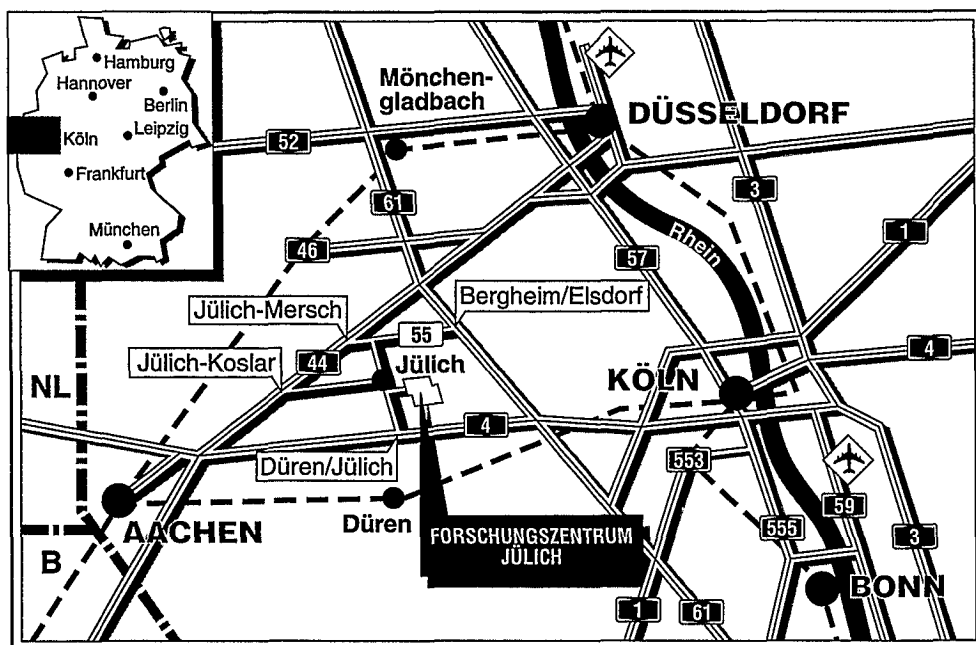


*Institut für Sicherheitsforschung
und Reaktortechnik*

**Berechnung der Spaltprodukt-
verteilung in Core und
Primärkreislauf eines
Hochtemperaturreaktors
im Normalbetrieb**

Ulrich Horst Mattke



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2515

ISSN 0366-0885

Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik Jül-2515

D 82 (Diss. T.H. Aachen)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

Postfach 1913 · D-5170 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833 556-70 kfa d

Berechnung der Spaltprodukt- verteilung in Core und Primärkreislauf eines Hochtemperaturreaktors im Normalbetrieb

Ulrich Horst Mattke

**Computation of Fission Product Distribution
in Core and Primary Circuit
of a High Temperature Reactor
during Normal Operation**

by

Ulrich Horst Mattke

ABSTRACT

The fission product release during normal operation from the core of a high temperature reactor is well known to be very low.

For that reason in the present work a HTR-Modul-reactor with a reduced power of 170 MW_{th} is examined under the aspect whether the contamination with cesium-137 as most important nuclide will be so low that a helium turbine in the primary circuit is possible. The program SPTRAN is the tool for the computations and simulation of fission product transport in high temperature reactors. The program initially developed for computations of accident events has been enlarged for computing the fission product transport under the conditions of normal operation.

The theoretical basis, the used programs and data basis are presented followed by the results of the computations. These results are explained and discussed; moreover the consequences and future possibilities of development are shown.

**Berechnung der Spaltproduktverteilung
in Core und Primärkreislauf
eines Hochtemperaturreaktors
im Normalbetrieb**

von

Ulrich Horst Mattke

KURZFASSUNG

Die normalbetriebsbedingten Freisetzungen aus dem Core eines Hochtemperaturreaktors sind bekanntermaßen sehr gering.

In dieser Arbeit wird deshalb für einen HTR-Modul mit auf 170 MW_{th} reduzierter Leistung untersucht, ob beim momentanen Stand der Technik bezüglich des Leitnuklids Cäsium-137 Freisetzungswerte zu erwarten sind, die eine Heliumturbine im Primärkreis unter dem Gesichtspunkt der Kontamination möglich erscheinen lassen. Als Werkzeug für die Berechnungen dient das Programm SPTRAN zur Simulation des Spaltprodukttransportes in Hochtemperaturreaktoren, welches ursprünglich für Störfallrechnungen konzipiert für Normalbetriebsrechnungen erweitert worden ist.

Die theoretischen Grundlagen, die eingesetzten Programme und die verwendete Datenbasis werden dargestellt, gefolgt von den Ergebnissen der Rechnungen. Diese werden erläutert und diskutiert; ferner werden Konsequenzen und künftige Entwicklungstendenzen aufgezeigt.

Inhalt

1	Einleitung	1
2	Der HTR mit Heliumturbine	3
2.1	Das HHT-Projekt	5
2.2	Die MIT-Konzeptstudie	10
3	Theoretische Grundlagen	13
3.1	Diffusion und Konvektion	15
3.1.1	Feststoffdiffusionskoeffizient	18
3.1.2	Gasdiffusionskoeffizient	18
3.2	Sorption	19
3.3	Stoffübergang	20
3.4	Penetration	21
4	Programmtechnische Grundlagen	25
4.1	Programm SPTRAN	27
4.2	Programmumgebung von SPTRAN	30
4.2.1	Programmpaket V.S.O.P.	33
4.2.2	Programm KUGEL	35
4.2.3	Programm INTKON	38
4.2.4	Graphikprogramme DALI, PLOTTER	39
4.3	Modellierung des Reaktors	40
4.3.1	Anlagenbeschreibung	40
4.3.2	Umsetzung in ein SPTRAN-Modell	42
5	Brennelementrechnung	45
5.1	Datenbasis	46
5.2	Ergebnisse	52

6	Gesamtanlagenrechnung	57
6.1	Datenbasis	58
6.2	Ergebnisse	62
7	Zusammenfassung und Ausblick	67
A	Diskretisierung der Transportgleichungen	69
B	Daten	85
C	Verzeichnis der verwendeten Symbole	91
	Bibliographie	95

Abbildungsverzeichnis

2.1	Prinzipschaltung HHT-Demonstrationsanlage	7
2.2	Anlagenschema HHT-Demonstrationsanlage	9
2.3	Prinzipschaltung MGR-GT	11
2.4	Anlagenschema MGR-GT	12
3.1	Sorptionsmechanismen an Metall	21
4.1	SPTRAN-Programmumgebung und Datenfluß	32
4.2	Aufbau von Brennelement und Coated Particle	35
4.3	Prinzipschaltung kombinierter Gasturbinen-/Dampfturbinenprozeß . .	41
4.4	HTR-Modul Reaktordruckbehälter	42
4.5	Diskretisierungsgitter des Cores	43
5.1	Diffusionskoeffizienten von Cäsium in Brennelementmaterialien	47
5.2	Sorptionsisothermen für Cäsium	50
5.3	Temperaturverlauf für repräsentatives Brennelement	51
5.4	Cs-Konzentrationsverlauf im intakten Coated Particle	52
5.5	Cs-Konzentrationsverlauf im defekten Coated Particle	53
5.6	Konzentrationsverlauf in der Brennelementmatrix	54
5.7	Relative Freisetzung aus repräsentativen Brennelement	55
6.1	Feststofftemperaturen im Core	60
6.2	Cäsiumkonzentration im Reaktor	61
6.3	Cäsiumkonzentration in der Gasphase	62
6.4	Quellterm aus den Brennelementen	63
6.5	Cäsiumverteilung im Bodenreflektor	64
6.6	Freigesetzte Aktivität in 30 Betriebsjahren	65
A.1	Diskretisierungsgitter	71

Tabellenverzeichnis

2.1	Hauptdaten für HHT-Demonstrationsanlage	6
2.2	Spaltproduktfreisetzung HHT-Demonstrationsanlage	8
2.3	Thermodynamische Daten für die MGR-GT Anlage	11
5.1	Brennelementdaten	46
5.2	Frequenzfaktoren und Aktivierungsenergien für Cäsium	46
5.3	Sorptionsdaten für Cäsium	49
6.1	Hauptdaten für HTR-Modul 170 MW	58
6.2	Geometrische Abmessungen im Diskretisierungsgitter	59
B.1	Häufig benötigte Größen, Einheiten und Konstanten	85
B.2	Normierungskonstanten für binäre Diffusionskoeffizienten	86
B.3	Frequenzfaktoren, Aktivierungsenergien und Penetrationskoeffizienten für Sorptionsvorgänge an Metalloberflächen	87
B.4	Referenzdaten zur Sorptionskoeffizientenberechnung	88
B.5	Frequenzfaktoren und Aktivierungsenergien für einige radiologisch relevante Spaltprodukte	90

Kapitel 1

Einleitung

Das Hauptproblem, das sich durch den Betrieb konventioneller Kraftwerke stellt, sind die mit dem Einsatz von fossilen Energieträgern zwangsläufig verbundenen Emissionen. Diese scheinen nach den neueren wissenschaftlichen Erkenntnissen wesentlich gravierender zu sein als bisher angenommen; sogar eine globale klimatische Katastrophe scheint in den Bereich des Möglichen zu rücken. Somit ist in den nächsten Jahren eine neue Grundsatzdiskussion und eine Neuorientierung der Energiepolitik zu erwarten. Dabei wird ernsthaft zu erörtern sein, welchen Beitrag die Kernenergie zu erbringen hat. Andere momentan in der Diskussion befindliche Energieträger wie Solar- und Windenergie werden nur unter günstigen Standortbedingungen rentabel sein oder wie die Energieerzeugung durch Fusionsreaktoren in den nächsten Jahrzehnten noch nicht zur Verfügung stehen.

Der Einsatz zukünftiger nuklearer Anlagen wird sich aufgrund der notwendigen gesellschaftlichen Akzeptanz in deutlich verstärktem Maße an der Frage der Sicherheit messen lassen müssen sowie selbstverständlich der Frage der wirtschaftlichen Konkurrenzfähigkeit gegenüber anderen Energieträgern. In der Sicherheitsfrage wird sich nur eine Anlage realisieren lassen, die inhärent sicher ist und die im Normalbetrieb eine minimale Spaltproduktfreisetzung aufweist. Die Frage der Wirtschaftlichkeit ist sehr schwer beantwortbar, da sie von verschiedenen politischen, ökonomischen und ökologischen Randbedingungen abhängt.

Der Hochtemperaturreaktor (HTR) ist momentan der einzige Reaktortyp, der dem Anspruch der inhärenten Sicherheit prinzipiell genügen kann [26]. Folgt man diesem Sicherheitsgedanken konsequent, darf aufgrund physikalischer Gegebenheiten allerdings eine bestimmte Leistungsgröße des Reaktors nicht überschritten werden, sofern man nicht auf ganz neue Coregeometrien wie beispielsweise Plattenform oder ein Core mit Mittelsäule übergehen will. Dies hat zu der Entwicklung kleinerer Reaktoren in Modulbauweise geführt, die je nach Bedarf entweder modular zu größeren Einheiten zusammengefaßt werden oder als kleine kompakte Anlagen für eine dezentrale Nutzung beispielsweise in Entwicklungsländern zur Verfügung stehen.

