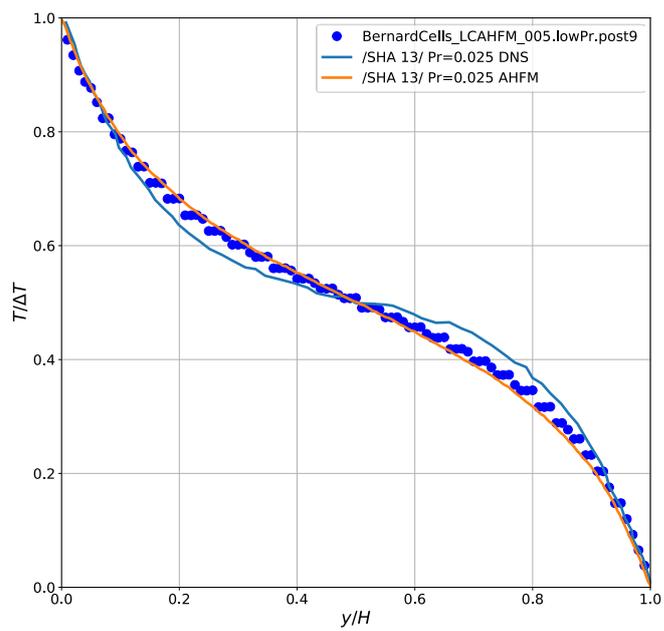
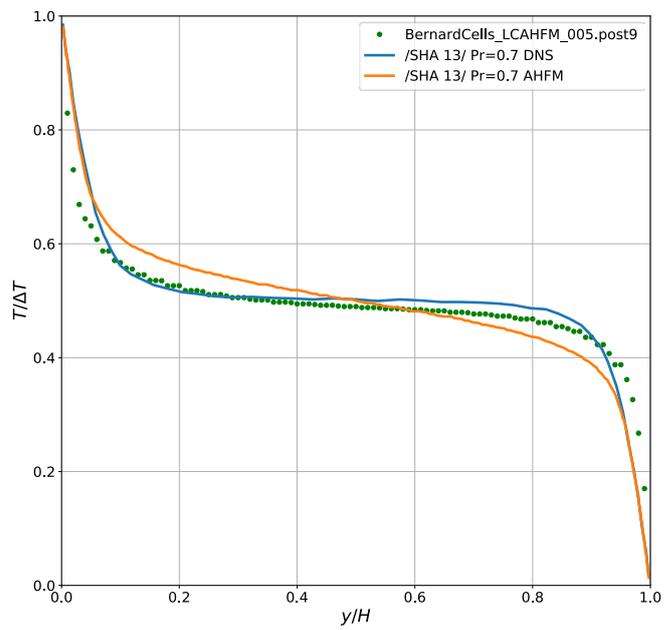


Abb. 6.46 Verlauf der Temperatur über die Höhe des Rechengebiets für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten)

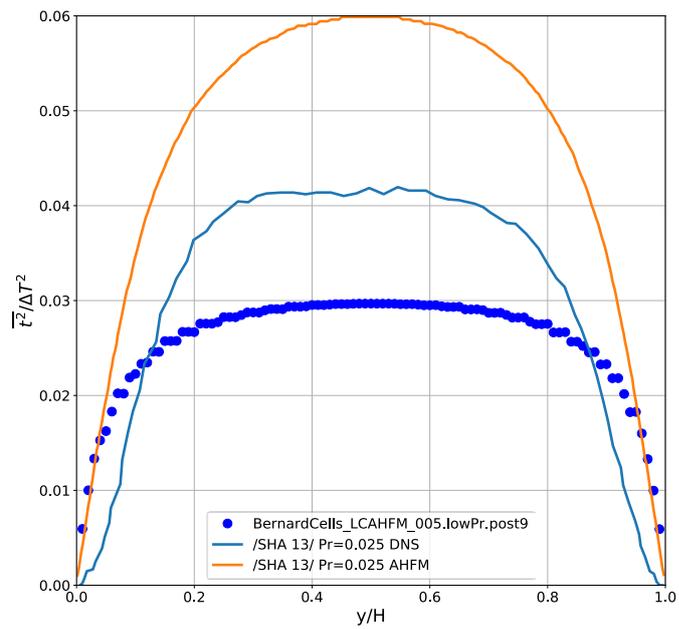
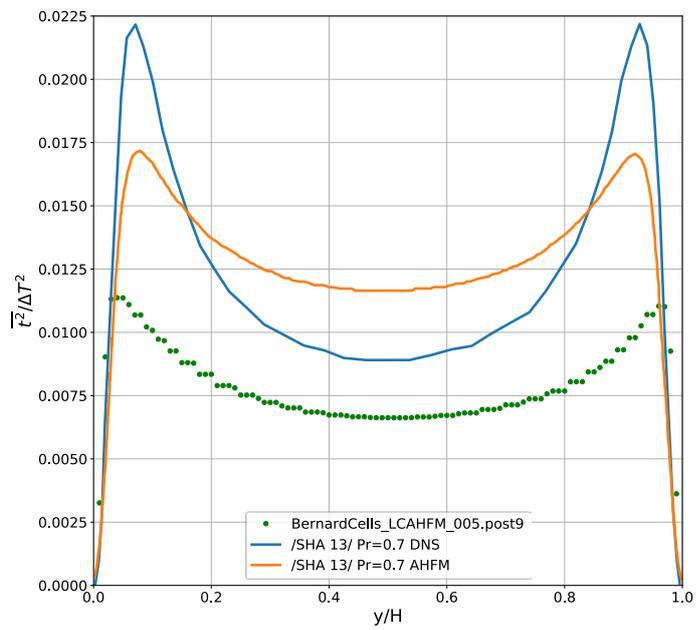


Abb. 6.47 Verlauf der turbulenten Temperaturschwankungen (Varianz) $\overline{t^2}$ über die Höhe des Rechengebiets für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten)

Beim Vergleich der über die Ebenen gemittelten Temperaturfluktuationen $\overline{t^2}$ konnte die Implementierung von OpenFOAM zwar den qualitativen Verlauf reproduzieren (s. Abb. 6.47). Allerdings waren die Ergebnisse verglichen mit /SHA 13/ nur ungefähr halb so groß.

Da es sich beim AHFM Turbulenzmodell um ein low-Reynolds-Turbulenzmodell handelt, ist es notwendig, die Wandgrenzschicht bis in den Bereich des linearen Anstiegs der Geschwindigkeiten zu modellieren ($y^+ < 1$). Dies erschwert die Anwendbarkeit des Modells, da es für reale Reaktorgeometrien sehr feine Rechennetze und damit einen sehr großen Rechenaufwand erforderlich macht.

In /PAP 15/ konnte gezeigt werden, dass für die dort untersuchten Strömungen in der TALL-Versuchsanlage auch mit Standardturbulenzmodellen (SST) in ANSYS CFX die Messungen gut reproduziert werden konnten.

7 AP 5: Beteiligung an EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA

7.1 AP 5.1: ESNII+ (bis 31.08.2017)

Im Arbeitspaket 5 (WP 5) des EU-Projekts ESNII+ ist die Planung und Durchführung eines zweitägigen *European Workshop on Safety Assessment of Fast Neutron Reactors* (Workshop W7 im Rahmen von WP5) vorgesehen. Basierend auf einem Projekttreffen dieses Arbeitspaketes Ende November 2016 in Petten wurden folgende Arbeiten durchgeführt bzw. Entscheidungen getroffen:

- Entscheidung, den Workshop in den Räumlichkeiten der GRS Garching auszurichten.
- Auswahl und Einladung von vier externen Fachleuten (IAEA, ININ Mexiko, NNL/U Liverpool, IAEA, JRC/IE).
- Steigerung des Budgets für die vier eingeladenen Fachleute von 2.800 auf 4.800 Euro über den ESNII+-Projektkoordinator.
- Auswahl und abgestimmte Festlegung eines Termins. Der zweitägige Workshop soll auf drei Tage (davon zwei halbe Tage) verteilt werden.
- Ausarbeitung und Abstimmung des Programms (Agenda) mit den Vortragenden.
- Erstellung eines "Announcement"-Informationsblattes für den Workshop sowie eines Anmeldeformulars.
- Bekanntmachung des Workshops über das ESNII-Portal der SNETP-Website (www.snetp.eu/esnii) und Bereitstellung von Announcement, Agenda und Anmeldeformular.
- Bekanntmachung des Workshops durch Anschreiben der ESNII+-Projektpartner.
- Unterstützung bei der Durchführung der Reise- und Unterkunftsplanung für die vier eingeladenen Fachleute.
- Organisation eines Dinner-Buffets in der GRS Garching für den Abend des ersten Workshoptages.

Der „European workshop on Safety Assessment of Fast Neutron Reactors“ fand vom 10. bis 12. Juli 2017 in den Räumlichkeiten der GRS in Garching statt /ESN 17/. Die übergeordneten Themen waren:

- Concepts and Safety Features of Fast Spectrum Reactors – the ESNII+ scope
- Nuclear Safety and Licensing & Regulatory Aspects
- Experimental Facilities and Benchmarks in Support of Safety Studies
- Computational Safety Assessment Methods and Codes –State of the art, current R&D trends and challenges
- EU projects: Current Status and Near Future

Für die fachlichen Beiträge des Workshops konnten ausgewiesene Fachleute aus Europa und Übersee gewonnen werden.