Eine wichtige Eigenschaft, die den Hochtemperaturreaktor von allen anderen Reaktortypen unterscheidet und ihm seinen Namen gab, ist die hohe Kühlmittelaustritts-

stemperatur bis zu 950°C. Dies macht ihn zu einer Energiequelle mit vielfältigen Einsatzmöglichkeiten; Dampfturbinenprozesse mit Heißdampfparametern konventioneller Kraftwerke, Gasturbinen- und Kombiprozesse sowie die Prozeßwärmebereitstellung für verschiedenste Verwendungszwecke im Nieder- und Hochtemperaturbereich können mit dem HTR realisiert werden.

Eine weitere hervorragende Eigenschaft des Hochtemperaturreaktors ist die sehr geringe Kontamination des inerten Kühlgases Helium mit Spaltprodukten, welches die Betriebserfahrungen mit dem Jülicher Versuchsreaktor AVR eindrucksvoll belegt haben. Für den Normalbetrieb eines HTR bedeutet dies, daß die Spaltproduktverteilung im Reaktor nur dann genau analysiert zu werden braucht, wenn es sich um Anlagenkonzepte handelt, bei denen wartungsbedürftige Einbauten im Primärkreis vorhanden sind; als Beispiel sei insbesondere auf den geschlossenen Gasturbinenkreislauf verwiesen.

Ein Projekt dieser Art, der Hochtemperaturreaktor als Einkreisanlage mit Heliumturbine, ist in den siebziger Jahren in Angriff genommen worden und zwar für Reaktoren mit hoher Leistung (ca. 1000MW_e) [11]. Die Verwirklichung des Konzeptes scheiterte unter anderem an den vermuteten zu hohen Ablagerungen von radioaktiven Metallen an der Turbine, insbesondere des Alkalimetallisotops Cs¹³⁷.

Aufgrund der kontinuierlichen Verbesserungen der Brennelemente, der drastisch reduzierten Leistung der Reaktoren sowie den Möglichkeiten heutiger Simulationssysteme ist die Fragestellung neu anzugehen, ob beim momentanen Stand der Technik die Spaltproduktfreisetzung gering genug ist, um wartungsbedürftige Einbauten im Primärkreis vorzunehmen; die Konzeptstudie „Einkreisanlage mit kompakter Heliumturbine“ [27] setzt dies beispielsweise als gegeben voraus.

In der vorliegenden Arbeit sollen quantitativ die zu erwartende Freisetzung für den Normalbetrieb eines Hochtemperaturreaktors kleiner Leistung untersucht und bewertet werden. Das Ziel ist dabei nicht eine „worst case“-Abschätzung unter Sicherheitsaspekten, sondern unter Berücksichtigung des momentanen Standes der theoretischen Modellbildung eine Betrachtung anzustellen, die den realiter zu erwartenden Daten möglichst nahe kommt, wobei alle errechneten Daten nur Aussagekraft innerhalb des Gültigkeitsbereiches der verwandten physikalischen Modelle haben. Das Werkzeug hierzu ist das Programm SPTRAN [3]. Dieses Programm ist konzipiert worden, um die im Core und Primärkreislauf bei einem Störfall ablaufenden Spaltprodukttransportprozesse beschreiben zu können. Der Anspruch hierbei war, im Gegensatz zu anderen Programmen einen kompletten Primärkreislauf für beliebige Hochtemperaturreaktoren simulieren zu können. Das Programm ist im Rahmen dieser Arbeit dahingehend erweitert worden, daß zusätzlich auch Rechnungen für den stationären Fall des Normalbetriebes durchgeführt werden können.

Eine Schwierigkeit bei der Behandlung dieses Themas ist die Konzentration der Forschung auf die sicherheitsrelevanten Fragestellungen, d.h. Störfalluntersuchungen. Diesbezüglich liegen eine Vielzahl von experimentell abgesicherten Daten vor, hingegen wäre die normalbetriebsbedingte Freisetzung betreffend eine in einigen Punkten fundiertere Datenbasis für eine erhöhte Aussagesicherheit wünschenswert.

Kapitel 2

Der Hochtemperaturreaktor mit Heliumturbine

Die Verwendung gasgekühlter Kernreaktoren als Energiequelle für geschlossene Gasturbinenprozesse ist ein Gedanke, der schon in der ersten Phase der zivilen Nutzung der Kernenergie entwickelt wurde. Bereits 1946 wurde von C. Keller ein Vorschlag veröffentlicht, einen Kernreaktor von 26 MW Leistung mit einer Gasturbine zu kombinieren. Als Arbeitsmittel wurde schon damals Helium vorgeschlagen, weil es bei guten Wärmeübertragungseigenschaften ein neutrales Verhalten unter Bestrahlung aufweist und chemisch inert ist.

Im Zuge der Reaktorsystementwicklung zeigte es sich, daß im Hochtemperaturreaktor durch die Verwendung von Graphit als Struktur- und Brennelementwerkstoff sowie Moderator Kühlmitteltemperaturen bis zu 950 °C realisiert werden können und somit u.a. ein hohes Potential für geschlossene Gasturbinenprozesse zur Verfügung steht. Der Gesamtwirkungsgrad eines solchen Anlagenkonzeptes kann bei heutzutage technisch realisierbaren Daten zu mehr als 40% angenommen werden. Neben den thermodynamischen Vorteilen spricht für die Gas- bzw. hier Heliumturbine ein im Verhältnis zur Dampfturbine geringerer Bauaufwand sowie der Wegfall des Wasser-Dampf-Kreislaufs; der Wassereinbruch in den Primärkreis ist bei Hochtemperaturreaktoren ein schwerwiegender Störfall, der zu Drucksteigerungen aufgrund von Verdampfung, Reaktivitätssteigerungen aufgrund der Änderung des Moderationsverhältnisses sowie bedingt durch Graphitkorrosion zur Bildung zündfähiger Gasgemische führen kann.

Darüberhinaus besteht die prinzipielle Möglichkeit, die Abwärme im Niedertemperaturbereich als Fernwärme ohne Einbußen bei der elektrischen Energieerzeugung zu nutzen.

Eine weitere Steigerung des Nettowirkungsgrades ist möglich, falls ein kombinierter Gas-/Dampfturbinenprozeß eingesetzt wird; Nettowirkungsgrade über 50% können nach derzeitigem Kenntnisstand durchaus erreicht werden. Diese Kombianlagen, oft unter der Bezeichnung GUD-Anlagen (Gas- und Dampfturbinen-Anlagen) bekannt, werden unter Verwendung konventioneller Energiequellen wie Erdgasfeuerung oder

Druck-Wirbelschichtfeuerung seit Jahren sehr erfolgreich verwendet. Dem Vorteil des sehr guten Gesamtwirkungsgrades eines solchen Kombiprozesses stehen dann jedoch beim Hochtemperaturreaktor die erwähnten Nachteile eines sekundären Wasserkreislaufes und einer merklich größeren Anlagenkomplexität gegenüber.

Die offensichtlichen Vorteile eines geschlossenen Gasturbinenprozesses im Zusammenhang betrachtet mit den bereits in der Einleitung erwähnten günstigen Betriebserfahrungen des AVR-Versuchsreaktors in Jülich bezüglich der Kontamination des Kühlmittels Helium führten im Rahmen des 3. deutschen Atomprogramms zum HHT-Projekt, welches im folgenden Kapitel näher vorgestellt werden soll.

2.1 Das HHT-Projekt

Das HHT-Projekt, als Kürzel für „*Hochtemperaturreaktor mit Heliumturbine großer Leistung*“, hatte als Gegenstand die langfristige Entwicklung eines Hochtemperaturreaktors mit einer Leistung bis zu 3000 MW_{th} als Einkreisanlage mit Heliumturbine. Das Projekt, welches im Zeitraum 1968 bis 1981 bearbeitet wurde, hat über diesen Zeitraum hinweg eine recht unstete Entwicklung erfahren. Eine Vielzahl von Varianten wurden diskutiert und vor allem durch Ausscheiden und Hinzukommen wichtiger Projektpartner wurde das Design weitreichend geändert; das betrifft u.a. die Entscheidungen über integrierte oder nichtintegrierte Bauweise oder die Verwendung von kugel- oder blockförmigen Brennelementen. Insgesamt ist es möglich, vier Hauptphasen festzumachen:

1. Phase 1969 - 1972:
Aufnahme der Projektarbeiten und eines Brennelement-Entwicklungsprogramms; Analyse einer 600 MW_e Demonstrationsanlage.
2. Phase 1973 - 1975:
Systemstudien über integrierte und nichtintegrierte Anlagenkonzepte mit block- und kugelförmigen Brennelementen. Planung einer 3x360 MW_e Referenzanlage¹ auf Basis des Blockcores der General Atomic Company (GAC) mit drei in einen Spannbetonbehälter integrierten, sternförmig angeordneten Gasturbinen ohne Zwischenkühlung. Rückzug von GAC aufgrund der Entwicklung im US-Kernkraftwerksmarkt 1975.
3. Phase 1976 - 1977:
Neuorientierung, nachdem die Beurteilung der Wirtschaftlichkeit ergab, daß das gemeinsame Konzept mit GAC zu unwirtschaftlichen Kompromissen geführt hatte, ohne das Potential der Einkreisanlage auszuschöpfen. Entwurf einer Referenzanlage mit einer den Spannbetonbehälter integrierten Gasturbine, einfacher Zwischenkühlung, Kugelhaufencore und einer Leistung von 1240 MW_e.
4. Phase 1978 - 1981:
Planung des Baus einer HHT-Demonstrationsanlage auf Basis der 1240-MW-Referenzanlage; Ausarbeitung eines schlüsselfertigen Angebots einschließlich erster Teilerrichtungsgenehmigung.

Die Errichtung einer Demonstrationsanlage als Vorläufer einer kommerziellen Großanlage ist während des gesamten HHT-Projekts durchgehend ein zentrales Planungsziel gewesen. Da keine direkten Vorbilder weder in konzeptioneller noch ausle-

¹Grenzleistungsuntersuchungen ergaben, daß für 60 Hz bei Einwellenmaschinen 600 MW maximal realisierbar sind; da dies zu gering für den US-Markt war, erfolgte die Entscheidung zugunsten einer Dreifach-Multiloop-Anlage.

gungsmäßiger Hinsicht existierten, wurde neben Voruntersuchungen und begleitenden Studien der Bau einer HHT-Demonstrationsanlage als konsequent und notwendig angesehen.

Das Grundkonzept sah vor:

- integrierte Bauweise
- Spannbetondruckbehälter mit nicht isolierten Liner
- einstufige Zwischenkühlung bei der Verdichtung
- einwelliger Turbosatz
- trockene Rückkühlung für die Hauptwärmesenke
- Generator im Reaktorschutzgebäude angeordnet
- Kugelhaufenkern mit OTTO-Beschickung
- Verwendung von niedrig angereicherten LEU-TRISO-Brennelementen

Als Leistungsgröße wurde analog zu LWR-Demonstrationsanlagen ein Leistungsbereich von etwa 600 MW_e gewählt. Hierbei ging man davon aus, daß dies ein optimaler Kompromiß zwischen der Nutzung der Erfahrung aus kleineren Prototypanlagen, Extrapolierbarkeit auf Großanlagen, Investitionsbedarf und -risiko ist. Die wichtigsten Daten für die HHT-Demonstrationsanlage sind in der Tabelle 2.1 aufgeführt:

Thermische Leistung	1640	[MW]
Corehöhe	5.54	[m]
Coredurchmesser	8.3	[m]
Reaktordruckbehälter		
Höhe	46	[m]
Durchmesser	46	[m]
Mittlere Leistungsdichte	5.5	[MW/m ³]
Kühlmittel	Helium	
Kühlmittelstrom	757.1	[kg/s]
Gaseintrittstemperatur	457	[°C]
Gasaustrittstemperatur	850	[°C]
Reaktordruck	70	[bar]
Anzahl der Brennelemente	1.6 · 10 ⁶	
Art der BE-Beschickung	OTTO	

Tabelle 2.1: Hauptdaten für HHT-Demonstrationsanlage

Das Kraftwerk wurde ausgelegt auf eine 40-jährige Nutzungsdauer bei einem mittleren Ausnutzungsfaktor von 0.8 sowie einer großen Turbinenrevision alle 6-8 Jahre.