European Workshop on

Safety Assessment of Fast Neutron Reactors

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
D-85748 Garching, Germany
July 10-12, 2017



Abb. 7.1 Ankündigung des *European workshop on Safety Assessment of Fast Neutron Reactors*

Tab. 7.1 ESNII+ – Seminar W7 *Safety Assessment of Fast Reactors* – Tagesordnung des ersten Tages

	13:00	Introduction of GRS & organizational information	GRS
	13:15	ESNII+ WP5 Opening/Introductory remarks	A. Vasile (CEA)
Concepts and Safety Features of Fast Spectrum Reactors – the ESNII+ scope			
1	13:30	Sodium-cooled systems including ASTRID	A. Vasile (CEA)
2	13:50	Lead-cooled systems including ALFRED	G. Grasso (ENEA)
3	14:10	Gas-cooled fast systems including ALLEGRO	P. Vácha (ÚJV)
4	14:30	Lead-bismuth-cooled system MYRRHA	D. De Bruyn (SCK-CEN)
5	14:50	Transmutation perspectives and safety related aspects	B. Merk (NNL)
	15:20	Break	
Nuclear Safety and Licensing & Regulatory Aspects			
6	15:50	Risk & Safety Working Group on GenIV Systems (GIF): organization, status and outputs	G. Fiorini
7	16:20	IAEA Activities on Fast Reactors: Safety, Coordinated Research Projects, and Benchmarks	V. Kriventsev (IAEA)
8	16:50	Considerations on safety claims for licensing GenIV reactors	M. Nitoi (INR)
	17:20	End of the first day	
	18:00	Dinner at GRS	

Tab. 7.2 ESNII+ – Seminar *W7 Safety Assessment of Fast Reactors* – Tagesordnung des zweiten Tages

Nuclear Safety and Licensing & Regulatory Aspects			
9	9:00	Licensing aspects of MYRRHA	D. De Bruyn (SCK-CEN)
10	9:30	The SARGEN IV project	F. Puente-Espel (ININ)
Experimental Facilities and Benchmarks in Support of Safety Studies			
11	10:00	Activities within MAXSIMA and MYRTE	D. Castelliti (SCK-CEN)
12	10:30	Benchmarks in Support of Safety Studies	G. Rimpault (CEA)
	11:00	Break	
Computational Safety Assessment Methods and Codes - State of the art, current R&D trends, challenges -			
13	11:30	Thermal hydraulic methods & codes for sodium cooled fast neutron reactors	C. Geffray (CEA)
14	11:50	Thermal hydraulic methods & codes for lead cooled fast neutron reactors	G. Grasso (ENEA)
15	12:10	Neutronic methods & codes for fast neutron critical reactors	K. Mikityuk (PSI)
	12:30	Lunch break	
	14:00	Guided tours: - Research Neutron Source Heinz Maier-Leibnitz (FRM-II) - Experimental facilities at the Chair of Thermodynamics of TUM.	
16	16:30	Neutronic methods & codes for accelerator driven systems	A. Stankovskiy (SCK-CEN)
17	16:50	Thermal hydraulic methods & codes for gas cooled fast reactors	P. Vácha (ÚJV)
	17:10	End of the second day	

Tab. 7.3 ESNII+ – Seminar W7 *Safety Assessment of Fast Reactors* –
Tagesordnung des dritten Tages

Computational Safety Assessment Methods and Codes - State of the art, current R&D trends, challenges -			
18	9:00	Neutronic methods & codes for gas cooled fast reactors	P. Vácha (ÚJV)
19	9:30	Uncertainty and sensitivity assessment methods & codes	W. Zwermann (GRS)
	10:00	Break	
EU projects: Current Status and Near Future			
20	10:30	ESNII+ Core Safety ASTRID	K. Mikityuk (PSI)
21	10:50	ESNII+ Core Safety ALFRED	G. Grasso (ENEA)
22	11:10	ESNII+ Core Safety ALLEGRO	A. Keresztúri (MTA-EK)
23	11:30	MAXSIMA	D. Castelliti (SCK-CEN)
24	11:50	FP7 CHANDA WP10 & WP11: Support in nuclear data and high-energy models for safety studies for MYRRHA	A. Stankovskiy (SCK-CEN)
25	12:10	ESFR-SMART: Aims and scopes	K. Mikityuk (PSI)
	12:30	End of W7 seminar	

7.3 AP 5.2: MAXSIMA (bis 31.10.2016)

Im Rahmen der Teilnahme im Projekt EU-Projekt MAXSIMA (Methodology, Analysis and eXperiments for the Safety in MYRRHA Assessment) wurden die Arbeiten zur Generierung der variierten Eingabevektoren für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen der C-OV-2-Transiente durchgeführt. Anschließend wurden die Ergebnisse der C-OV-2-Transiente für die sicherheitsrelevanten Größen aller Benchmarkteilnehmer verglichen.

Vom 16.17.06.2016 wurde in CIEMAT (Madrid, Spanien) ein „FP7-MAXSIMA 7th Work Package 2 Technical Meeting“ durchgeführt. Ein Experte der GRS hat an dem Treffen teilgenommen.

Die Auswertung der Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen von C-OV-2-Transienten wurde anhand der Statistik-Software R durchgeführt. Insgesamt wurden 100 Ausgabedateien pro Teilnehmer und Benchmark statistisch analysiert.

Die Vergleiche der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen aller Teilnehmer des Tasks 2.2 der Phase 2 „Protected and Overcooling deterministic transients“ wurden auf dem Arbeitstreffen in Madrid berichtet.

8 AP 6: Mitwirkung am IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal

8.1 Das Fast Reactor Knowledge Organization System (FR-KOS) der IAEA

Die IAEA führt seit 2003 eine eigene Initiative zum Erhalt und Management des weltweiten Wissens auf dem Gebiet schneller Reaktorsysteme durch. Die Hauptziele der Initiative "Fast Reactor Knowledge Portal" (FRKP) bestehen darin,

- a) den fortlaufenden Informationsverlust im Zusammenhang mit schnellen Reaktoren zu unterbinden und
- b) vorhandene Daten und Informationen auf dem Gebiet schneller Reaktorsysteme zu sammeln, abzurufen, zu bewahren und zugänglich zu machen.

Das "Fast Reactor Knowledge Preservation"-Portal hilft beim Wissensaustausch, bei der Entwicklung, beim Suchen, bei der Zusammenarbeit und bei der Kommunikation von Informationen, die sich auf den Reaktor beziehen. Wissensportale können sowohl öffentlich verfügbare als auch nicht öffentlich zugängliche Informationen steuern und verwalten. Die Portale integrieren das vorhandene Wissen und die vorhandenen Informationen und bieten eine systemische Plattform für den weiteren Erhalt neuer Entwicklungen. Dazu gehören Dokumentendatenbanken zu schnellen Reaktorsystemen, Projektarbeitsbereiche für die koordinierten Forschungsprojekte (CRPs) der IAEA, Technical Meetings (TMs), Diskussionsforen usw. Im Portal wird ein auf Taxonomie basierendes Suchwerkzeug implementiert, das die Verwendung neuer semantischer Suchfunktionen implementiert und konzeptionelles Abrufen von Dokumenten ermöglicht. Die Taxonomie entspricht internationalen Webstandards, wie sie vom W3C (World Wide Web Consortium) definiert werden. Das Interesse an dieser Initiative wurde auf mehreren technischen Treffen in diesem Bereich bekräftigt, die von der technischen Arbeitsgruppe der IAEA für schnelle Reaktoren (TWG-FR) fortlaufend unterstützt werden. Dies ist eine Initiative der IAEA und stellt eine gemeinsame Anstrengung dar, um schnelle Reaktordaten und -wissen zu erhalten.

Ein wichtiger Teil eines Wissensportals besteht in der Inhaltsverwaltung von Dokumenten und Dokumentenspeichern. Im Rahmen der FRKP-Initiative wird daher ein Wissens-Organisations-System (Knowledge Organization System, KOS) entwickelt und unter der Softwareumgebung Sharepoint implementiert. Unter dem Begriff des Knowledge Organization Systems oder „KOS“ versteht man Methoden und Werkzeuge, beispielsweise Vokabulare, Thesauri, Taxonomien oder Ontologien, die zur Beschreibung eines Wissensbereichs verwendet werden. Vor dem Hintergrund der raschen Entwicklung von Semantic Web Technologies und Linked (Open) Data nehmen KOS eine immer wichtigere Rolle in einer Vielzahl von Anwendungen und Anwendungen ein, insbesondere deshalb, weil die beschleunigt zunehmende Anzahl von Dokumenten und Daten in Verbindung mit Einschränkung in der Freitextsuche die Entwicklung neuer Tools und Portale erforderlich machen.

Trotz der Verfügbarkeit moderner Suchmaschinen kann der Abruf gewünschter Informationen verbessert werden, indem der Suchmaschine Metadaten zur Verfügung gestellt werden, die den Inhalt der Dokumente in Kategorien domänenspezifischer KOS klassifizieren. Die Zuordnung von Metadaten („tagging“) geschieht automatisch. Die Entwicklung wissensbasierter Anwendungen hängt daher in hohem Maße von zuverlässigen Taxonomien ab, und ist auch die Entwicklung der Taxonomie selbst von Bedeutung.

Unter einer Taxonomie versteht die IAEA eine „hierarchische Struktur, in der ein Informations- oder Wissensbestand kategorisiert wird, um zu verstehen, wie dieser Wissensbestand in Teile zerlegt werden kann und wie seine verschiedenen Teile untereinander zusammenhängen“ /KHO 17/, /IAE 06/, /IAE 08/. Taxonomien sind Schlüsselemente von KOS und ermöglichen die Verwendung neuer Funktionen wie z. B. die semantische Suche. Das FRKP ist unter der Adresse <https://sp.iaeankm.org/sites/frkos/SitePages/Home.aspx> erreichbar und verwaltet eine umfangreiche Bibliothek von Dokumenten und Daten (Veröffentlichungen, Benchmarks, Experimente, Mess- und Konstruktionsdaten, CRPs der IAEA u.v.a.m.) zu den verschiedensten Aspekten und Themen schneller Reaktorsystemen. Die taxonomiebasierte Suche ist über „Knowledge Base“ erreichbar.

The screenshot shows the FR-KOS website interface. At the top, there's a navigation bar with 'SharePoint', 'Newsfeed', 'OneDrive', 'Sites', and 'Admin Seibert'. Below this is a search bar and a 'CRPs' dropdown. The main header reads 'Fast Reactor Knowledge Organization System (FR-KOS)'. On the left, a sidebar lists various categories like 'Home', 'Documents', 'News', 'IAEA Coordinated Research Projects (CRPs) - completed', 'EBR II', 'Morju', 'Phenix/CW', 'Phenix/ACT', 'Experimental Facilities in Support of Liquid Metal-Cooled Fast Neutron Systems (LMFNS) Compendium', 'Facilities in support of SFR FNS', 'Facilities in support of HEM FNS', 'IAEA Repository', 'Member's Repository', 'Recent', 'ToolP12', 'Powerlagging Admin tools', 'Member Repository', and 'Site Contents'. The main content area features a large image of a reactor core with the following text: 'It is generally recognized that long term development of nuclear power as a part of the world's future energy mix will require fast reactor technology with closed fuel cycle. The fast neutron spectrum allows fast reactors to increase the energy yield from natural uranium by a factor of sixty to seventy compared to thermal reactors, granting therefore realization of nuclear power programmes for thousands of years, as well as a significant improvement of nuclear waste management. It is for these reasons that fast reactors have been under development for decades in several countries, primarily as breeders and, in recent years, also as High-Level Waste burners. The necessary condition for successful deployment in the near and mid-term is the understanding and assessment of technological and design options, based on both past knowledge and experience, as well as on scientific and technological research efforts. With regard to the first, the design and operation of several sodium-cooled fast reactors, such as the Fast Flux Test Facility (FFTF) in USA, the small size Prototype Fast Reactor in the United Kingdom, the prototype Phenix in France, the BN-350 in Kazakhstan, the demonstration plant BN-600 in Russia, Morju in Japan, the commercial size Superphenix in France, etc. have provided an operational experience base of about 400 reactor years. In addition, there is a considerable base of experience with lead-bismuth (ejectile) cooled propulsion (submarine) reactors operated in Russia. Examples of current sodium-cooled fast reactors are the China Experimental Fast Reactor (CEFR), which has been connected to the grid in July 2011, the Russian BN-800 and the Prototype Fast Breeder Reactor (PFBR) in India, both under construction.' Below this text is a 'RESOURCES' section titled 'Catalogue of Facilities in Support of Liquid Metal-cooled Fast Neutron Systems (LMFNS Catalogue)'. It includes an image of a reactor core and text: 'The LMFNS catalogue is a living database, which, in its current form, presents an electronic version of section 4 of the IAEA Nuclear Energy Series publication (in progress) "Experimental Facilities in Support of Liquid Metal Cooled Fast Neutron Systems. A Compendium". The Catalogue page contains an overview on SFR and LFR facilities, details are given in the LMFNS Facility Database.' Below that is a section for 'International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17)'. The text states: 'The FR17 page contains all information on the Conference held at Wokaterburg in June 2017. Please click on the Programme for more information - some of the presentations can be opened by clicking on the presentation number (e.g. CN245-342). The full proceedings with all papers and presentations will be available soon.' On the right side, there are three sidebars: 'FAST REACTORS IN THE WORLD' with a table showing 6 units in operation, 2 under commissioning, and 4 countries with/constructing fast reactors; 'LINKS' with 'IAEA Links' (IAEA Fast Reactors Website), 'Technical Meetings' (Technical Working Group on Fast Reactors (TWG-FR), Status of the IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation Initiative, Passive Shutdown Systems for Liquid Metal-cooled Fast Reactor), and 'External links' (ENI Nuclear Energy Factsheets); and 'PUBLICATIONS' with a list of documents including 'IAEA Seminar/Mexico City, TSO, SFR Technology Overview', 'Meeting report CM.PFBR-SourceTerm, 18-20 Nov 2014', 'Minutes - FN on FRKP Dec 2017', and 'Terms of Reference'.