Die Primärkreislaufkomponenten sollten inspizierbar und reparierbar sein, so daß ein Stilllegungsrisiko hinreichend ausgeschlossen werden kann. Die Abbildung 2.1 zeigt die Prinzipschaltung des Hauptkühlsystem sowie die wichtigsten thermodynamischen Daten; das Hauptkühlsystem besteht aus dem primären Heliumkreislauf und dem sekundären Wasserkreislauf zur Abfuhr der Abwärme aus den Vor- und Zwischenkühlern.

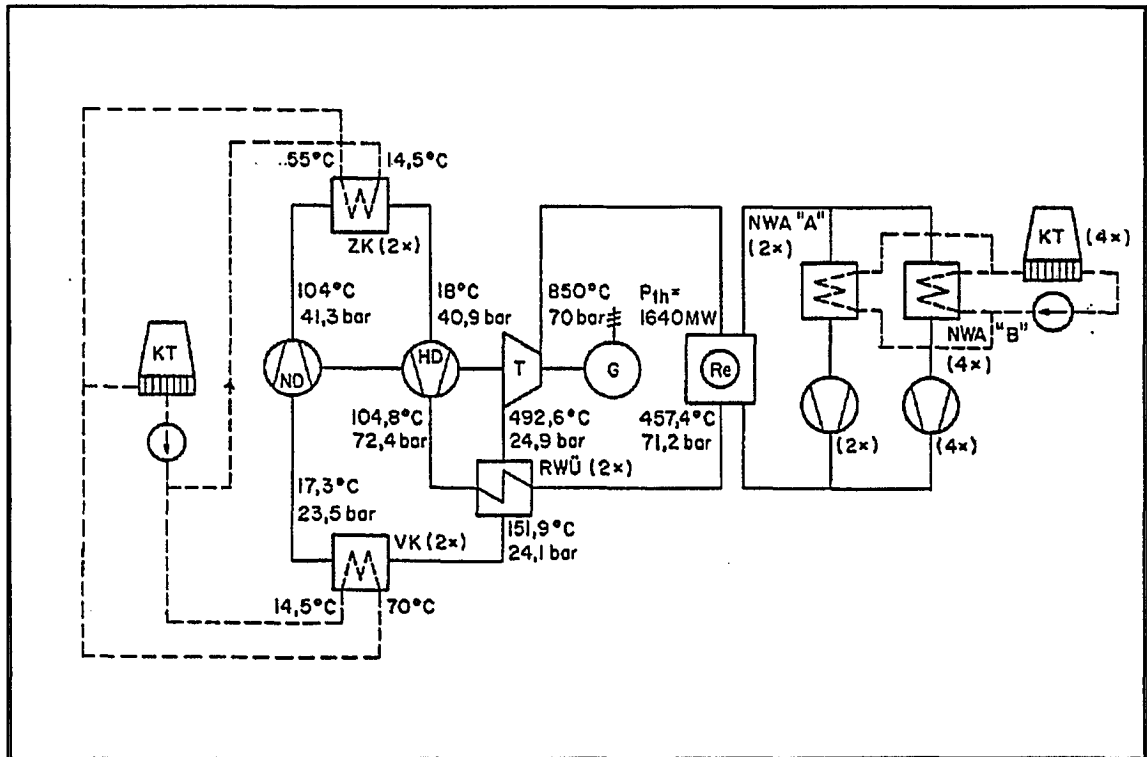


Abbildung 2.1: Prinzipschaltung HHT-Demonstrationsanlage

Die Gesamtanordnung der Primärkreiseinbauten im Reaktordruckbehälter zeigt die Abbildung 2.2 auf Seite 9; die Heliumturbine ist waagrecht unterhalb des Cores angeordnet, die Gebläse und Wärmetauscher stehend seitlich.

In der abschließenden Bewertung der HHT-Demonstrationsanlage kamen die beteiligten Projektpartner und Energieversorgungsunternehmen zu der Entscheidung, daß der Zeitbedarf bis zur Vorlage eines vergabereifen Angebotes und der zweiten Teilerrichtungsgenehmigung nicht ausreichen würde, um das HHT-Projekt zum Anschlußprojekt des THTR-300 in Hamm-Uentrop zu machen. Eine Zweikreisanlage wurde als schneller und mit geringerem Aufwand realisierbar eingeschätzt und der HHT-Anlage bestätigt, daß sie zwar baubar, aber hinsichtlich der Einfachheit² und Wirtschaftlichkeit noch nicht befriedigend.

²Zum Vergleich: Der Spannbetondruckbehälter des THTR-300 hat einen Außendurchmesser von ca. 25m, also gut die Hälfte der HHT-Anlage.

Für diese Arbeit sind die damaligen Ergebnisse der Spaltproduktrechnungen von Interesse. Die Rechnungen zur Spaltproduktfreisetzung sind mit dem Programm SLIPPER und die Ablagerungsrechnungen mit dem Programm PATRAS durchgeführt worden. SLIPPER umfaßte die Diffusionsrechnung in einer einzelnen Kugel; die so gewonnenen Freisetzungswerte wurden auf den Gesamtreaktor extrapoliert und dann auf die Primärkreiseinbauten rechnerisch mit PATRAS verteilt. Bedauerlicherweise sind in den Unterlagen nur in knappster Form die numerischen Endergebnisse enthalten; von den radiologisch relevanten Isotopen wie insbesondere Cs^{137} , Cs^{134} , $\text{Ag}^{110\text{m}}$, Sr^{90} und Co^{60} werden, wie die folgende Tabelle aus der Studie zeigt, dreien größere Bedeutung zugemessen.

Spaltprodukt	Cs-134	Cs-137	Ag 110m
Erwartungswert	36	44	1.8
Auslegungswert	180	220	18

Tabelle 2.2: Spaltproduktfreisetzung (Ci/Vollastjahren) HHT-Demonstrationsanlage [11]

Der überwiegende Teil der Spaltproduktablagerungen wurde auf der Eingangsseite der Rekuperatoren erwartet. Die Heliumturbine sollte die Lebensdauer der Gesamtanlage erreichen und periodisch dekontaminiert werden. Aufgrund des hohen Kostenanteils der aufwendigen Turbinenkonstruktion wurde eine Auswechslung statt Dekontamination nicht in Betracht gezogen.

Die Ergebnisse des HHT-Projekts sind in einer 43-bändigen Berichtsreihe zusammengetragen, weshalb hier nur auf den Abschlußband [11] verwiesen werden soll, der das Projekt umfassend resümiert.

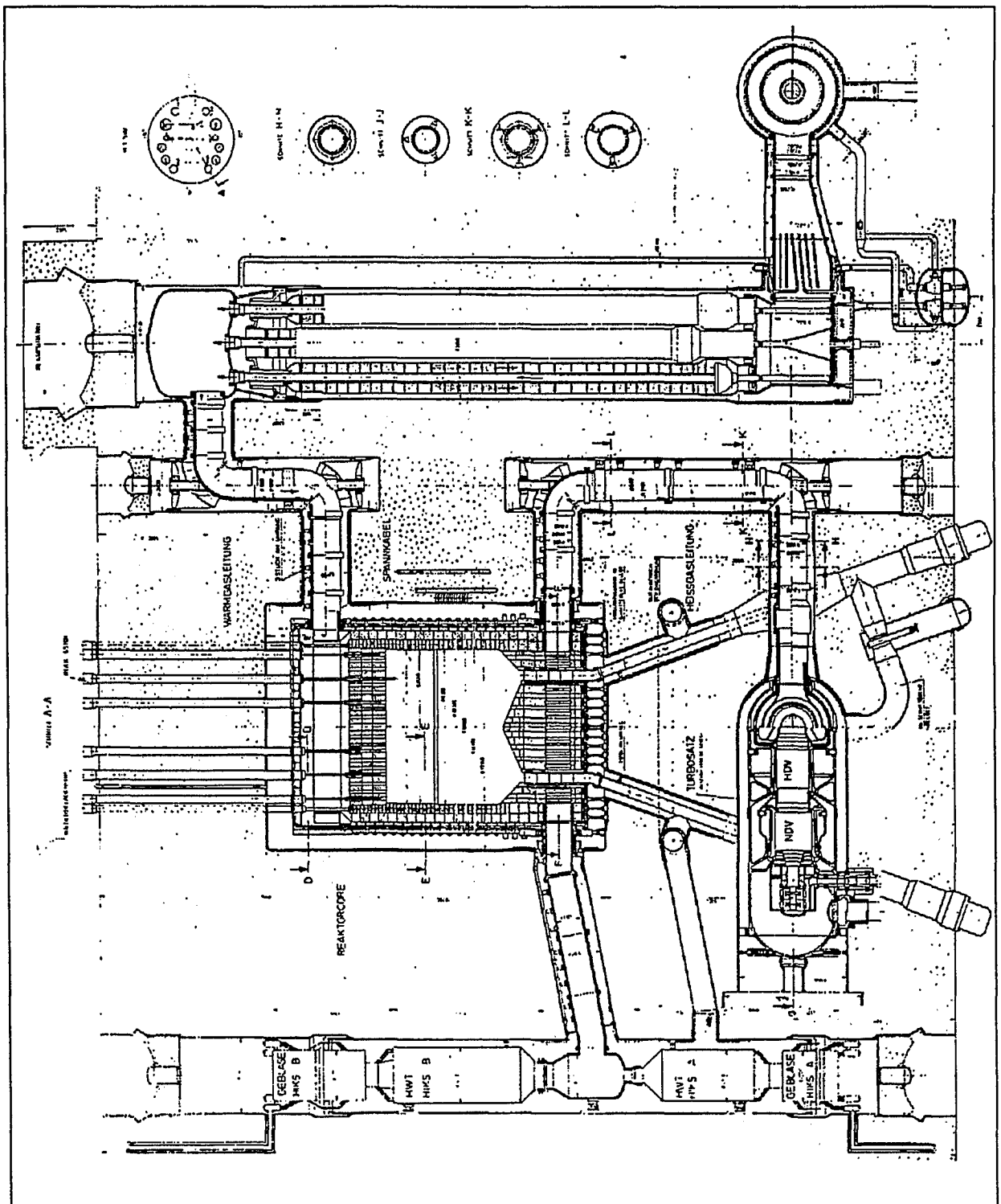


Abbildung 2.2: Anlagenschema HHT-Demonstrationsanlage

2.2 Die MIT-Konzeptstudie

Am Massachusetts Institute of Technology (MIT) ist aufbauend auf den Ergebnissen bisheriger weltweiter HTR-Forschung – insbesondere auch des HHT-Projekts – vor einigen Jahren eine Konzeptstudie für einen Hochtemperaturreaktor als Einkreisanlage mit Heliumturbine erarbeitet worden [27]. Die Anlage sollte insbesondere diejenigen Ansprüche an Einfachheit und Wirtschaftlichkeit aufweisen, die im HHT-Projekt als fehlend bemängelt wurden. Vorschlagen wird, einen kleinen HTR-Reaktor der Größenordnung des Siemens HTR-Modul zu verwenden, um kleine, kompakte Anlagen zur dezentralen Energieversorgung anbieten zu können. Da nach den negativen Erfahrungen bei großen Reaktoranlagen (Three Mile Island, Tschernobyl) zu Recht erheblicher Wert auf inhärent sichere und damit zwangsläufig kleinere Reaktoren gelegt wird, ist es solches Konzept in der Lage, auch diese Ansprüche konsequent zu erfüllen.