Abb. 8.1 Einstieg in das Fast Reactor Knowledge Organization System (FR-KOS)

Die Entwicklung einer geeigneten Taxonomie für das FRKP und ihre laufende Aktualisierung ist eine der Kernaufgaben des KOS der IAEA für Schnelle Reaktorsysteme. Aus diesem Anlass fand vom 12.14. Dezember 2017 bei der IAEA in Wien ein „Technical Meeting on the Status of the IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation Initiative“ statt /IAE 17/, in dessen Rahmen u.a. der aktuelle Stand der FR-Taxonomie vorgestellt und in der darauf folgenden Diskussion unter den Teilnehmern im Detail hinterfragt und weiterentwickelt wurde. Auszüge der gegenwärtig implementierten Taxonomiestruktur ist in Abb. 8.2 und Abb. 8.3 wiedergegeben. Weitere Themen waren u.a. Informationsaustausch unter den Mitgliedsstaaten und internationalen Organisationen zu nationalen und internationalen Initiativen bzgl. Know-how-Erhalt und Datenbereitstellung auf dem Gebiet schneller Reaktorsysteme. Seitens der GRS wurden aktuelle Arbeiten zur Weiterentwicklung der Rechenmethoden zur gekoppelten Sicherheitsbewertung flüssigmetallgekühlter Reaktorsysteme vorgestellt /SEU 17a/.

Taxonomy Tree

- ▾ Fast Reactors
 - Code
 - Ecology and environment
 - Experiment
 - Fast Reactor Decommissioning
 - Fast Reactor Design
 - Fast Reactor Operation
 - Material
 - Material property
 - Material treatment
 - Neutronics
 - Nuclear power plant component
 - Nuclear power plant system
 - Quality control
 - Radio chemistry
 - Radiology
 - Reactor disposition
 - Reactor type
 - Reprocessing
 - Research and development
 - Safety
 - Thermohydraulics
- ▾ Nuclear concept
 - Nuclear facility
 - Nuclear fuel cycle
 - Nuclear plant lifecycle

Abb. 8.2 Gegenwärtiger Taxonomiebaum des FRKP mit den übergeordneten Klassifizierungen der beiden Hauptebenen „Fast Reactors“ und „Nuclear concept“

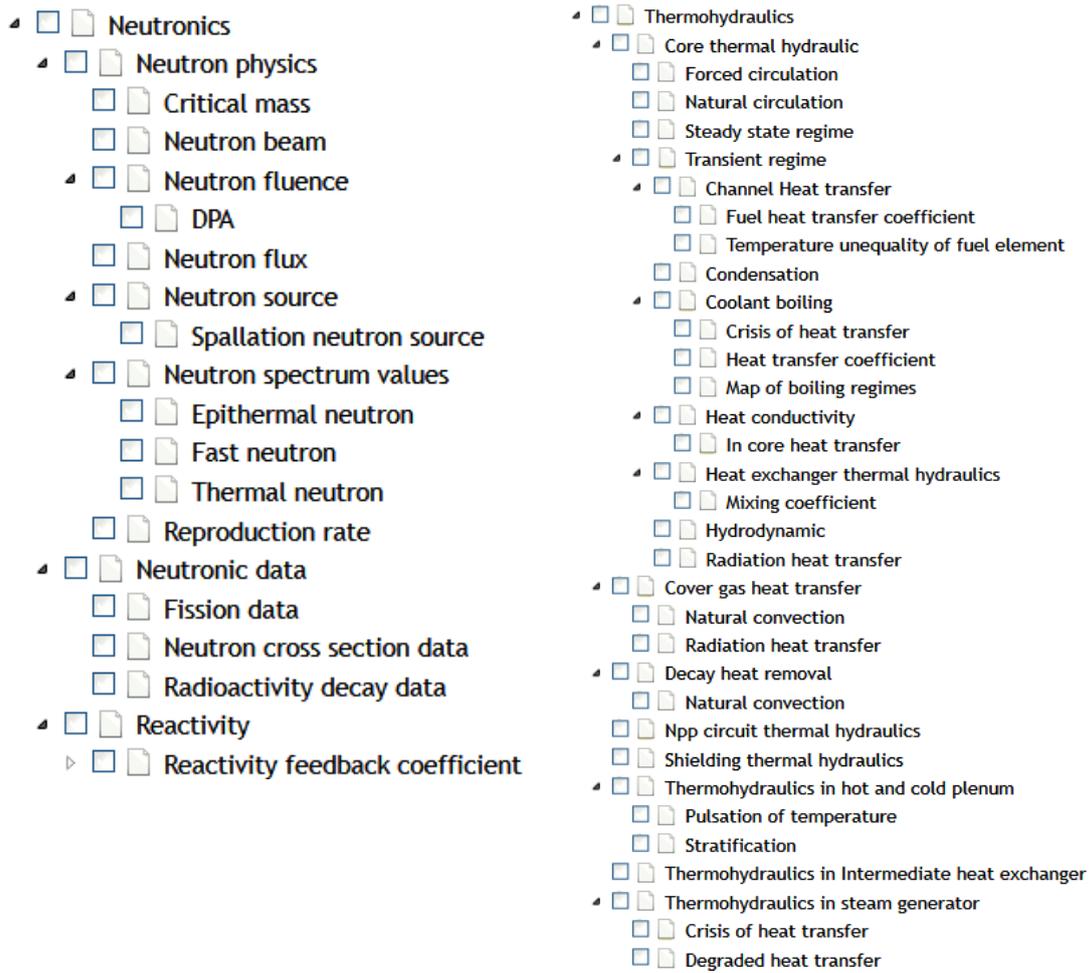


Abb. 8.3 Vollständige Taxonomieebäume am Beispiel der Kategorien „Neutronics“ (links) und „Thermohydraulics“ (rechts)

8.2 Beispiel für das Autotagging einer wissenschaftlichen Publikation

Im Fast Reactor Knowledge Organization System erfolgt die automatische Klassifikation von Dokumenten-Inhalten gemäß der oben skizzierten Taxonomie automatisch mittels der Software PowerTagging von PoolParty. Das FR-KOS bietet die Möglichkeit, eigene Dokumente in einen speziellen Bereich hochzuladen und anschließend automatisch klassifizieren zu lassen. Das Ergebnis dieses Prozesses wird im Folgenden anhand des Konferenzbeitrags „3-D Coupled PARCS/ATHLET simulation of SFR using explicit radial expansion model“ /BOU 18/ demonstriert. Nach erfolgtem Hochladen der PDF-Datei dieser Publikation wird der Tagging-Prozess manuell gestartet. Das Ergebnis der Klassifikation ist in Abb. 8.4 zu sehen. In Klammern ist jeweils die ermittelte Relevanz in Prozent angegeben. Ordnet man das Klassifizierungsergebnis nach der Relevanz, ergibt sich die in Abb. 8.5 wiedergegebene Rangfolge.



Abb. 8.4 Ergebnis des Auto-Taggings. Zahlen in Klammern geben die Relevanz in Prozent an

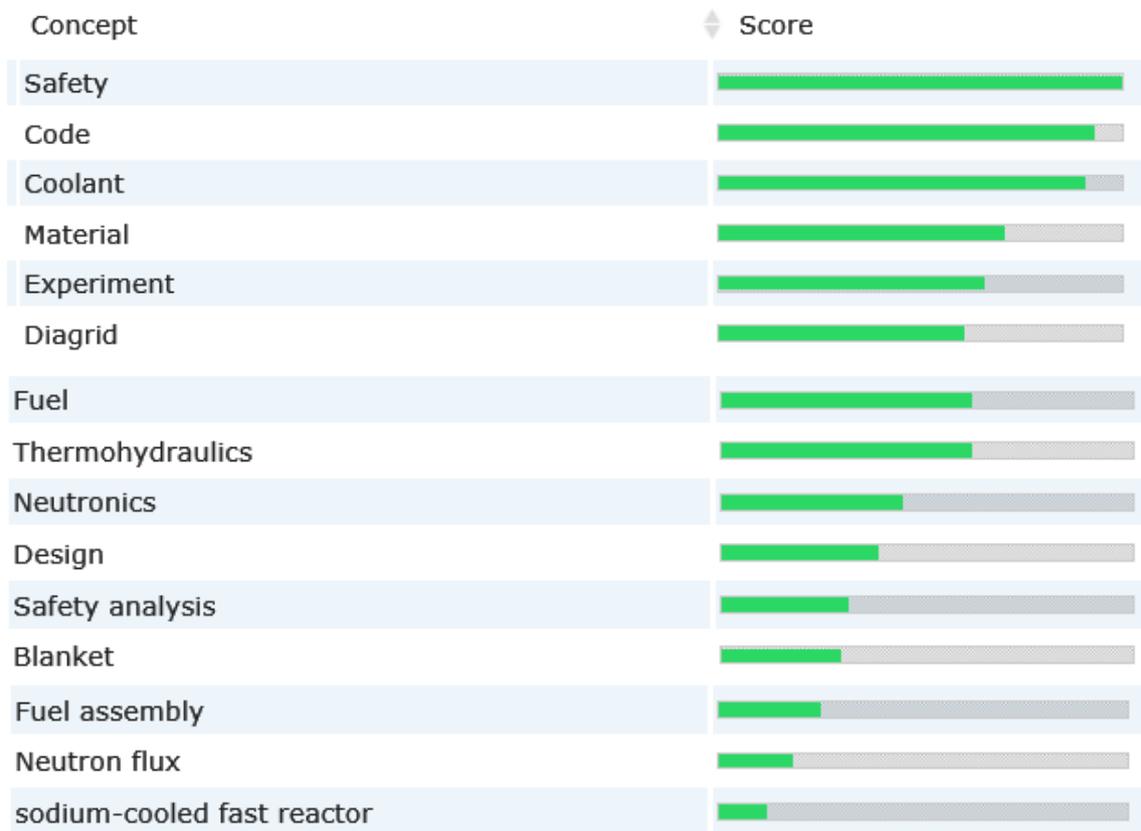


Abb. 8.5 Wie Abb. 8.4, jedoch nach Relevanz sortiert

9 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht beschreibt die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse zum BMWi-Forschungsvorhaben RS1547 „Weiterentwicklung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive P&T“. Das Ziel der Arbeiten bestand in der Weiterentwicklung der Rechenmethodik der GRS zur Sicherheitsbewertung fortgeschrittener flüssigmetallgekühlter kritischer und unterkritischer Systeme mit externen Neutronenquellen. Dies umfasste die Weiterentwicklung sowohl der reaktorphysikalischen als auch der thermohydraulischen Rechenmethodiken und deren Überprüfung bzw. Anwendung. Die Schwerpunkte sind: (a) Weiterentwicklung der reaktorphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethodik zur Sicherheitsbewertung flüssigmetallgekühlter Systeme einschließlich quellgetriebener unterkritischer Konzepte, (b) Sicherheitsaspekte der Prozesse von P&T, (c) Beteiligung an EU-Projekten ESNII+ und MAXSIMA sowie Mitwirkung am FRKP der IAEA. Kompakte Zusammenfassungen der erzielten Arbeitsergebnisse sind in den folgenden Abschnitten gegeben.

9.1 Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Neutronenphysik der Void-Rückwirkung natriumgekühlter Systeme: Natriumgekühlte schnelle Systeme sind hochsensitiv gegenüber der neutronenphysikalischen Rückwirkung der Kühlmittelverdrängung (Voideffekt) aufgrund von Kühlmittelsieden, etwa infolge des Ausfalls der aktiven Kernkühlung (z. B. ULOF). Der Voideffekt kann in bestimmten (meist inneren) Kernbereichen zu positiver, in anderen (meist randnahen) Regionen zu negativer Reaktivitätszufuhr führen. Für kleine oder negative Void-Rückwirkungen nutzen moderne Systeme Neutronen-Leckageeffekte infolge großer Flussgradienten. Die neutronenphysikalische Beschreibung erfordert daher eine genaue Berechnung lokaler Flussgradienten. Die in Kernmodellen zur Sicherheitsbewertung natriumgekühlter Systeme weit verbreitete Diffusionsnäherung kann dabei zu Verfälschungen führen, mit entsprechenden Konsequenzen für die quantitative Bestimmung des lokalen Voideffekts. Anhand des Modellsystems ASTRID wurde durch Vergleich deterministischer Kernberechnungen (PARCS, FEM-Diff-3d) mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen (Serpent) für verschiedene Void-Szenarien insgesamt gute Übereinstimmungen mit den Referenzergebnissen festgestellt werden, wobei für Voiding im oberen Plenum größere Abweichungen festzustellen sind.

Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung: Die Bewertung von Reaktivitätsstörfällen erfordert eine genaue Kenntnis der stabweisen (*pin-by-pin*) Leistungsverteilung, um verlässliche Aussagen zu Sicherheitsmargen, Brennstabintegrität und Kernkühlbarkeit treffen zu können. Zu diesem Zweck wurde das gekoppelte Codesystem PARCS/ATHLET für stabweise Auflösung erweitert, indem ein einzelnes Brennelement eines natriumgekühlten Reaktors (ASTRID) stab- bzw. unterkanalweise modelliert wird. Die Ergebnisse stationärer gekoppelter Simulationen zeigen die erwarteten radialen Variationen von Parametern wie Leistungsdichte und Kühlmitteltemperatur, auch wenn diese aufgrund der periodischen radialen Randbedingungen (unendliches Gitter) gering ausfallen.

Erstellung von Kernmodellen ausgewählter Systeme: Neben Kernmodellen für ASTRID wurde ein Kernmodell von Superphénix für PARCS im Rahmen der Beteiligung am EU-Projekt ESFR-SMART entwickelt und als *In-kind-Contribution* Leistungsverteilung und Reaktivitätskoeffizienten berechnet, die in guter Übereinstimmung mit experimentellen Messungen und Monte-Carlo-Referenzrechnungen stehen. Zudem wurden parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken mittels Serpent sowie ein *Open-Core*-ATHLET-Modell für Superphénix erstellt, mit Hilfe derer transiente Testrechnungen mit PARCS/ATHLET durchgeführt wurden. Ferner wurde ein gekoppeltes PARCS/ATHLET-Modell für ASTRID entwickelt, welches Reaktorkern (3D-Neutronenkinetik und Thermohydraulik), Pool und Primärkreis inkl. Zwischenwärmetauscher umfasst, und jedes Brennelement durch einen eigenen thermohydraulischen Kanal darstellt. In Verbindung mit den ATHLET-Modellerweiterungen zur Simulation von Zweiphasen-Strömungszuständen von Natrium ist es möglich, lokale Siedevorgänge (etwa als Folge eines ULOF) zu verfolgen.

9.2 Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle

Entwicklung einer Methodik zur Darstellung der Wirkungsquerschnitte schneller Systeme inklusive Strukturrückwirkungen: Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte schneller Reaktorsysteme müssen neben Doppler- und Kühlmitteltemperatur auch nach Temperaturen von Strukturmaterialien parametrisiert werden, die deren thermische Ausdehnungseffekte maßgeblich steuern. Dazu wurde eine möglichst allgemein gültige Methodik entwickelt, die die Wirkungsquerschnitte – zusätzlich zu Brennstofftemperatur und Kühlmitteldichte – auch nach Hüllrohrtemperatur und Temperatur der Kerngitterplatte parametrisieren und ggf. Void-Anteil als weiteren Parameter zulassen.

Erweiterung der Modelle zu thermo-strukturellen Ausdehnungseffekten: Das im Vorgängervorhaben RS1515 beschriebene und in PARCS bereits erfolgreich implementierte radiale Kernaussdehnungsmodell wurde dahingehend erweitert, dass es zukünftig mit lokal variierenden Kern-Gitterweiten arbeiten kann. Dies ermöglicht die Simulation sog. Core-Flowering-Phänomene, für die charakteristisch ist, dass aufgrund der in axialer Richtung nach oben hin zunehmenden Kühlmitteltemperatur die Brennelemente im oberen Bereich einen größeren Abstand als im unteren Bereich nahe dem Kerneintritt haben. Die Temperatur der Kerngitterplatte wird dem obersten axialen Node derjenigen ATHLET-Wärmestruktur entnommen (z. B. mittels GCSM), die die massive Stahlstruktur der Kerngitterplatte beschreibt. Das ebenfalls in Rahmen von RS1515 entwickelte und in PARCS implementierte Modell zur axialen Brennstab-/Hüllrohr-Ausdehnung wurde im Vorgängervorhaben (RS1547) modernisiert. Ziele waren (a) die Eliminierung bestehender Limitierungen in Verbindung mit sehr kleinen axialen Maschen, (b) die Erweiterung zur Berücksichtigung verschiedener relativer Ausdehnungsrichtungen, beispielsweise bzgl. des Kernbehälters, und (c) Erweiterungen zur Berücksichtigung der axialen Ausdehnung des Steuerstabantriebs. Ähnlich der radialen Kernaussdehnung wird die Temperatur des Steuerstabantriebs derjenigen ATHLET-Wärmestruktur entnommen (z. B. mittels GCSM), die die Strukturen des Steuerstabantriebs beschreiben. Überprüfungen der Modellerweiterungen wurden anhand des Reaktorkonzepts ASTRID durchgeführt.

9.3 Sicherheitsaspekte bei Partitionierung und Transmutation

Untersuchung des Einflusses minorer Aktiniden im Transmutationsbrennstoff anhand von 3D-Kernberechnungen: Inwieweit die Einbringung von in Transmutationsbrennstoff enthaltenen minoren Aktiniden zu einer Verschlechterung der Sicherheitsparameter (etwa des Dopplereffekts) führt, wurde anhand des ASTRID-Reaktorkerns mittels stationärer deterministischer 3D-Kernberechnungen für verschiedene Arten der Einbringung minorer Aktiniden in den Reaktorkern (nur in die äußere radiale Kernzone, nur in die innere radiale Kernzone, innere und äußere radiale Kernzone) und für verschiedene Dopplerszenarien (unterschiedliche Brennstofftemperaturen in Spalt- und Brutonen) untersucht. Die mit Serpent-Referenzmodellen überprüften Ergebnisse zeigen einerseits die erwarteten Verschlechterungen der Sicherheitsparameter; andererseits ergibt sich aus deren Quantifizierung, dass deterministische Kernberechnungsmethoden für die Sicherheitsbewertung grundsätzlich geeignet sind.

Betrachtung der Sicherheitsaspekte ausgewählter technologischer Prozesse von P&T:
Zu diesen Fragestellungen wurden kritische Experimente nachgerechnet und die Sensitivität der Neutronenmultiplikationsfaktoren auf die eingehenden Wirkungsquerschnitte sowie die Unsicherheit der Neutronenmultiplikationsfaktoren aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte bestimmt. Die Nachrechnungen erfolgten mit den Sequenzen CSAS6 (Kritikalität) und TSUNAMI-3D-K6 (S/U Analyse) des SCALE-Programmpakets unter Verwendung der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.1. Als Datenquelle für entsprechende Experimente wurde das International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments (ICSBEP) herangezogen, welches fünf Experimente mit minoren Aktiniden, konkret mit den Nukliden Np-237 und Cm-244, enthält. Die relative Unsicherheit der Neutronenmultiplikationsfaktoren aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte liegt zwischen 1,1 % und 1,3 % und sind somit etwa doppelt so groß wie typischerweise bei kritischen Experimenten, in welchen nur Uran als spaltbares Material verwendet wird. Diese größeren Unsicherheiten und Abweichungen sind somit ein deutlicher Hinweis auf die größeren Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte von Np-237 gegenüber denen für U-235.

9.4 Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Die Arbeiten zur Weiterentwicklung der thermohydraulischen Rechenmethoden betreffen sowohl ATHLET als auch CFD (OpenFOAM) sowie die Kopplung von ATHLET mit OpenFOAM.