Für das als *Modular Gas Reactor with Gas Turbine* (MGR-GT) bezeichnete Konzept werden in der Studie folgende Auslegungsprinzipien aufgeführt:

- Das System wird unterirdisch in einem Silo untergebracht.
- Die Gasführung ist so gestaltet, daß das zurückströmende Helium den Reaktordruckbehälter kühlt.
- Der Behälter für alle Primärkreiseinbauten soll möglichst klein sein und die Größe des Reaktordruckbehälters nicht überschreiten.
- Innerhalb der Koaxialleitung sollen minimale Druckdifferenzen herrschen.
- Der Primärkreis soll minimale Druckverluste bezüglich der Gasführung aufweisen.
- Die Turbomaschineneinheit wird vertikal plazierte, so daß eine leichte Entfernung aus dem unterirdischen Silo möglich ist.
- Leichter Zugang zu den Wärmetauschern, insbesondere zum Vorkühler, zum Zwecke der Wartung und Instandhaltung.

Die Studie befaßt sich ausführlich mit der thermodynamischen und konstruktiven Auslegung. Bezüglich der hier interessierenden Frage der Spaltproduktfreisetzung und der damit verbundenen Problematik der Kontamination der Turbomaschineneinheit werden keine Aussagen gemacht. Man geht davon aus, daß durch die momentan zur Verfügung stehende Brennelemente eine hinreichend geringe Freisetzung gewährleistet wird; für den Fall einer zu hohen Belastung wird nicht näher vertieft auf die Möglichkeit der Dekontamination oder des Austauschs verwiesen.

Die Optimierung bezüglich der Thermodynamik führte zu folgenden in der umseitigen Tabelle 2.3 zusammengefassten Daten:

Thermische Leistung	200	[MW]
Kühlmittel	Helium	
Kühlmittelstrom	150	[kg/s]
Gaseintrittstemperatur	593	[°C]
Gasaustrittstemperatur	850	[°C]
Reaktordruck	80	[bar]

Tabelle 2.3: Thermodynamische Daten für die MGR-GT Anlage

Die Prinzipschaltung in Abbildung 2.3 zeigt, daß für die Anlage ein geschlossener Gasturbinenprozeß mit einstufiger Verdichtung, d.h. ohne Zwischenkühlung vorgesehen ist. Der Einfachheit und Kompaktheit wurde der Vorzug vor einem höheren Wirkungsgrad gegeben, der durch eine zweistufige Verdichtung mit Zwischenkühlung erreicht wird.

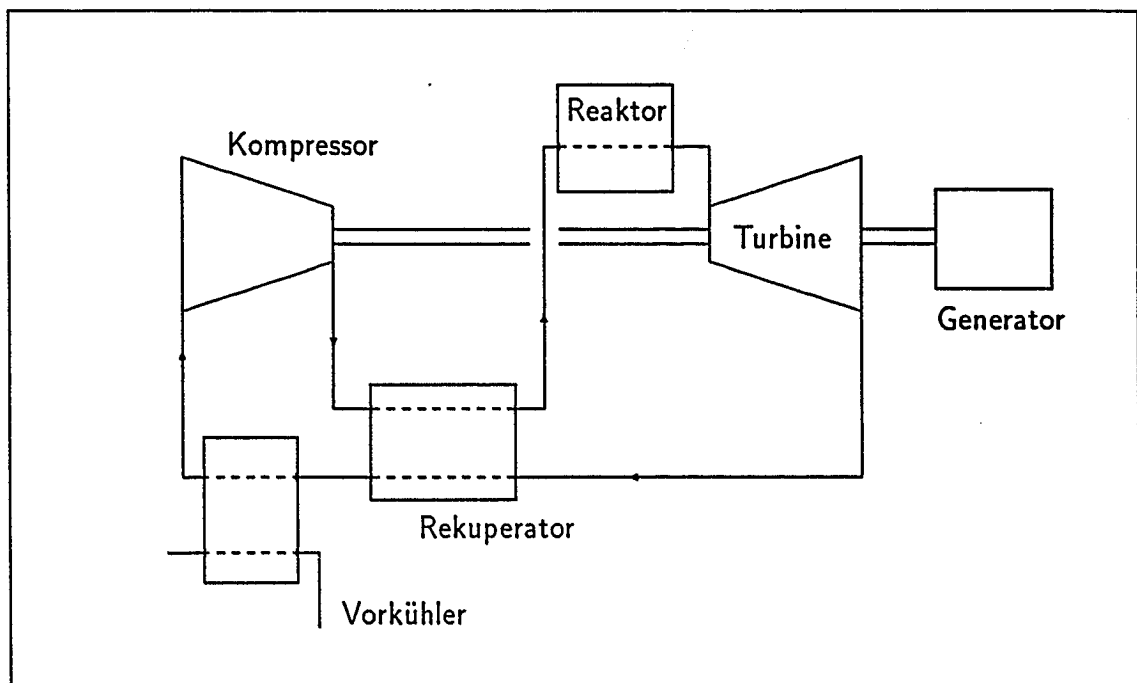


Abbildung 2.3: Prinzipschaltung MGR-GT, nach [27]

Das Anlagenschema mit Darstellung der wichtigsten Komponenten in Abbildung 2.4 auf Seite 12 gibt eine erste Vorstellung, wie eine solche HTR-Einkreisanlage mit Heliumturbine konstruktiv gestaltet werden könnte. Im linken Teil des Reaktorgebäudes befindet sich der Reaktordruckbehälter, im rechten alle wesentlichen Primärkreiseinbauten verbunden durch zwei Koaxialleitungen. Man erkennt gut, wie kompakt die Turbomaschineneinheit mit den wärmetauschenden Elementen Rekuperator und Vorkühler gestaltet ist.

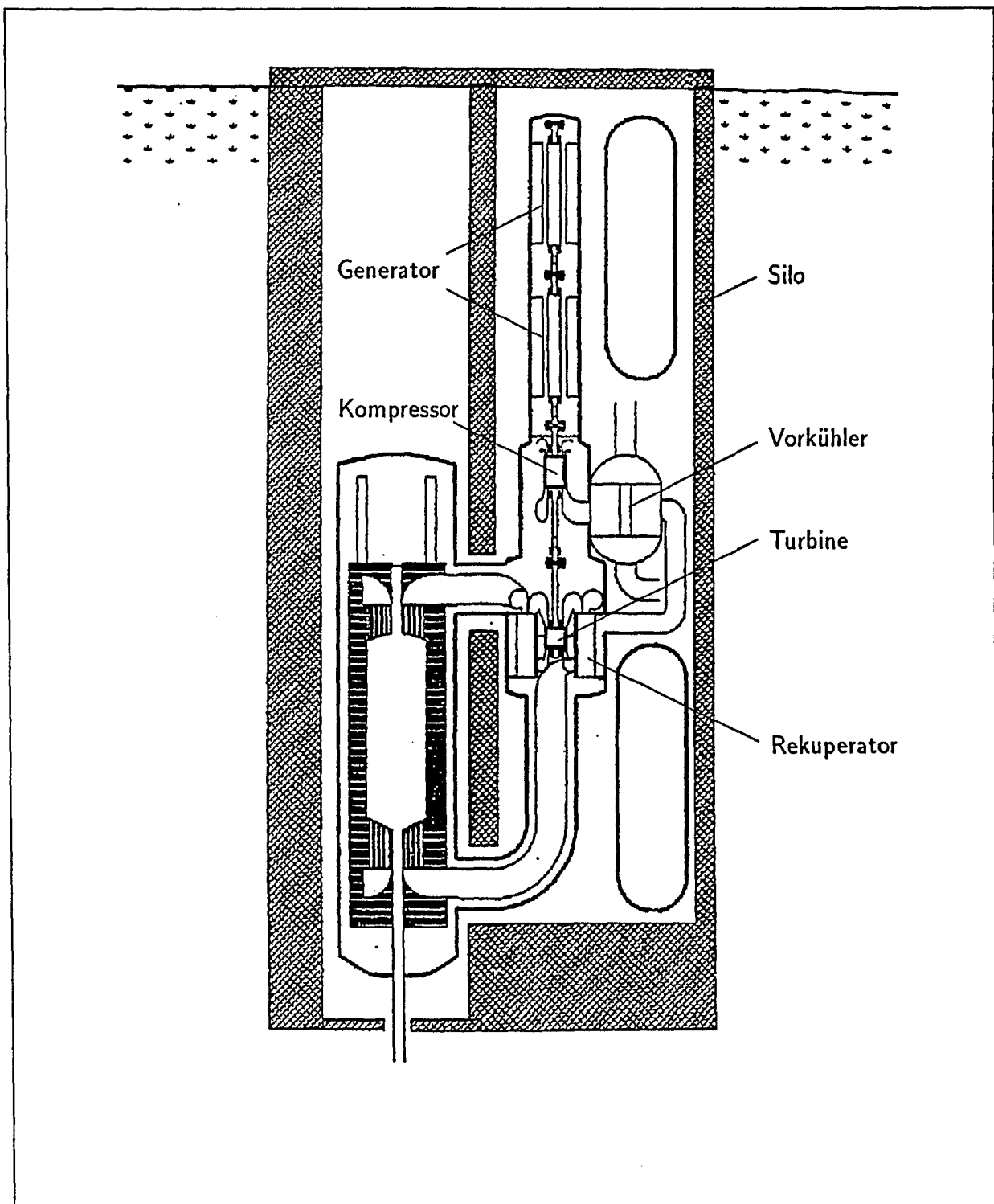


Abbildung 2.4: Anlagenschema MGR-GT [27]

Kapitel 3

Theoretische Grundlagen der Spaltprodukttransportrechnung

Der Transport von Spaltprodukten in einem Reaktor beruht auf einer Vielzahl physikalischer Mechanismen und Effekte. Die Beschreibung dieser komplexen Prozesse durch geeignete Modelle ist Gegenstand langjähriger, intensiver und erfolgreicher Forschungsarbeit, jedoch ist die Problematik bis heute noch nicht vollständig geklärt, so daß Forschung und Diskussion zwecks Verbesserung andauern.

Bei Hochtemperaturreaktoren, deren Core und Brennelemente im wesentlichen aus graphitischen Materialien bestehen, kommt einer möglichst exakten Beschreibung des Spaltprodukttransportes im heterogenen Werkstoff Graphit besondere Bedeutung zu. Im Regelfall verläuft eine Freisetzung von Spaltprodukten im HTR vereinfacht in folgender Weise, wobei die Modellvorstellungen, die hier zur Beschreibung jeweils Verwendung finden, mit aufgeführt sind:

- Transport der Spaltprodukte im Feststoff Graphit (Coated Particles und Brennelemente) in Richtung Brennelementoberfläche; Beschreibung durch effektive Diffusion mit Zerfallstermen und Quellen.
- Übergang der Spaltprodukte von der Feststoffoberfläche in eine Gasphasengrenzschicht; Beschreibung durch Sorptionsisothermen, d.h. ein sich sofort einstellendes Sorptionsgleichgewicht.
- Übergang aus der Gasphasengrenzfläche in die umgebende Gasströmung; Beschreibung durch Stoffübergangsgesetze.
- Transport der Spaltprodukte im Gas; Beschreibung durch Konvektion und effektive Diffusion mit Zerfallstermen und Quellen.