Sieden von Natrium: Zur Simulation des Siedens von Natrium in Kühlkreisläufen wurden in ATHLET druckabhängige Sättigungswerte für Natrium implementiert sowie Stoffwerte für Natriumdampf. Die Modellierung des unterkühltes bzw. gesättigtes Blasensiedens basiert in ATHLET auf der modifizierten Chen-Korrelation. Alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase können innerhalb eines Thermofluid-Systems auch als zweiphasige Mehrkomponentenströmung (LM-Dampf-Gas) modelliert werden. Zur Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium wurden Experimente (Testreihe KNS-3) der Versuchsanlage Kompakter Natriumsiedekreislauf (KNS) in ATHLET modelliert und erfolgreich nachgerechnet.

Erweiterungen von ATHLET zur Simulation von Salzschnmelzen in Kühlkreisläufen: Um ATHLET für sicherheitsrelevante Fragestellungen von Salzschnmelzesystemen einsetzen

zu können, wurde das Programm erweitert. Es können nun die Salzschnmelzen FLiNaK (LiF-NaF-KF) und FLiBe (LiF-BeF₂) als nicht-siedende Arbeitsmedien simuliert werden. Dazu wurden für die beiden Salzschnmelzen Stoffwerte implementiert. Die Arbeitsmedien können für das gesamte Simulationsmodell oder Teile davon über die ATHLET-Eingabedaten ausgewählt und mit allen anderen Arbeitsmedien (H₂O, He, etc.) in getrennten Thermofluid-Systemen kombiniert werden. Zusätzlich können alle in ATHLET verfügbaren nichtkondensierenden Gase innerhalb eines Thermofluid-Systems auch als zweiphasige Strömung (Salzschnmelze – Gas) modelliert werden. Die Ablauffähigkeit der Programmerweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse wurden anhand von Testrechnungen überprüft.

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

Erstellung thermohydraulischer Modelle schneller Systeme: Für den Forschungsreaktor Phénix wurde ein ATHLET-Anlagenmodell entwickelt, welches so gestaltet wurde, dass es auch die thermohydraulischen Randbedingungen für gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulationen liefern kann. Mit diesem Modell wurde der sog. Dissymmetric-Test in Phénix erfolgreich nachgerechnet. Ferner wurden für Phénix gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulationen durchgeführt. Dabei wurde die Kopplungsmethode zwischen OpenFOAM und ATHLET weiterentwickelt, die ursprünglich auf der ATHLET-Schnittstelle für die Kopplung mit CFX beruhte und in verschiedenen GRS-Projekten weiterentwickelt wurde. Im Rahmen dieses Projekts wurde insbesondere die Kopplung von mehr als zwei Schnittstellen für einphasige Fluide zwischen ATHLET und Ope-FOAM verifiziert.

9.5 Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal

Die GRS beteiligte sich aktiv an der FRKP-Initiative u.a. mit Informationen über ihre laufenden Aktivitäten auf dem Gebiet der Weiterentwicklung von Methoden zur Sicherheitsbewertung von schnellen Reaktorsystemen, insbesondere SFR sowie an der Überarbeitung der FR-Taxonomie für die Sharepoint-Site des FRKP durch Einbringung von Vorschlägen für deren Optimierung. Insbesondere wurde akzeptiert, das Knowledge-Preservation-Portal zum Fast Reactor Knowledge Portal (FRKP) weiterzuentwickeln, so dass es nicht nur dem Wissenserhalt dient. Dies trägt der Tatsache Rechnung, dass in jüngerer Zeit in den Fast-Reactor-Themenkomplex neue Bewegung gekommen ist, nicht zuletzt durch Inbetriebnahme von FR-Systemen im Ausland.

Literaturverzeichnis

- /ANL 95/ 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.
- /APS 07/ D. Apsley, "Turbulence Modelling in STREAM",
<https://personalpages.manchester.ac.uk/staff/david.d.apsley/turbmod.pdf>: 2007.
- /AUS 16/ Austregesilo, H., Bals, C., Hora, A., Lerchl G., Romstedt, P., Schöffel, P., Cron, D. von der, Weyermann, F.: ATHLET 3.1A Models and Methods. Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-P-1/Vol. 4, Rev. 4, 407 S., 2016.
- /AVR 16/ Avramova, M.: CTF User's Manual. North Carolina State University, November 2016.
- /BAN 15/ G. Bandini et al., Assessment of systems codes and their coupling with CFD codes in thermal–hydraulic applications to innovative reactors, Nuclear Engineering and Design **281** (2015) 22-38.
- /BEH 14/ Behler, M., Hannstein, V., Kilger, R., Moser, F.-E., Pfeiffer, A., Stuke, M.: Quantifizierung der Rechengenauigkeit von Codesystemen zum Abbrandkredit durch Experimentnachrechnungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS), GRS-336, 196 S., ISBN 978-3-944161-16-7, Köln, Juni 2014.
- /BEH 18/ Behler, M., Hannstein Volker, Sommer, F.: Nachrechnung radiochemischer Analyseproben mit dem Abbrandprogramm MOTIVE. 978-3-947685-14-1, 274 S., September 2018.
- /BOT 90/ M. Bottoni, B. Dorr, F. Huber, Experimental and Numerical Investigation of Sodium Boiling Experiments in Pin Bundle Geometry, Nucl. Technology **89** (1990) 56-82.

- /BOU 16/ Bousquet, J., Seubert, A., Velkov, K., Weiß, F.-P.: Neutronic modeling of the MYRRHA minimum critical core with PARCS and Serpent. In: Proceedings of PHYSOR 2016 - International Conference on the Physics of Reactors. Unifying Theory and Experiments in the 21st Century, Sun Valley, Idaho, USA, 1. - 5. Mai 2016, 2016.
- /BOU 17/ Bousquet, J., Bostelmann, F., Velkov, K., Zwermann, W.: Macroscopic Cross Section Generation with SCALE 6.2 for the MYRRHA Minimal Critical Core. In: Proceedings of M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. Jeju, South Korea, 16. - 20. April 2017, 2017.
- /BOU 18/ J. Bousquet, A. Seubert, P. Sarkadi, 3-D Coupled PARCS/ATHLET simulation of SFR using explicit radial expansion model, Proceedings of the PHYSOR 2018, Cancún, Mexico.
- /CHA 11/ Chadwick, M. B., Herman, M., Obložinský, P., Dunn, M. E., Danon, Y., Kahler, A. C., Smith, D. L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D. A., Capote, R., Carlson, A. D., et al.: ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 112, Nr. 12, S. 2887–2996, DOI 10.1016/j.nds.2011.11.002, 2011.
- /CHR 10/ Christienne, M., Avramova, M., Perin, Y., Seubert, A.: coupled TORT-TD/CTF capability for high-fidelity LWR core calculations. In: Proceedings of PHYSOR 2010 - International Conference on the Physics of Reactors. Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 9. - 14. Mai 2010, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, 2010, 2010.
- /COD 89/ J. D. Cox, D. D. Wagman, and V. A. Medvedev, CODATA Key Values for Thermodynamics, Hemisphere Publishing Corp., New York (1989).
- /DEM 15/ F.Demazeau, Study of the suitability of ATHLET for the simulation of a Molten Salt Reactor, Masterarbeit, TUM, Sept. 2015.

- /DES 19/ De Santis, A et al.: Modelling of a planar impinging jet at unity, moderate and low Prandtl number: Assessment of advanced RANS closures, *Annals of Nuclear Energy* 129, pp 125-145, 2019.
- /ESNII/ European Sustainable Nuclear Industrial Initiative, Sustainable Nuclear Energy Technology Platform (SNETP)
siehe <http://www.snetp.eu/esnii>.
- /ESN 16/ Preparing ESNII for HORIZON 2020; , Evaluation of the ASTRID core behaviour in ULOF before sodium boiling, 14/07/2016.
- /ESN 17/ ESNII+, European workshop on Safety Assessment of Fast Neutron Reactors, 10-12 July 2017, GRS Garching, Germany,
<http://www.snetp.eu/events/event/european-workshop-on-safety-assessment-of-fast-neutron-reactors/>.
- /FUR 19/ S. Furuhashi, Messagepack: It's like JSON. but fast and small.
<http://msgpack.org>, 2019.
- /FRI 13/ Fridman, E., Shwageraus, E.: Modeling of SFR cores with Serpent–DYN3D codes sequence. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 53, S. 354–363, DOI 10.1016/j.anucene.2012.08.006, 2013.
- /GIF 14/ Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems, Issued by the OECD Nuclear Energy Agency for the Generation IV International Forum, January 2014.
- /GLA 12/ H. Glaeser et al., „Thermohydraulische Rechenmethoden zu Transienten und Störfällen im Reaktorkühlkreislauf unter besonderer Berücksichtigung mehrdimensionaler Strömungen (ATHLET, FLUBOX, CFX)“, RS 1184, Abschlussbericht, GRS-A-3644, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Garching, 2012.
- /GOU 90/ J. Gourdon, B. Mesnage, J. L. Voitellier, M. Suescun, Overview of Superphenix commissioning tests, *Nucl. Sci. Eng.* **106** (1990) 1–10.

- /GRU 11/ U. Grundmann, S. Mittag, Super-homogenisation factors in pinwise calculations by the reactor dynamics code DYN3D, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011) 2111–2119.
- /HEB 92/ Hébert, A.: A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. *Nuclear Science and Engineering*, Bd. 113, Nr. 3, S. 227–238, DOI 10.13182/NSE92-10, 1992.
- /HEJ 14/ J. Herb, Coupling of OpenFOAM with Thermo-Hydraulic Simulation Code ATHLET, 9th OpenFOAM Workshop, Zagreb, June 2014.
- /HER 16/ J. Herb, F. Chiriac, “Coupling of OpenFOAM with thermo-hydraulic simulation code ATHLET”, 11th OpenFOAM Workshop: Guimarães, Portugal, 2016.
- /HER 19a/ J. Herb, “Coupled OpenFOAM-ATHLET simulations of the primary circuit of a liquid sodium cooled reactor”, 14th OpenFOAM Workshop 2019, Duisburg, Germany, 2019.
- /HER 19b/ J. Herb, “Description of the first GRS OpenFOAM model”, Internal report in European Sodium Fast Reactor Safety Measures Assessment and Research Tools, ESFR-SMART, 2019.
- /HOL 10/ D. E. Holcomb, S. M. Cetiner, An Overview of Liquid-Fluoride-Salt Heat Transport Systems, ORNL/TM-2010/156, September 2010.
- /HOU 19/ Xingkai HUO, Technical Specifications for NEUTRONICS BENCHMARK OF CEFR START-UP TESTS (CRP-I31032) (DRAFT V6.0), Department of Reactor Engineering, China Institute of Atomic Energy, April 2019.
- /IAE 06/ INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Knowledge Management for Nuclear Industry Operating Organizations, IAEA-TECDOC-1510, IAEA, Vienna (2006).
- /IAE 08/ INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Fast Reactor Knowledge Preservation System Taxonomy and Basic Requirements, Nuclear Energy Series No. NG-T-6.3, IAEA, Vienna (2008).

- /IAE 17/ INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Technical Meeting on the Status of the IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation Initiative, IAEA Headquarters, Vienna, Austria, 12–14 December 2017, Ref. No.: I3-TM-55123; EVT1700249.
- /IGL 17/ A. Iglesias Moreno, “Implementation of an advanced numerical method for the optimization of the ATHLET-OpenFOAM coupling capabilities”, Master Thesis, Technische Universität München, 2017.
- /IMA 19/ iMatix Corporation, Distributed messaging – zeromq, <http://zeromq.org/>, 2019.
- /INL 05/ C. B. Davis, Implementation of Molten Salt Properties into RELAP5-3D/ATHENA, INEEL/EXT-05-02658, January 2005.
- /INL 10/ M. S. Sohal, et al., Engineering Database of Liquid Salt Thermophysical and Thermochemical Properties, INL/EXT-10-18297, March 2010.
- /IVA 18/ Ivanov, V., Khrennikov, N., Danitcheva, I., Bousquet, J., Velkov, K.: SFR transient calculations with ATHLET-DYN3D on the example of BN-type reactor. In: Proceedings of PHYSOR 2018 - International Conference on the Physics of Reactors. Reactor Physics paving the way towards more efficient systems, Cancun, Mexico, 22. - 26. April 2018, 2018.
- /KHO 17/ M. Khoroshev, V. Kriventsev, S. Monti, M. Gladyshev, IAEA’s Fast Reactors Knowledge Portals and Catalogues, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR17), 26–29 June 2017, Yekaterinburg, Russian Federation.
- /KVK 13/ Kompetenzverbund Kerntechnik, Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen. GRS/PtR, 2013, <http://nuklear-server.nuklear.kit.edu/Kompetenzverbund/1280/berichte.htm>.
- /LAN 77/ Langenbuch, S., Maurer, W., Werner, W.: Coarse mesh flux expansion method for the analysis of space-time effects in large LWR cores. Nuclear Science and Engineering, Bd. 63, S. 437–456, 1977.

- /LAV 03/ C. Lavarenne, D. Mennerdahl, C. Dean, Evaluation of nuclear criticality safety data and limits for actinides in transport. IRSN, SEC/T/03.146, Mai 2003.
- /LEM 12/ Lemarchand, E., Klein, M., Pasichnyk, I., Velkov, K., Zwermann, W.: Pin-by-Pin Calculations with QUABOX/CUBBOX using the Super Homogenization Method. In: Proceedings of Jahrestagung Kerntechnik 2012. Jahrestagung Kerntechnik, Stuttgart, Germany, 22. - 24. Mai 2012, 2012.
- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo code, Status, development and applications in 2013. Annals of Nuclear Energy, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 2015.
- /LER 11/ G. Lerchl, ATHLET-Erweiterungen zur Simulation von flüssigem Blei, Blei-Wismut eutektisch und Natrium in Kühlkreisläufen; Technische Notiz, TN-LER-11/04, Nov. 2011.
- /LER 17/ G. Lerchl, ATHLET-Erweiterungen zur Simulation des Siedens von Natrium in Kühlkreisläufen, TN-LER-17/01, Juni 2017.
- /LER 18/ G. Lerchl, ATHLET-Erweiterungen zur Simulation von Salzschnmelzen in Kühlkreisläufen, TN-LER-18/01, Juni 2018.
- /LIE 96/ F. S. Lien et al, "Low-Reynolds-number eddy-viscosity modeling based on non-linear stress-strain/vorticity relations", Engineering Turbulence Modelling and Experiments 3, 91-100, 1996.
- /MAH 15/ J. Mahaffy et al., "Best Practice Guidelines for the use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications - Revision NEA/CSNI/R(2014)11", Organisation for Economic Co-operation and Development, 2015.
- /MAS 17/ M. Massone, F. Gabrielli, A. Rineiski, SIMMER Extension for Multigroup Energy Structure Search using Genetic Algorithm, M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea, April 16-20, 2017, on USB (2017).

- /MIK 17/ K. Mikityuk et al., ESFR-SMART: new Horizon-2020 project on SFR safety, IAEA-CN245-450, Proceedings of International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR17), June 26-29, 2017, Yekaterinburg, Russia.
- /NEA 16/ OECD/NEA: International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. NEA No. 7328, NEA/NSC/DOC(95)03, Dezember 2016.
- /NIK 15/ E. Nikitin, E. Fridman, K. Mikityuk, On the use of the SPH method in nodal diffusion analyses of SFR cores, *Annals of Nuclear Energy* 85 (2015) 544–551.
- /PAP 15/ A. Papukchiev et al., „Anwendung und Validierung von CFD-basierten Verfahren für mehrskalige und multiphysikalische Simulationen in der Reaktorsicherheit“, GRS-518, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Garching, 2019.
- /PAP 15b/ A. Papukchiev et al., Comparison of different coupling CFD–STH approaches for pre-testanalysis of a TALL-3D experiment, *Nuclear Engineering and Design* 290 (2015) 135-143.
- /PAP 19/ A. Papukchiev et al.: Anwendung und Validierung von CFD-basierten Verfahren für mehrskalige und multiphysikalische Simulationen in der Reaktorsicherheit, GRS-518, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Garching, 2019.
- /PER 10/ Perin, Y., Velkov, K., Pautz, A.: COBRA-TF / QUABOX-CUBBOX: code system for coupled core and subchannel analysis. In: Proceedings of PHYSOR 2010 - International Conference on the Physics of Reactors. Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 9. - 14. Mai 2010, 2010.
- /PER 13/ Y. Périn, K. Velkov, A. Ward, T. Downar, Coupling PARCS with the Thermal Hydraulic System Code ATHLET, Spring 2013 CAMP Meeting, Pisa, , Italy May 8 - 10, 2013.

- /PON 18/ A. Ponomarev, A. Bednarova, K. Mikityuk, New sodium fast reactor neutronics benchmark, PHYSOR 2018: Reactor Physics paving the way towards more efficient systems Cancun, Mexico, April 22-26, 2018.
- /RAC 17/ Rachamin, R., Kliem, S.: Application of SPH Method for Sodium Fast Reactor Analysis. In: Proceedings of M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. Jeju, South Korea, 16. - 20. April 2017, 2017.
- /REA 17/ Rearden, B. T., Jessee, M. A.: SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN, USA, Version 6.2.1, 2017.
- /REN 14/ Renn, O. (Hrsg.): Partitionierung und Transmutation, Forschung, Entwicklung, gesellschaftliche Implikationen. Deutsche Akademie der Technikwissenschaften, Acatech Studie, ISBN 978-3-8316-4380-6, Herbert Utz Verlag GmbH, München, 2014.
- /ROH 16/ Rohde, U., Kliem, S., Grundmann, U., Baier, S., Bilodid, Y., Duerigen, S., Fridman, E., Gommlich, A., Grahn, A., Holt, L., Kozmenkov, Y., Mittag, S.: The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications. Progress in Nuclear Energy, Bd. 89, S. 170–190, DOI 10.1016/j.pnucene.2016.02.013, 2016.
- /SEU 08/ Seubert, A., Velkov, K., Langenbuch, S.: The time-dependent 3D discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by ATHLET models. In: Proceedings of PHYSOR 2008 - International Conference on the Physics of Reactors. Interlaken, Switzerland, 14. - 19. September 2008, ISBN 978-3-9521409-5-6, 2008.
- /SEU 09/ A. Seubert, A. Pautz, M. Becker, M. Dagan, Time-Dependent Anisotropic Distributed Source Capability in Transient 3 D Transport Code TORT TD, International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009), Saratoga Springs, New York, May 3-7, 2009.
- /SEU 13a/ A. Seubert, P. Baloché, K. Velkov, Neutronic Properties Evaluation of Pb-Bi Cooled Fast Cores, Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 2013.

- /SEU 13b/ A. Seubert, P. Baloché, K. Velkov, Reactivity Feedback Assessment of Liquid Lead Bismuth Eutectic Cooled Fast Core, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Safe Technologies and Sustainable Scenarios (FR13), Paris, 2013.
- /SEU 13c/ A. Seubert, B. Gmal, V. Hannstein, F. Puente-Espel, H. G. Sonnenburg, K. Velkov, F.-P. Weiß, Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle – Beiträge (der GRS) zu Sicherheitsaspekten der Abtrennung und Umwandlung langlebiger hochradioaktiver Nuklide, Abschlussbericht, GRS-A-3729, Oktober 2013.
- /SEU 14a/ A. Seubert, Experience with the PARCS multi-group TPEN solver applied to fast spectrum systems, 2014 SPRING CAMP MEETING, Zagreb, Croatia, May 14 - 16, 2014.
- /SEU 14b/ A. Seubert, M. des Boscqs, K. Velkov, Modeling of the OECD/NEA Benchmark Medium Size Oxide Core with HELIOS and PARCS, Jahrestagung Kerntechnik, Frankfurt, 2014.
- /SEU 15a/ A. Seubert, Application of PARCS to fast spectrum systems, 2015 SPRING CAMP MEETING, Prague, Czech Republic, May 27 - 29, 2015.
- /SEU 15b/ A. Seubert, K. Velkov, F. P. Weiß, Modeling SFR Diagrid Expansion Reactivity Feedback by Coordinate Transformation of the Diffusion Equation, Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 2015.
- /SEU 16/ A. Seubert et al., Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR, GRS-417, 299 S, ISBN 978-3-946607-99-0, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Garching, 2016.
- /SEU 17a/ A. Seubert, J. Bousquet, P. Sarkadi, Model extensions in PARCS and ATHLET for coupled safety assessment of liquid metal cooled fast reactors, Technical Meeting on the Status of the IAEA Fast Reactor Knowledge Preservation Initiative, IAEA Headquarters, Wien, Austria, 12–14 December 2017.

- /SHA 13/ A. Shams et al., Assessment of an Algebraic Heat Flux Model for the Applications of Innovative Reactors, NURETH15-276, The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics, NURETH-15, Pisa, Italy, 2013.
- /SHA 14/ A. Shams et al., Assessment and calibration of an algebraic turbulent heat flux model for low-Prandtl fluids, International Journal of Heat and Mass Transfer 79, pp 589-601, 2014.
- /SHA 19a/ A. Shams, "Turbulent heat transport in Thermal Hydraulics Aspects of Liquid Metal Cooled Nuclear Reactors", edited by Ferry Roelofs, Elsevier Ltd., Duxford, UK, 2019.
- /SHA 19b/ A. Shams, A. De Santis, "Towards the accurate prediction of the turbulent flow and heat transfer in low-Prandtl fluids", International Journal of Heat and Mass Transfer 130, pp 290-303, 2019.
- /SHI 11/ Shibata, K., Iwamoto, O., Nakagawa, T., Iwamoto, N., Ichihara, A., Kunieda, S., Chiba, S., Furutaka, K., Otuka, N., Ohsawa, T., Murata, T., Matsunobu, H., Zukeran, A., Kamada, S., Katakura, J.: JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. Journal of Nuclear Science and Technology, Bd. 48, Nr. 1, S. 1–30, DOI 10.1080/18811248.2011.9711675, 2011.
- /STE 18/ Steinhoff, T., Jacht, V.: NuT User's Manual. GRS - P - 10, 30 S., 2018.
- /TOT 17/ A. Toti et al., "Improved numerical algorithm and experimental validation of a system thermal-hydraulic/CFD coupling method for multiscale transient simulations of pool-type reactors", Annals of Nuclear Energy 103, pp 36-48, 2017.
- /TRK 11/ Trkov, A., Herman, M., Brown, D. A. (Hrsg.): ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, CSEWG Document ENDF-102, Report BNL-90365-2009 Rev.2, 396 S.: Upton, NY, USA, Dezember 2011.