Die im Kühlgas Helium enthaltenen Spaltprodukte können sich im Reaktor an Oberflächen wiederanlagern, falls die physikalischen Bedingungen wie niedrigere Temperaturen und geringere Kühlgasgeschwindigkeiten dafür gegeben sind.

Bei graphitischen Materialien wird die Anlagerung unter Verwendung der gleichen Modellvorstellungen wie bei der Freisetzung – bei Umkehr der Transportrichtung – beschrieben; die Modellvorstellung bei metallischen Werkstoffen ist ähnlich, jedoch wird angenommen, daß keine Diffusion in die Tiefe erfolgt, sondern ein Teil der Spaltprodukte irreversibel unter die Oberfläche penetriert.

Leider sind die Kenntnisse auf dem Gebiet der Wechselwirkungen zwischen metallischen Spaltprodukten und metallischen Werkstoffen noch verhältnis gering. Aufgrund beispielsweise der Betriebserfahrungen der AGR-Reaktoren ist bekannt, daß sich im Laufe der Zeit dicke Oxidschichten auf den metallischen Oberflächen bilden können. Belastbare mathematische Modelle zur Beschreibung der Ablagerungen auf Metall besonders unter dem Aspekt zunehmender Oberflächenoxidation stehen zur Zeit leider nicht zur Verfügung, sind aber Gegenstand laufender Forschungsarbeiten.

Aus diesen Gründen wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, daß alle Spaltprodukte, die den Reaktor durch den Bodenreflektor via Kühlmittel verlassen, sich vollständig auf den zu untersuchenden Primärkreiseinbauten ablagern; alle weiteren Metalloberflächen bleiben unberücksichtigt. Dies ist für den Normalbetrieb eine konservative Annahme und hier um so leichter möglich, da im aktiven Core des untersuchten Reaktors keine Metallflächen existieren, die mit dem spaltproduktthaltigen Heliumkühlmittelstrom in Berührung kommen.

Das Programm SPTRAN als Werkzeug der Spaltprodukttransportrechnung beinhaltet die in den folgenden Abschnitten erläuterten Modelle. Die mathematische Umsetzung der physikalischen Transportmodelle im Programm SPTRAN ist sehr aufwendig. Da jedoch gerade der Schritt der Umsetzung der gekoppelten Differentialgleichungssysteme in die numerische Lösung essentiell für das Verständnis des Programmquelltextes von SPTRAN ist, findet sich im Anhang A für den kompliziertesten Fall, dies ist die Transportgleichung 3.7, der komplette Rechnungsgang der Diskretisierung.

Im Rahmen dieser Arbeit kann bedauerlicherweise weder ein umfassender Überblick über den gegenwärtigen Stand gegeben werden noch die Modellbildung und -auswahl näher erörtert werden. Bezüglich der physikalischen und technischen Grundlagen der Hochtemperaturreaktortechnik sei deshalb auf [16] verwiesen; dort werden alle wesentlichen Aspekte erläutert und für weitergehende Detailfragestellungen findet der Leser eine sehr umfangreiche Literaturliste. Bezüglich der spezielleren Thematik der Spaltproduktfreisetzung findet sich in [21] eine ausführliche Beschreibung der Modelle, Daten und Programme.

3.1 Diffusion und Konvektion

Der Spaltprodukttransport in den *Feststoffen*, das sind im HTR die graphitischen Werkstoffe, wird durch „einphasige Fick'sche Diffusion“ beschrieben.

Dabei wird durch das 1. Fick'sche Gesetz ein Zusammenhang zwischen einem resultierenden Fluß $\vec{j}$ von gleichartigen Teilchen und dem Gradienten der Konzentration C dieser Teilchensorte hergestellt; die Differentialgleichung lautet:

$$\vec{j} = -D \cdot \text{grad } C \quad (3.1)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
D	$[m^2/s]$	:	Diffusionskoeffizient
$\vec{j}$	$[1/m^2s]$	:	Fluß

Hierbei wird der Fluß $\vec{j}$ meist als Diffusionsstromdichte bezeichnet; das sind also die Anzahl der Teilchen pro Zeiteinheit, die die Flächeneinheit passieren. Die Diffusionsrichtung ist dabei dem Gradienten der Konzentration entgegengesetzt, wie es das Minuszeichen andeutet.

Nimmt man die Kontinuitätsbedingung hinzu, die eine Aussage über die Divergenz des Vektorfeldes $\vec{j}$ liefert,

$$\text{div } \vec{j} + \frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (3.2)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
$\vec{j}$	$[1/m^2s]$	:	Fluß
t	$[s]$	:	Zeit

kommt man durch Kombination beider Gleichungen zum 2. Fick'schen Gesetz:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D \cdot \text{grad } C) \quad (3.3)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
D	$[m^2/s]$	:	Diffusionskoeffizient
t	$[s]$	:	Zeit

Diese Formulierung der Fick'schen Diffusion bedeutet strenggenommen, daß allein das Konzentrationsgefälle die treibende Kraft ist; Gradienten des chemischen Potential gehen somit nicht ein.

Unter Berücksichtigung von Quellen und Senken kommt man schließlich auf die Transportgleichung, die nun für den allgemeinen Fall lautet:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div}(D_{eff} \cdot \operatorname{grad} C) - \lambda \cdot C + \dot{Q}''' \quad (3.4)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
D_{eff}	$[m^2/s]$	:	effektiver Diffusionskoeffizient
λ	$[1/s]$	:	Zerfallskonstante
$\dot{Q}'''$	$[1/m^3s]$	:	Quelle
t	$[s]$	:	Zeit

Neben dem Ansatz der Fick'schen Diffusion enthält die Transportgleichung also einen Verlustterm, der den radioaktiven Zerfall und einen Quellterm, der die Entstehung des betrachteten Nuklids durch Spaltung und Vorläuferisotop berücksichtigt. Rechentechnisch werden über den Quellterm auch die Coated Particles und die Brennelementmatrix gekoppelt.

Die Struktur des Werkstoffes Graphit, so wie er im Reaktor Anwendung findet, ist komplexer als es dieses Modell wiedergeben kann, das einen homogenen Feststoff voraussetzt. Die polykristallinen Reaktorgraphite entstehen durch Pressung von Koks Körnern; diese werden mit kohlenstoffhaltigem Binder vermischt, gepresst und anschließend thermisch behandelt¹. Die sehr guten Rückhalteeigenschaften der Graphite beruhen im wesentlichen auf den eingesetzten Binderstoffen. Einfluß auf das Diffusionsverhalten in den Graphiten hat die herstellungsbedingt vorhandene offene wie geschlossene Porosität. Es ist leicht einzusehen, daß ein solches Diffusionsmodell nur eine erste Näherung an die tatsächlich ablaufenden Vorgänge sein kann. Da das kugelförmige Brennelement des HTR rotationssymmetrisch ist und die graphitischen Reaktoreinbauten hinreichend genau als halbumendliche Platten aufgefasst werden können, reicht hier für alle Anwendungsfälle, in denen Diffusionsvorgänge in Feststoffen betrachtet werden, eine eindimensionale Formulierung der Transportgleichung,

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{x^n} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff}(T(x,t)) \cdot x^n \cdot \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right) - \lambda \cdot C(x,t) + \dot{Q}'''(x,t) \quad (3.5)$$

wobei der Parameter n von der Geometrie abhängig ist:

$n = 0$:	Stabgeometrie
$n = 1$:	Zylindergeometrie
$n = 2$:	Kugelgeometrie

¹Die Struktur der Graphite ist z.B. in [18] näher erläutert. Die Problematik der Modellierung solcher Strukturen ist Gegenstand von [6].

Der Transport der Spaltprodukte im Gas beruht auf den Mechanismen Diffusion und Konvektion; die Diffusion wird wie bei den Feststoffen durch „einphasige Fick'sche Diffusion“ beschrieben.

Im Fall des Normalbetriebs ist der Anteil der Diffusion gegenüber der Konvektion aufgrund der hohen Gasgeschwindigkeit vollständig vernachlässigbar; für Störfallrechnungen hingegen kann der Diffusionsterm eine nicht unerhebliche Bedeutung haben, wenn beispielsweise nach einer Druckentlastung des Reaktors Naturkonvektion mit vergleichsweise sehr geringen Kühlgasgeschwindigkeiten einsetzt.

Die Transportgleichung 3.4 wird somit um den konvektiven Anteil $\text{div}(\vec{v} \cdot C)$ erweitert:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D_{eff} \cdot \text{grad } C) - \text{div}(\vec{v} \cdot C) - \lambda \cdot C + \dot{Q}''' \quad (3.6)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
D_{eff}	$[m^2/s]$	:	effektiver Diffusionskoeffizient
$\dot{Q}'''$	$[1/m^3s]$	:	Quelle
$\vec{v}$	$[m/s]$	:	Geschwindigkeitsvektor
λ	$[1/s]$	:	Zerfallskonstante
t	$[s]$	:	Zeit

Der Spaltprodukttransport im Kühlgas wird im Core zweidimensional behandelt. In Zylindergeometrie mit r als radialer und z als axialer Ortskoordinate lautet die Transportgleichung in allgemeiner Form:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial t} = & - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C(r, z, t) \cdot u(r, z, t) \cdot r) \\ & - \frac{\partial}{\partial z} (C(r, z, t) \cdot v(r, z, t)) \\ & + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{eff}(T(r, z, t)) \cdot r \cdot \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{eff}(T(r, z, t)) \cdot \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial z} \right) \\ & - \lambda \cdot C(r, z, t) + \dot{Q}'''(r, z, t) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Im Normalbetrieb des Reaktor sind die Komponenten der Strömungsgeschwindigkeit in axialer Richtung wesentlich größer als die in radialer Richtung, so daß nur bei langsamen Strömungen, wie sie wie bereits erwähnt bei Störfallrechnungen vorkommen können, tatsächlich ein zweidimensionales Strömungsfeld vorliegt.

Außerhalb des Reaktorcores genügt zur Beschreibung des Transportes im Gas die eindimensionale Darstellung in Stabgeometrie. Gleichung 3.7 mit x als Ortskoordinate vereinfacht sich zu:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x} (C(x,t) \cdot v(x,t)) \\
& + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff}(T(x,t)) \cdot \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right) \\
& - \lambda \cdot C(x,t) + \dot{Q}''(x,t)
\end{aligned} \tag{3.8}$$

3.1.1 Feststoffdiffusionskoeffizient

Die Transportgeschwindigkeit der Spaltprodukte in den Feststoffen wird durch den effektiven Diffusionskoeffizienten bestimmt.

Aus der Diffusionsgleichung 3.5 ist ersichtlich, daß die Temperaturabhängigkeit des Spaltprodukttransports allein über den Diffusionskoeffizienten berücksichtigt wird. Dieser wird üblicherweise in der Form einer Arrheniusbeziehung angegeben. Die in der folgenden Gleichung 3.9 vorgenommene Aufteilung in einen Hochtemperatur- und einen Niedertemperaturast trägt der Tatsache Rechnung, daß nicht alle Materialien eine konstante Aktivierungsenergie aufweisen, d.h. dies ist ein Hinweis darauf, daß nicht nur reine Diffusionsprozesse stattfinden.

$$D_{eff} = D_0 \cdot e^{-\frac{Q}{RT}} + D'_0 \cdot e^{-\frac{Q'}{RT}} \tag{3.9}$$

$D_{eff} [m^2/s]$	:	effektiver Diffusionskoeffizient
$D_0 [m^2/s]$	:	Frequenzfaktor
$Q [J/mol]$	:	Aktivierungsenergie
$R [J/mol K]$	:	allgemeine Gaskonstante
$T [K]$	:	Temperatur

Die Daten zur Berechnung der effektiven Diffusionskoeffizienten werden experimentell bestimmt. Für die SiC-Beschichtung sind die Experimente von Allelein [1] an Coated Particles zu nennen, für die graphitischen Materialien die Experimente des Hahn-Meitner-Instituts [8] an kleinen Proben. Der HBK-Standarddatensatz faßt als Referenzdatenbasis für den Normalbetrieb die Erkenntnisse der effektiven Diffusionskoeffizienten betreffend zusammen; er wird in Abständen auf den neuesten Stand gebracht. Die aktuelle Datenbasis, die allen Berechnungen dieser Arbeit zugrunde liegt, ist im Anhang B, Seite 89f aufgeführt.