- /VAN 14/ M. Vanderhaegen, A. Le Belguet, A Review on Sodium Boiling Phenomena in Reaktor Systems, Nuclear Science and Engineering, 176, 115-137 (2014).
- /VAN 90/ M. Vanier, P. Bergeonneau, J. C. Gauthier, M. Jacob, J. de Antoni, E. Gesi, P. Peerani, J. P. Adam, Superphénix Reactivity and Feedback Coefficients, Nucl. Sci. Eng. **106** (1990) 30–36.
- /WAN 19/ Wang, Xi, “Multiscale thermal hydraulic analysis of fuel assembly and system of SFR”, Dissertation, KIT Karlsruhe Institute of Technology, 2019.
- /WEM 08/ Wemple, C. A., Gheorghiu, H.-N.M., Stamm’ler, R.J.J., Villarino E.A.: Recent Advances in the HELIOS-2 Lattice Physics Code. In: Proceedings of PHYSOR 2008 - International Conference on the Physics of Reactors. Interlaken, Switzerland, 14. - 19. September 2008, ISBN 978-3-9521409-5-6, 2008.
- /ZIL 18/ M. Zilly, Y. Périn, “KMACS Validation Report,” technical report, GRS gGmbH, 2018. <https://www.grs.de/en/kmacs>.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Schematische Darstellung der untersuchten Void-Szenarien.....	8
Abb. 3.2	MCNPX-Modell des Spallationstargets im Kern von MYRRHA	10
Abb. 3.3	Serpent-Modell des Kerns von MYRRHA /SEU 16/. Der zentrale Kanal enthält das Spallationstarget.....	11
Abb. 3.4	Vergleich der Spallationsneutronenenergiespektren, berechnet mit verschiedenen Modellen und nuklearen Daten	12
Abb. 3.5	Axiales Spallationsneutronen-Quellstärkeprofil in der 8-Energiegruppe Struktur für das MYRRHA-Target, simuliert mit MCNPX 2.7 CEM.....	14
Abb. 3.6	Vergleich der axialen Spallationsneutronen-Quellstärkeprofile von MCNPX 2.5 (links) und MCNPX 2.7 CEM (rechts).....	14
Abb. 3.7	Vergleich der axialen Spallationsneutronen-Quellstärkeprofile von MCNPX 2.7 INCL4 (links) und MCNPX 2.7 ISABEL (rechts).....	15
Abb. 3.8	Mit PARCS berechnete Leistungsverläufe als Antwort auf einen 5-sekündigen Spallationsquellpuls, generiert mit den verschiedenen MCNPX-Modellen	16
Abb. 3.9	Querschnitte stabweisen Modell eines ASTRID Brennelements in Serpent (links) und PARCS (rechts).....	17
Abb. 3.10	Stabweises ATHLET-Modell mit Querverbindungen eines ASTRID Brennelements.....	18
Abb. 3.11	Mit Serpent berechnete radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements.....	19
Abb. 3.12	Mit PARCS berechnete radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements.....	20
Abb. 3.13	Mit PARCS/ATHLET berechnete stationäre radiale Stab-Leistungsverteilung (auf 1 normiert) des ASTRID-Brennelements	21
Abb. 3.14	Mit PARCS/ATHLET berechnete stationäre radiale Brennstofftemperaturverteilung (°C) des ASTRID-Brennelements	22
Abb. 3.15	Serpent-3D-Modelle verschiedener Brennelemente und eines Steuerelements (rechts) für die Erstellung von Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	23

Abb. 3.16	Beispiele für die erweiterte <i>materials</i> -Datenstruktur in KMACS für hexagonale Geometrie. Neue Kennwörter sind grau markiert.....	25
Abb. 3.17	Beispiele für die <i>composition</i> -Angabe. In grau stehen die neuen Kennwörter	26
Abb. 3.18	Beispiele für Angaben zu <i>assemblyTypes</i> . In grau stehen die neuen Kennwörter	27
Abb. 3.19	Superzell-Modelle für die SPH-Methode. Links: Serpent-Referenzmodell, rechts: homogenisiertes DYN3D-Modell.....	28
Abb. 3.20	Serpent-Modell des SPX-Kerns	32
Abb. 3.21	Links: Radiale Schnitte durch die Serpent-Modelle für Brennelemente (oben) und übrige Kernpositionen wie z. B. Reflektor- oder Steuerelemente (unten). Rechts: Axialer Schnitt durch das 3D-Serpent-Modell eines Brennelements	34
Abb. 3.22	Radiale Kernanordnung (oben) und axiale Schnitt (unten) des ASTRID-Kerns.....	39
Abb. 3.23	Serpent-Modell des SPX-Kernsk	41
Abb. 3.24	Mit Serpent berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen 1 bis 6 sowie 12 im Vergleich zu den Benchmark-Referenzen (orange).....	42
Abb. 3.25	Mit PARCS berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der 12 verschiedenen SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen im Vergleich zu den Benchmark-Referenzen (orange).....	45
Abb. 3.26	Mit PARCS berechnete Multiplikationsfaktoren (blau) der ersten drei SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen im Vergleich zu den Messwerten (orange).....	46
Abb. 3.27	Radiale Kernkonfiguration des CEFR /HOU 19/.....	47
Abb. 3.28	Monte-Carlo-Kernmodell des CEFR in Serpent.....	48
Abb. 3.29	Deterministisches Kernmodell des CEFR in FEM-Diff-3d (links) und berechnete Leistungsdichteverteilung etwa auf Höhe axialen der Kernmitte (rechts; Ergebnis vorläufig)	49
Abb. 4.1	Illustration des ursprünglichen axialen Ausdehnungsmodells in PARCS	56

Abb. 4.2	Beispiel einer thermisch bedingten Verschiebung von Materialgrenzen, bei der eine Materialgrenze im übernächsten Node zu liegen kommt (grüner Pfeil)	57
Abb. 4.3	Prinzip des erweiterten axialen Kernausdehnungsmodells in PARCS.....	58
Abb. 4.4	Thermohydraulisches Open-Core-Modell des ASTRID-Reaktorkerns.....	60
Abb. 4.5	Einfluss auf die Gesamtleistung eines vorübergehenden Anstiegs der Kernkühlmitteleintrittstemperatur mit explizitem Modell der thermischen radialen Ausdehnung.....	61
Abb. 4.6	Multiplikationsfaktor als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 1	63
Abb. 4.7	Multiplikationsfaktor als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 2	64
Abb. 4.8	Zeitverlauf des Massenstroms am Kerneintritt während der Transiente.....	65
Abb. 4.9	Position der drei gezeigten Kanäle im Kern	65
Abb. 4.10	Axiale Voidverteilung und Hüllrohrtemperaturverteilung in ausgewählten Kanälen des ASTRID-Kerns im stationären Zustand zu Beginn der Transiente.....	66
Abb. 4.11	Zeitpunkt des Einsetzens des Siedens	67
Abb. 4.12	Fortschreiten des Siedeprozesses.....	67
Abb. 4.13	Wie Abb. 4.10, jedoch zu späterem Zeitpunkt bei fortgeschrittenem Siedezustand.....	68
Abb. 5.1	Multiplikationsfaktoren für den ASTRID-Kern mit nominalem MA-Gehalt.....	71
Abb. 5.2	Deterministisch berechnete Reaktivitätseffekte der vier Dopplerszenarien für die verschiedenen Einbringungen von Brennstoff mit erhöhter MA-Beladung im Vergleich mit dem Nominalkern	72
Abb. 5.3	Vergleich der mit Serpent und FEM-Diff-3d berechneten Reaktivitätsrückwirkungen für die vier Doppler-Szenarien	73
Abb. 5.4	Wie Abb. 5.3, jedoch für die äußere radiale Kernzone	73
Abb. 5.5	Wie Abb. 5.3, jedoch für innere und äußere radiale Kernzone	74
Abb. 5.6	Spalt- (rot) und Einfangwirkungsquerschnitt (blau) der Isotope Np-237, Am-241 und Cm-243 aus der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B VII.1.....	79

Abb. 5.7	Schematische Darstellung der Rechenmodelle mit zentraler Spaltmaterialkugel (blau) und umgebenden Neutronenreflektor (türkis)	81
Abb. 5.8	Schematische Darstellung des Experiments SPEC-MET-FAST-008.....	90
Abb. 5.9	Schematische Darstellung des Experiments SPEC-MET-FAST-011.....	90
Abb. 6.1	Nodalisierung des Testfalls PIPE	101
Abb. 6.2	Kühlmitteltemperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE	102
Abb. 6.3	Zeitlicher Verlauf von Massenstrom, Druck, KM-Temperatur und Volumendampfgehalt im Testfall PIPE	103
Abb. 6.4	Zeitlicher Verlauf von Wärmestrom, Verdampfungsrate, Gesamt-HTC und HTC durch Wandverdampfung im Testfall PIPE	104
Abb. 6.5	Links: Fluid- und Brennstaboberflächentemperaturen über Länge der Teststrecke. Rechts: WÜ-Koeffizient über Länge der Teststrecke.....	104
Abb. 6.6	ATHLET-Nodalisierung des ASTRID Pool-Reaktors	105
Abb. 6.7	ATHLET-Nodalisierung des ASTRID Reaktorkerns	106
Abb. 6.8	Verteilung der Kühlmittel- und Wärmetauschertemperatur im stationären Betriebszustand.....	107
Abb. 6.9	Verteilung der Kühlmittel- und Wärmetauschertemperatur kurz vor Beginn des Natriumsiedens	108
Abb. 6.10	Verteilung des Volumendampfgehalts und der Wärmetauschertemperatur im gesamten Pool bei T=300 s.....	109
Abb. 6.11	Links: Verteilung des Volumendampfgehalts und der Hüllrohrtemperatur im Kern bei T=300 s. Rechts: Verteilung der Massenströme in den Verbindungsleitungen zwischen Control Plug und Hot Pool.....	110
Abb. 6.12	Ergebnisse der ULOF-Transiente (1)	111
Abb. 6.13	Ergebnisse der ULOF-Transiente (2)	112
Abb. 6.14	ATHLET-Nodalisierung der Teststrecke der Versuchsanlage KNS.	115
Abb. 6.15	Zeitlicher Verlauf des Einspeise-Massenstroms in ATHLET.....	116
Abb. 6.16	Mit ATHLET berechnete zeitliche Verläufe der Dampfgehalte in den einzelnen Nodes der oberen Hälfte des Stabbündels	118
Abb. 6.17	Ausgewählte Messergebnisse zu Test L22 /BOT 90/.....	118

Abb. 6.18	Mit ATHLET berechnete zeitliche Verläufe der Heizstab-Oberflächentemperaturen an verschiedenen axialen Positionen während der Transiente	119
Abb. 6.19	Test L22 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)	120
Abb. 6.20	Test L60 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)	122
Abb. 6.21	Test L58 - Maximaler Dampfgehalt (oberes Diagramm) und Heizstabtemperatur (unteres Diagramm)	124
Abb. 6.22	Stationäre Kühlmittelverteilung in ASTRID	135
Abb. 6.23	ASTRID: Stationäre Massenstromverteilung am Austritt des Control Plugs (li.) und im Hot Pool (re.)	136
Abb. 6.24	ASTRID: Stationäre Kühlmitteltemperaturverteilung	137
Abb. 6.25	Im Uhrzeigersinn: Massenstrom durch die Umwälzpumpe, Kühlmitteltemperaturen, Kühlmitteldruck, Kern- und Wärmetauscherleistung (FLiNaK, Kurzzeitplots)	138
Abb. 6.26	Im Uhrzeigersinn: Massenstrom durch die Umwälzpumpe, Kühlmitteltemperaturen, Kühlmitteldruck, Kern- und Wärmetauscherleistung (FLiNaK, Langzeitplots)	139
Abb. 6.27	Am Gemischspiegel im Hot Pool; im Uhrzeigersinn: Gemischspiegelhöhe, CV-Index mit ML, Wärmestrom vom oberen zum unteren ML-Teil-CV, Temperaturen am ML	140
Abb. 6.28	Übernahme der Temperatur der Kerngitterplatte am Beispiel des ATHLET-Open-Core-Modells von ASTRID	143
Abb. 6.29	ATHLET-Modell des Reaktors Phénix	145
Abb. 6.30	Mit ATHLET berechnete zeitliche Temperaturverläufe zum Dissymmetric-Test in Phénix (Teil 1)	147
Abb. 6.31	Mit ATHLET berechnete zeitliche Temperaturverläufe zum Dissymmetric-Test in Phénix (Teil 2)	148
Abb. 6.32	Beispiel für ein Oberflächengitter im STL-Format (innere Wand des RDB grün, Fläche zwischen Downcomer und unterm Plenum blau)	151
Abb. 6.33	Probleme bei der Gittererstellung an der Kante zwischen äußerer Wand des unteren Plenums (rot) und der Schnittstelle zwischen Downcomer und unterem Plenum (blau)	152

Abb. 6.34	Fehlende Schlitze der Siebtonne im erzeugten Gitter (blau) im Vergleich zur STL-Geometrie (braun)	154
Abb. 6.35	Kopplungsarchitektur /HER 16/, /PAP 19/.....	154
Abb. 6.36	Modifikation der OpenFOAM Pimple Solver /HER 16/.....	156
Abb. 6.37	ATHLET-Modell des Phénix-Reaktors, basierend auf dem Modell aus /WAN 19/, mit Kopplungsschnittstellen zum OpenFOAM Modell /HER 19a/.....	162
Abb. 6.38	Kopplungsschnittstellen zwischen den ATHLET- und OpenFOAM Modellen des Primärkühlkreislaufes /HER 19a/	164
Abb. 6.39	Fluidzonen von OpenFOAM im heißen und kalten Plenum /WAN 19/....	166
Abb. 6.40	Zusätzliche Wände auf der Oberseite des heißen Plenums.....	167
Abb. 6.41	Schichten, die als poröses Medium simuliert wurden im heißen (rot) und kalten (blau) Plenum.....	168
Abb. 6.42	Temperatur im heißen und kalten Plenum in der transienten Simulation für die Zeiten 130 s (oben) und 1.000 s (unten) /HER 16/.....	170
Abb. 6.43	Temperaturverlauf im oberen Bereich des heißen Plenums für die ATHLET-Stand-Alone-Simulation (blau gestrichelt) und die gekoppelte Rechnung (orange durchgezogen) /HER 19a/	171
Abb. 6.44	Zeitlicher Verlauf des maximalen Residuums aller Kopplungsschnittstellen und Anzahl der äußeren Schleifendurchläufen pro Zeitschritt von OpenFOAM /HER 19a/	172
Abb. 6.45	Temperatur im Rechengebiet für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten) ..	176
Abb. 6.46	Verlauf der Temperatur über die Höhe des Rechengebiets für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten)	177
Abb. 6.47	Verlauf der turbulenten Temperaturschwankungen (Varianz) t_2 über die Höhe des Rechengebiets für $Pr=0,7$ (oben) und $Pr=0,025$ (unten)...	178
Abb. 7.1	Ankündigung des <i>European workshop on Safety Assessment of Fast Neutron Reactors</i>	182
Abb. 8.1	Einstieg in das Fast Reactor Knowledge Organization System (FR-KOS).....	189
Abb. 8.2	Gegenwärtiger Taxonomiebaum des FRKP mit den übergeordneten Klassifizierungen der beiden Hauptebenen „Fast Reactors“ und „Nuclear concept“	190

Abb. 8.3	Vollständige Taxonomieebäume am Beispiel der Kategorien „Neutronics“ (links) und „Thermohydraulics“ (rechts).....	191
Abb. 8.4	Ergebnis des Auto-Taggings. Zahlen in Klammern geben die Relevanz in Prozent an.....	192
Abb. 8.5	Wie Abb. 8.4, jedoch nach Relevanz sortiert.....	193

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Verwendete optimierte 11-Gruppen-Struktur /MAS 17/	8
Tab. 3.2	Ergebnisse der betrachteten Void-Szenarien.....	9
Tab. 3.3	Vergleich der Neutronenausbeute je Proton, berechnet mit verschiedenen Modellen und nuklearen Daten	13
Tab. 3.4	12-Energiegruppen-Struktur.....	24
Tab. 3.5	Thermohydraulische Rückwirkungsgrößen (Spalten) und jeweilige Stützstellen (Zeilen)	29
Tab. 3.6	Radiale Pelletabmessungen als Funktion der Brennstofftemperatur	30
Tab. 3.7	Hüllrohrabmessungen und Stabgitterweite als Funktion der Hüllrohrtemperatur.....	30
Tab. 3.8	Halber Spalt zwischen zwei Brennelementkästen als Funktion der Kerngitterplattentemperatur	30
Tab. 3.9	Für Superphénix verwendete 12-Energiegruppen-Struktur	35
Tab. 3.10	Abweichung der mit PARCS berechneten Multiplikationsfaktoren für Superphénix von der Serpent-Referenzlösung mit und ohne SPH- Korrektur.....	35
Tab. 3.11	Parameterisierung der Wirkungsquerschnittsdaten für SPX.....	36
Tab. 3.12	Beispiel für die Parameterisierung des Serpent-Eingabedatensatzes	38
Tab. 3.13	Die 12 verschiedenen SPX-Benchmark-Kernkonfigurationen mit ihren jeweiligen Einfahrtiefen der CSD-Elemente und Materialtemperaturen.....	40
Tab. 3.14	Ergebnisse der Serpent- und PARCS-Modelle und Vergleiche mit Benchmark-Referenzergebnissen und Experiment	43
Tab. 3.15	Vorläufige Serpent-Ergebnisse für zwei ausgewählte Kernkonfigurationen.....	49
Tab. 4.1	Multiplikationsfaktoren für verschieden Kerngitterplattentemperaturen – Vergleich zwischen Referenz und radialem Kernausdehnungsmodell	59
Tab. 4.2	Multiplikationsfaktor und Reaktivitätseffekte als Funktion der Hüllrohrtemperatur für Fall 1	63
Tab. 5.1	Definition der zu untersuchenden Szenarien.....	70

Tab. 5.2	Mit Serpent berechnete Reaktivitätswerte für die untersuchten Doppler-Szenarien bei nominaler MA-Beladung	70
Tab. 5.3	Änderung der Void-Rückwirkung bei unterschiedlichen Arten der Einbringung minorer Aktiniden in den Reaktorkern	75
Tab. 5.4	Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme (Referenzfälle in hellblau)	83
Tab. 5.5	Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme (Referenzfälle in hellblau)	83
Tab. 5.6	Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme bei Verwendung der SCALE-Sequenz CSAS6.....	85
Tab. 5.7	Errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme bei Verwendung der SCALE-Sequenz CSAS6.....	86
Tab. 5.8	Unsicherheiten der Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der schnell spaltenden Systeme aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte	88
Tab. 5.9	Unsicherheiten der Neutronenmultiplikationsfaktoren k_{eff} der thermisch spaltenden Systeme aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte	88
Tab. 5.10	Experimentelle und mit ENDF/B-VII.1 errechnete Neutronenmultiplikations-faktoren der betrachteten kritischen Experimente	92
Tab. 5.11	Gegenüberstellung der errechnete Neutronenmultiplikationsfaktoren in Abhängigkeit der genutzten Wirkungsquerschnittsbibliothek.....	92
Tab. 5.12	Größte Sensitivitäten von k_{eff} auf totale Wirkungsquerschnitte in den Experimenten SPEC-MET-FAST-008, -011 und -014	93
Tab. 5.13	Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-008	95
Tab. 5.14	Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-011	95
Tab. 5.15	Größte Unsicherheitsbeiträge zu k_{eff} aufgrund der Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte für das Experiment SPEC-MET-FAST-014	96
Tab. 6.1	Test L22 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET	117

Tab. 6.2	Test L60 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET.....	121
Tab. 6.3	Test L58 - Vergleich von experimentellen Daten mit BACCHUS-3D und ATHLET.....	123
Tab. 6.4	Sättigungswerte für die Salzschnmelzen.....	126
Tab. 6.5	Stoffwerte für die Salzschnmelzen (T in K, falls nicht anders beschrieben).....	128
Tab. 6.6	Parameter des CFD-Rechengitters des heißen Plenums.....	164
Tab. 6.7	Parameter des CFD-Rechengitters des kalten Plenums	164
Tab. 6.8	Modellkonstanten den AHFM-2005 Modells /SHA 19a/.....	175
Tab. 7.1	ESNII+ – Seminar <i>W7 Safety Assessment of Fast Reactors</i> – Tagesordnung des ersten Tages	183
Tab. 7.2	ESNII+ – Seminar <i>W7 Safety Assessment of Fast Reactors</i> – Tagesordnung des zweiten Tages	184
Tab. 7.3	ESNII+ – Seminar <i>W7 Safety Assessment of Fast Reactors</i> – Tagesordnung des dritten Tages	185

**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