3.1.2 Gasdiffusionskoeffizient

Der diffusive Transport der Spaltprodukte im Gas wird durch einen binären Gasdiffusionskoeffizienten beschrieben. Der ursprünglich in SPTRAN enthaltende Ansatz zur Berechnung des binären Diffusionskoeffizienten (siehe [3], Seite 27ff) ist durch

eine deutlich einfachere Beziehung [2, 29] ersetzt worden. Diese Größengleichung erspart einigen Rechenaufwand ohne relevante Genauigkeitsverluste.

$$D_{bin} = D_0 \cdot \left(\frac{T}{273} \right)^{1.69} \cdot \frac{1}{p} \quad (3.10)$$

$D_{bin} [m^2/s]$	:	binärer Gasdiffusionskoeffizient
$D_0 [m^2/s]$	:	Normierungskonstante, von der Art des Gases und des Spaltproduktes abhängig
$p [bar]$	:	Druck
$T [K]$	:	Temperatur

Der Wert bei der Paarung Helium/Cäsium ist $D_0 = 4.305 \cdot 10^{-5} [m^2/s]$. Werte für andere Kombinationen Gas/Spaltprodukt können bei Bedarf dem Anhang B, Seite 86 entnommen werden. Im Programm SPTRAN ist als Kühlgas zur Zeit nur Helium implementiert; für den Einsatz anderer Gase müssen in einigen Unterprogrammen stoffspezifische Daten und Beziehungen geändert werden.

3.2 Sorption

Der Übergang der Spaltprodukte aus der Brennelementmatrix in eine Gasphasengrenzfläche wird beschrieben durch Sorptionsisothermen. stellen den Gleichgewichtszustand zwischen der Konzentration C auf der Graphitoberfläche², der Temperatur T und dem Partialdruck p in der umgebenden Gasphase dar. Dieser Zusammenhang ist experimentell für jeden Werkstoff und jedes chemische Element zu ermitteln. Unter Berücksichtigung der Boltzmann-Gleichung für ideale Gase $p = k \cdot T \cdot C_{gas}$ läßt sich der Sorptionskoeffizient α formulieren als

$$\alpha = \frac{C_{gas}}{C_{gr}} = \begin{cases} \frac{1}{T} \cdot e^{(A_H + \frac{B_H}{T})} & \text{für } C_{gr} < C_t \\ \frac{1}{T} \cdot e^{(A_F + \frac{B_F}{T})} \cdot C_{gr}^{(D_F + \frac{E_F}{T})} & \text{für } C_{gr} > C_t \end{cases} \quad (3.11)$$

α	:	Sorptionskoeffizient
$C_{gas} [1/m^3; mMol/kg; \dots]$	:	Konzentration in der Gasphasengrenzschicht
$C_{gr} [1/m^3; mMol/kg; \dots]$	:	Konzentration auf der Graphitoberfläche
$C_t [1/m^3; mMol/kg; \dots]$	:	Grenzkonzentration
$T [K]$	:	Temperatur

²Sorption ist genau genommen die Anlagerung überall im Graphit, nicht nur ein Oberflächeneffekt; das Rechenmodell kann jedoch nur eine oberflächennahe Schicht berücksichtigen.

Diese Gleichung entsteht durch Fitting von Meßwerten, ist also eine Größengleichung. Die Koeffizienten sind folglich in ihrer numerischen Größe direkt abhängig von den Einheiten, mit denen im Experiment gemessen wurde³.

Es werden zwei Bereiche unterschieden, der sogenannte *Henry-Bereich* (Index H) unterhalb der Grenzkonzentration C_t und der *Freundlich-Bereich* (Index F) oberhalb. Im Henry-Bereich sind für alle Spaltprodukte genügend Sorptionsplätze auf der Graphitoberfläche vorhanden, der Partialdruck p steigt proportional zur Konzentration an. Im Freundlich-Bereich sind alle energetisch günstigen Sorptionsplätze bereits belegt, die Spaltprodukte müssen auf Stellen schwächerer Sorption ausweichen, der Partialdruck p steigt überproportional an.

Die Sorptionsisothermen sind bei den Freisetzungsberechnungen eine wichtige Einflußgröße. Dies wird bei der Bestimmung der Quellterme in der Brennelement- als auch in der Gesamtanlagenrechnung deutlich werden; daher sei an dieser Stelle auf die Erläuterung der Datenbasis in Kapitel 5.1, Seite 48 hingewiesen.

3.3 Stoffübergang

Für den Stoffübergang zwischen Gasphasengrenzfläche und dem umgebenden Gas gilt eine zum Wärmetransport analoge Beziehung; der Wärmeübergangskoeffizient α wird durch den Stoffübergangskoeffizient h ersetzt. Der Stoffstrom wird somit durch die folgende Gleichung beschrieben:

$$\dot{Q}_{Gas-Gas\infty} = A \cdot h \cdot (C_{Gas} - C_{Gas\infty}) \quad (3.12)$$

$\dot{Q}$	[1/s]	: Stoffstrom
A	[m ²]	: Oberfläche
h	[m/s]	: Stoffübergangskoeffizient
C	[1/m ³]	: Konzentration

Entgegen der üblichen Notation soll der Stoffübergangskoeffizient mit h bezeichnet werden; dies dient der Unterscheidung gegenüber dem im nächsten Abschnitt eingeführten Penetrationskoeffizienten β .

Der Stoffübergangskoeffizient ist seinerseits abhängig von der Sherwoodzahl, dem Gasdiffusionskoeffizienten und der Geometrie, wobei das Programm SPTRAN in seiner jetzigen Version als Geometrien Kugelschüttungen, Rohre und Rohrbündel behandeln kann.

³Die verschiedenen Maßeinheiten für die Konzentrationen C_i in Gleichung 3.11 sollen dies andeuten.

3.4 Penetration

Für das Ablagerungsverhalten auf metallischen Oberflächen liegen wie eingangs des Kapitels bereits erwähnt noch keine wirklich belastbaren Modelle vor. Ein erster Ansatz der Beschreibung ist allerdings bereits im Programm SPTRAN enthalten. Es handelt sich um die Übernahme des Modelles, welches mit dem Programm PLATO [7] getestet wurde.

Das Modell soll in seinen wichtigsten Grundlagen und Gleichungen hier noch einmal wiedergegeben werden; weniger aus dem Grund, daß den Ablagerungen auf Metalloberflächen größere Bedeutung zugemessen würde, als daß die Darstellung in [3] Unkorrektheiten in den resultierenden Gleichungen aufweist. Diese wurden leider auch in das SPTRAN-Programm übernommen mit der Folge, daß drastisch überhöhte Ablagerungen an Metallen errechnet wurden.

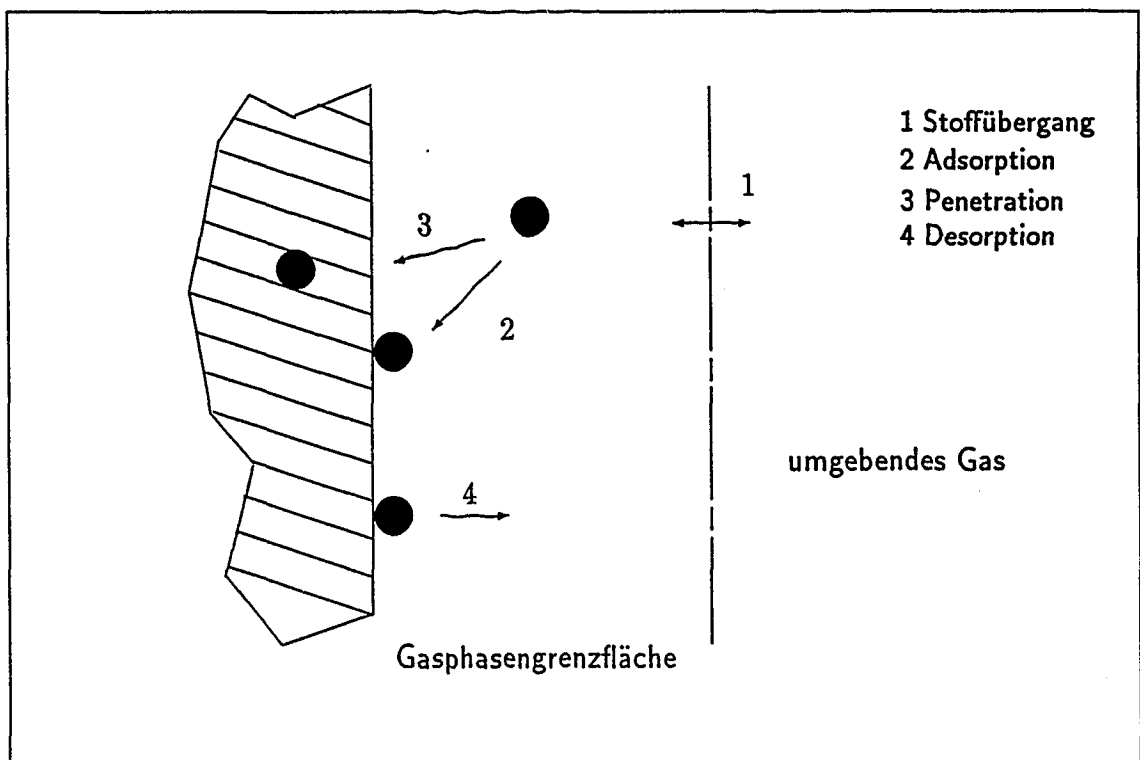


Abbildung 3.1: Sorptionsmechanismen an Metall

Das Ablagerungsmodell entsteht durch Betrachtung von vier in Abbildung 3.1 dargestellten Transportmechanismen:

1. Stoffübergang zwischen umgebendem Gas (Index „ Gas_{∞} “) und Gasphasengrenzfläche (Index „ Gas “)
2. Adsorption aus der Gasphasengrenzfläche an die Metalloberfläche

3. Penetration aus der Gasphasengrenzfläche direkt *unter* die Oberfläche

4. Desorption von der Metalloberfläche in die Gasphasengrenzfläche

Die Modellvorstellung geht davon aus, daß von den Teilchen, die an die Oberfläche gelangen, ein großer Teil adsorbiert und ein geringer Teil penetriert; dementsprechend kann die Größe β als Adsorptionskoeffizient aufgefaßt werden bzw. $(1 - \beta)$ als Penetrationskoeffizient. Die Penetration wird als irreversibel betrachtet und ein Transport von Spaltprodukten innerhalb des Metalls erfaßt das Modell nicht.

Für den aus der Gasphasengrenzfläche adsorbierenden Stoffstrom wird der Ansatz gewählt

$$\dot{Q}_{Ad} = A \cdot \alpha \cdot \beta \cdot v_{\perp} \cdot C_{Gas} \quad (3.13)$$

$$\begin{array}{ll} \dot{Q}_{Ad} [1/s] & : \text{ adsorbierender Stoffstrom} \\ A [m^2] & : \text{ Oberfläche} \\ \alpha & : \text{ Haftkoeffizient} \\ \beta & : \text{ Adsorptionskoeffizient} \\ v_{\perp} [m/s] & : \text{ Auftreffgeschwindigkeit} \\ C [1/m^3] & : \text{ Konzentration} \end{array}$$

Der Penetrationsstrom berechnet sich zu

$$\dot{Q}_{Pen} = A \cdot \alpha \cdot v_{\perp} (1 - \beta) C_{Gas} \quad (3.14)$$

$$\begin{array}{ll} \dot{Q}_{Pen} [1/s] & : \text{ penetrierender Stoffstrom} \\ A [m^2] & : \text{ Oberfläche} \\ \alpha & : \text{ Haftkoeffizient} \\ 1 - \beta & : \text{ Penetrationskoeffizient} \\ v_{\perp} [m/s] & : \text{ Auftreffgeschwindigkeit} \\ C [1/m^3] & : \text{ Konzentration} \end{array}$$

Der Haftkoeffizient α gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein auf die Oberfläche auftreffendes Teilchen auf dieser haften bleibt; von der thermischen Energie des Metallgitters hängt es ab, wie lange das Teilchen an der Auftreffstelle verbleibt. Die kinetische Gastheorie leitet die Auftreffgeschwindigkeit von Teilchen auf eine senkrechte Wand folgendermaßen her:

$$v_{\perp} = \sqrt{\frac{R \cdot T}{2 \cdot \pi \cdot M}} \quad (3.15)$$

$$\begin{array}{ll} v_{\perp} [m/s] & : \text{ Auftreffgeschwindigkeit} \\ R [J/mol K] & : \text{ allgemeine Gaskonstante} \\ T [K] & : \text{ Temperatur} \\ M [kg/mol] & : \text{ Molmasse des Nuklids} \end{array}$$

Zur Vereinfachung der Notation gelte $\alpha^* := \alpha \cdot v_{\perp}$ für die weitere Rechnung.

Der Desorptionsstrom wird nach folgendem Ansatz berechnet

$$\dot{Q}_{Des} = \sigma \cdot M_A \cdot A \cdot \vartheta \quad (3.16)$$

$\dot{Q}_{Des}$ [1/s]	:	desorbierender Stoffstrom
σ	:	Bedeckungsgrad
ϑ [1/s]	:	Desorptionskonstante
A [m ²]	:	Oberfläche
M_A [1/m ²]	:	Anzahl der Spaltproduktatome pro Fläche bei $\sigma = 1$

Die Desorptionskonstante ϑ ist abhängig von der Temperatur T und dem Bedeckungsgrad σ . Die Formulierung kommt zustande aus der Überlegung, daß für den Bedeckungsgrad $\sigma = 0$ die Sorption ausschließlich durch die Sorptionsenergie bestimmt wird und für den Fall $\sigma = 1$ lediglich die Sublimationsenergie von Bedeutung ist. Setzt man zwischen diesen beiden Extremen einen linearen Verlauf an und berücksichtigt die Kinetik aktivierter chemischer Prozesse (Elovich-Beziehung), so folgt

$$\vartheta = \vartheta_0(T) \cdot e^{-\frac{Q_O}{R \cdot T}} \cdot e^{\frac{\sigma \cdot (Q_O - Q_S)}{R \cdot T}} \quad (3.17)$$

ϑ [1/s]	:	Desorptionskonstante
ϑ_0 [1/s]	:	Frequenzfaktor
σ	:	Bedeckungsgrad
Q_O [J/mol]	:	Desorptionsenergie
Q_S [J/mol]	:	Sublimationsenergie
R [J/mol K]	:	allgemeine Gaskonstante
T [K]	:	Temperatur

Um die eigentlich interessierenden Terme zu ermitteln (das sind die Änderungen der Oberflächenbelegungen), ist die Aufstellung von drei Bilanzen notwendig.

1. Die Stoffstrombilanz um die Gasphasengrenzfläche lautet

$$\dot{Q}_{Des} - \dot{Q}_{Pen} - \dot{Q}_{Ad} - \dot{Q}_{Gas-Gas_{\infty}} = 0 \quad (3.18)$$

2. Die Bilanz um die Metalloberfläche liefert

$$\frac{d\sigma}{dt} \cdot M_A \cdot A = \dot{Q}_{Ad} - \dot{Q}_{Des} - \lambda \cdot \sigma \cdot M_A \cdot A \quad (3.19)$$

3. Die Bilanz um die fiktive innere Oberfläche liefert

$$\frac{d\tilde{\sigma}_I}{dt} \cdot M_I \cdot A = \dot{Q}_{Pen} - \lambda \cdot \tilde{\sigma}_I \cdot M_I \cdot A \quad (3.20)$$

Diese Formulierung weicht von der bei Berger-Rossa in [3] ab, um die Analogie zur Gleichung 3.19 zu verdeutlichen; mit $\sigma_I = \tilde{\sigma}_I \cdot M_I$ ist eine Überführung ineinander leicht möglich. M_I ist dabei eine fiktive Anzahl von Spaltproduktatomen pro Fläche bei $\tilde{\sigma}_I = 1$; eine physikalische Bedeutung hat M_I nicht. Die fiktive innere Oberfläche wird gleich angenommen zu der tatsächlich zur Verfügung stehenden äußeren Oberfläche A .

Das Einsetzen der Beziehungen für die Stoffströme in die Bilanzgleichungen ergibt für den Spaltproduktübergang auf die Metalloberfläche

$$\frac{d\sigma}{dt} \cdot M_A \cdot A = A \cdot \left[\beta \frac{h \cdot \alpha^*}{h + \alpha^*} C_{Gas\infty} - \left(\lambda + \vartheta \frac{h + \alpha^*(1 - \beta)}{h + \alpha^*} \right) M_A \cdot \sigma \right] \quad (3.21)$$

Die irreversible Penetration unter die Oberfläche ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\sigma}_I}{dt} \cdot M_I \cdot A = \\ A \cdot (1 - \beta) \left[\frac{h \cdot \alpha^*}{h + \alpha^*} C_{Gas\infty} + \frac{\alpha^*}{h + \alpha^*} \vartheta \cdot M_A \cdot \sigma - \frac{\lambda}{1 - \beta} M_I \cdot \tilde{\sigma}_I \right] \end{aligned} \quad (3.22)$$

Unterschiedlich zu [3] sind die resultierenden Gleichungen 3.21 und 3.22, die die Oberflächenbelegungen beschreiben.

Kapitel 4

Programmtechnische Grundlagen

Das Spaltprodukttransportgeschehen in einem Hochtemperaturreaktor mittels der im vorherigen Kapitel vorgestellten Transportmodelle abzubilden, ist Aufgabe des Programms SPTRAN (*SP*altprodukt*TRAN*sport) [3]. Es ist ein universelles Anlagenprogramm für Hochtemperaturreaktoren, ursprünglich konzipiert zur Untersuchung der Spaltproduktfreisetzung bei verschiedenen HTR-typischen Auslegungs- und hypothetischen Störfällen. Das Programm¹ enthält keine neuen physikalischen Modelle, faßt aber den modellmäßigen Kenntnisstand einer Reihe von Programmen, die in der Vergangenheit Einzelfragestellungen bearbeitet haben, zu einem Gesamtmodell zusammen. Der Gewinn liegt dabei einerseits bei der nun gegebenen Möglichkeit, Rückkopplungseffekte beim Spaltprodukttransport mit berücksichtigen zu können, andererseits ist das Programm völlig neu konzipiert und somit aus einem „Guß“, so daß eine deutlich bessere Wart- und Erweiterbarkeit gewährleistet ist. Diese Punkt ist von nicht zu unterschätzender Bedeutung, denn für die hier interessierende Fragestellung der Freisetzung über eine langjährige Reaktorbetriebsdauer wurden umfangreiche Änderungen und Erweiterungen gegenüber der ursprünglichen Programmversion notwendig.

Das Programm SPTRAN ist, da es wie oben angesprochen eine Reihe von Aufgaben früherer Programme zusammenfaßt, sehr umfangreich; es beinhaltet circa 100 Unterprogramme und ist in der Programmiersprache FORTRAN-77 geschrieben. Versionen des Programms für die IBM Betriebssysteme VM/XA und MVS liegen vor, wobei eine IMSL-² sowie NAG-Numerikprogrammbibliothek zur Verfügung stehen muß. Diese Bibliotheken sind in der Regel an größeren Rechenzentren vorhanden; sonst müssen die verwendeten Standardroutinen zur Lösung linearer und nichtlinearer Gleichungen durch eigene ersetzt werden.

Wegen des wesentlich höheren Rechenzeitbedarfs bei Störfallrechnungen (aufgrund großer Transienten) empfiehlt sich nur für Normalbetriebsrechnungen das interaktive Arbeiten unter VM/XA; anderenfalls ist ein Batchbetrieb unter MVS unver-

¹Auf die Verwendung der Bezeichnung *Code* für Programm Quelltext oder allgemein Programm, die teilweise noch gebräuchlich ist, wird wegen möglicher irritierender Mehrdeutigkeit verzichtet.

²Version 10 oder höher

meidbar. Prinzipiell ist es ohne weiteres möglich, für Normalbetriebsrechnungen SPTRAN sogar auf einem leistungsfähigen Personalcomputer zu installieren, jedoch muß ein gewisserer Portierungsaufwand dafür in Kauf genommen werden.

R. Berger-Rossa hat mit SPTRAN ein exzellentes, leistungsfähiges und konsequent übersichtliches Programm geschrieben. Bedauerlicherweise existiert wegen des sehr hohen notwendigen Aufwandes bis dato keine geschlossene Programmbeschreibung, und auch an dieser Stelle kann lediglich auf die Aspekte eingegangen werden, die hier von Bedeutung sind. Für einen Überblick über das Programm SPTRAN muß daher auf mehrere Veröffentlichungen verwiesen werden; das sind die Arbeiten von Berger-Rossa [3], Ley [19, 20] und Kranz [15].

4.1 Programm SPTRAN

Bei der Entwicklung des Anlagenprogramms SPTRAN zur Simulation des Spaltprodukttransportes in Core und Primärkreis von Hochtemperaturreaktoren wurde ein flexibles, an alle HTR-Reaktortypen anpaßbares, modular aufgebautes Computerprogramm gefordert. Wesentliche Aspekte des Entwurfs, die von Berger-Rossa hervorgehoben werden, waren:

- Keinerlei Beschränkung hinsichtlich der Reaktor- und Primärkreisgeometrie
- Keinerlei Beschränkung hinsichtlich der Art der Spaltprodukte. Sowohl metallische als auch gasförmige Spaltprodukte sollen unter Berücksichtigung von radioaktivem Zerfall und von Vorläufernukliden betrachtet werden können; das Programm kann jedoch aufgrund des extremen numerischen Aufwandes nur ein Nuklid je Rechenlauf behandeln.
- Freisetzung von Spaltprodukten aus Lecks an beliebigen Stellen im Primärkreis
- Offline-Anbindungsmöglichkeit an Thermohydraulikprogramme (bisher wird ausschließlich das Programmpaket V.S.O.P. verwendet) zur Bereitstellung notwendiger Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder.
Rückkoppelungen vom Spaltprodukttransportgeschehen im Reaktor auf die thermohydraulischen Vorgängen werden nicht zugelassen. Diese Annahme ist allgemein zulässig, da nur bei der Betrachtung extremer hypothetischer Aufheizstörfälle eine so massive Freisetzung von Spaltprodukten aus den Brennelementen erfolgt, daß daraus eine nicht mehr zu vernachlässigende Änderung der örtlichen Nachwärmefunktion resultiert.

Das Programm umfaßt also die Spaltprodukttransportrechnung gemäß den im vorherigen Kapitel beschriebenen physikalischen Modellen für ein Spaltprodukt nuklid einschließlich der Möglichkeit, Quellterme von im Reaktor oder im Primärkreis abgelagerten Vorläufernukliden berücksichtigen zu können.

Existieren – wie bei der Betrachtung von Cs^{137} – nur kurzlebige Vorläufernuklide, braucht keine gesonderte Vorläuferrechnung zu erfolgen³. Die Zeitkonstanten für die Diffusion aus dem Brennelement sind deutlich größer als die Zerfallskonstanten der Vorläufer; dies bedeutet, daß die Spaltproduktbilanz innerhalb der Brennelemente durch die V.S.O.P.-Rechnung (siehe Abschnitt 4.2.1, Seite 33) erfolgt. Quellterme aufgrund des Zerfalls eines im Primärkreis abgelagerten Vorläufernuklids entfallen wegen dessen Kurzlebigkeit ebenfalls.

³Bei der Kernspaltung entsteht Cs^{137} als β^- -Strahler zu geringerem Anteil direkt durch Spaltung ($\approx 0.2\%$) und zu größerem Anteil ($\approx 6.0\%$) innerhalb weniger Minuten aus der Zerfallskette Te^{137} , I^{137} , Xe^{137} und zerfällt selber bei einer Halbwertszeit von 30.1 Jahren zu dem stabilen Isotop Ba^{137} .

Bei der Betrachtung der Reaktorgeometrie unterteilt SPTRAN das Gesamtmodell in zwei Teilbereiche. Das sind:

- Corekaverne
- Netzwerk

Die Corekavernenmodellierung umfaßt alle diejenigen Einbauten des Reaktordruckbehälters, die mit dem Heliumstrom in Kontakt kommen. Der Reaktor wird als dreidimensionaler Körper in Zylindergeometrie aufgefaßt und von einem orthogonalen Diskretisierungsgitter durchzogen. Die dadurch entstehenden Rotationskörper mit in azimuthaler Richtung rechteckigem Querschnitt – im folgenden nur noch als Masche bezeichnet – werden als Gebiete mit homogen verteilten Eigenschaften⁴ betrachtet, wodurch sich eine zweidimensionale Betrachtungsweise ergibt. Maschen mit gleichen Eigenschaften werden zu Kompositionen zusammengefaßt, wobei jede Masche einer der folgenden Kompositionen zugeordnet sein muß:

- Feststoff
- Brennelement (BE)
- Vertikale Stromröhre (VSR)
- Hohlraum

Feststoffmaschen haben in SPTRAN (im Gegensatz zum Programm V.S.O.P., siehe Abschnitt 4.2.1, Seite 33) keinerlei Bedeutung; die Spaltproduktkonzentration ist gleich Null. Spaltproduktablagerungen in Festkörpern werden in SPTRAN durch Definition von Graphit- oder Metallmaschen an der Oberfläche berücksichtigt.

Brennelementmaschen beinhalten die vollständige Freisetzungsrechnung aus kugelförmigen Brennelementen. Je Masche wird ein repräsentatives Brennelement mit je einem intakten und defekten Coated Particle gerechnet und die Ergebnisse auf die Anzahl der Particles im Brennelement und der Anzahl der Brennelemente in der Masche hochgerechnet und geeignet gemittelt.

Vertikale Stromröhren sind innendurchströmte Graphitzylinder, wobei die Anzahl der Bohrungen und deren Durchmesser durch Vorgabe eines Leervolumenanteils ($0 \leq \varepsilon \leq 1$) und eines hydraulischen Durchmessers definiert wird. Der Spaltprodukttransport im Graphit erfolgt nur in radialer Richtung.

Hohlräume dienen lediglich dem Transport des Gases bzw. auch dem Transport der Spaltprodukte innerhalb des Gases, wenn die Strömungsgeschwindigkeiten gering genug sind. Soll ein Austausch von Spaltprodukten mit Feststoffen berücksichtigt

⁴radial und axial dürfen die Eigenschaften verschieden sein.

werden, so sind Oberflächen (s. unten) an den Rändern des Hohlraums zu vereinbaren. Ein Hohlraum kann grundsätzlich nur eine Masche hoch sein (aufgrund einer Einschränkung des V.S.O.P.-Thermohydraulikprogrammmoduls THERMIX).

Zusätzlich können im SPTRAN-Eingabedatensatz weitere Kompositionen zwischen Punkten des Diskretisierungsgitters definiert werden. Auf diese Weise können Graphit- und Metalloberflächen eingeführt werden. Somit stehen vier weitere Kompositionsarten zur Verfügung:

- Horizontale Graphitmaschen⁵ (HGM)
- Vertikale Graphitmaschen (VHM)
- Horizontale Metallmaschen (HMM)
- Vertikale Metallmaschen (VMM)

Horizontale und Vertikale Graphitmaschen sind genau eine Masche breit, wobei allerdings sich jede Komposition über eine beliebige Maschenanzahl erstrecken kann. Die Stofferhaltungsgleichungen werden in den Graphitmaschen gelöst und die Kopplung an das Kühlmittel erfolgt über der Konsistenz der Randbedingungen auf Graphit- und Gasseite.

Horizontale und Vertikale Metallmaschen unterliegen den gleichen geometrischen Vereinbarungen. Allerdings müssen für sie die Erhaltungsgleichungen 3.21 sowie 3.22 gelöst werden.

Für den gesamten Primärkreis wird angenommen, daß ausschließlich Metalle als Werkstoffe eingesetzt werden, und es wird das gleiche Ablagerungsmodell verwendet wie bei horizontalen und vertikalen Metallmaschen. Da die Gasseite mitbehandelt werden muß, wird ein Kompositionstyp Netzwerk (NW) definiert, in dem beliebige Strömungsverzweigungen innerhalb des Primärkreises festgelegt werden können.

⁵Der Begriff *Masche* ist hier etwas unglücklich gewählt worden, da sich diese Kompositionen nicht auf Maschen sondern auf Gitterpunkte beziehen

4.2 Programmumgebung von SPTRAN

Das Anlagenprogramm SPTRAN ist nur funktionsfähig im Zusammenwirken mit weiteren Programmen. Wesentlich für die Spaltprodukttransportrechnung ist die Kenntnis thermohydraulischer Daten, d.h. die örtlichen Temperaturen, Drücke und Massenströme in der Reaktoranlage, wobei für den stationären Betrieb keine Zeitabhängigkeit gegeben ist. Beispielsweise aus der Transportgleichung 3.7, Seite 17 ist ersichtlich, daß zur Ermittlung orts- und zeitabhängiger Spaltproduktkonzentrationen die Orts- und Zeitabhängigkeit der thermohydraulischen Größen bekannt sein muß.

Die Berechnung der Thermohydraulik in einem Kernreaktor ist ähnlich komplex und aufwendig wie die Berechnung des Spaltprodukttransportes, so daß eine Ermittlung dieser Daten durch das Programm SPTRAN jedweden rechentechnischen Rahmen sprengen würde; ferner wäre der Aufwand für Erstellen, Testen und Validieren nicht mehr vertretbar. Aus diesen Gründen war und ist es unumgänglich notwendig, auf existierende Software zurückzugreifen.

Das Problem, welches man sich dafür im Gegenzug einhandelt, besteht in der Inkompatibilität der Programme untereinander. Es existieren bedauerlicherweise keine verbindlichen Standards für den Austausch von Daten, so daß umständliche Interfaceprogramme zur Datenaufbereitung erforderlich werden.

Einen allgemeinen Überblick über die Zusammenhänge von benötigten Programmen und Daten in der Arbeitsumgebung von SPTRAN zeigt das folgende Diagramm 4.1 auf Seite 32. Durch eckige Kästchen dargestellt sind die Programme, Ein- und Ausgabedaten werden durch Ovale beschrieben, die Pfeile zeigen den Richtung der Verarbeitung an.

Aus der Ablaufskizze kann entnommen werden, daß eine komplette Freisetzungsberechnung in SPTRAN in vier Phasen bearbeitet wird:

- Die erste Phase umfaßt vorbereitende Rechnungen der Thermohydraulik (Programmmodule THERMIX und KONVEK) und des Spaltproduktinventars durch das Programm V.S.O.P. und der Spaltproduktverteilung innerhalb der Brennelemente und Coated Particles durch das Programm KUGEL. Die dabei anfallenden großen Datenmengen werden in komprimierter Form auf Platte weggeschrieben.
- In der nächsten Phase übernimmt das Programm INTKON für SPTRAN die Aufbereitungsfunktion bezüglich der Daten aus dem Programmpaket V.S.O.P.. Die in der ersten Phase errechneten Daten werden von Platte gelesen, aufbereitet und erneut weggeschrieben.
Für die Verbindung der Programme KUGEL und SPTRAN ist eine Aufbereitung von Daten nicht notwendig, da das Programm KUGEL eine Untermenge von SPTRAN ist; dies wird im entsprechenden Abschnitt noch näher erläutert werden.

- Die dritte Phase umfaßt die eigentliche Spaltprodukttransportrechnung im Programm SPTRAN. Die hier berechneten Ergebnisse werden wiederum auf Platte weggeschrieben, um letztendlich mit den nachgeschalteten Programmen die Auswertung vorzunehmen.
- Die Graphikprogramme DALI und PLOTTER ermöglichen in der Nachbearbeitungsphase die Visualisierung der enormen Datenmengen des Programms SPTRAN.

Es soll ausdrücklich darauf hingewiesen werden, daß eine vollständige Spaltproduktfreisetzungsrechnung mit erheblichem Aufwand verbunden ist und bezüglich Rechenzeit- und Plattenplatzbedarf an die Kapazitätsgrenzen heutiger Rechenzentren herangeht, die einem Single-User i.allg. maximal zugestanden werden. Als Konsequenz hieraus folgt, daß Parameterstudien in diesem Gesamtrahmen kaum durchführbar sind und daß dadurch Fehlersuche und -beseitigung ebenfalls deutlich erschwert sind.

Die Programme und Programmpakete, deren Aufgaben und Funktionen im Zusammenhang mit dem Programm SPTRAN sind in den folgenden Abschnitten kurz dargestellt und zwar:

Programmpakets V.S.O.P., Abschnitt 4.2.1, Seite 33

Programm KUGEL, Abschnitt 4.2.2, Seite 35ff

Programm INTKON, Abschnitt 4.2.3, Seite 38

Graphikprogramme DALI & PLOTTER, Abschnitt 4.2.4, Seite 39

Je nach Anwendungszweck (Normalbetriebs- oder Störfallrechnung) unterscheidet sich die benötigte Arbeitsumgebung in einigen Punkten; für die Störfallrechnung sei daher auf [15] verwiesen. Dies betrifft u.a. die Thermohydraulikrechnung im Primärkreis im Rahmen des Programmpaketes V.S.O.P.; es existiert dort ein Programmmodul namens KISMET, welches für beliebig verzweigte Strömungsnetzwerke die thermohydraulischen Daten berechnet. Da jedoch einige bedenkliche Schwächen des Programmes zutage getreten sind [13] und hier die exakte Beschreibung der Thermohydraulik im Primärkreis nicht von Bedeutung ist, wurden die Daten für den Primärkreis mittels eines kleinen Hilfsprogramms grob abgeschätzt.

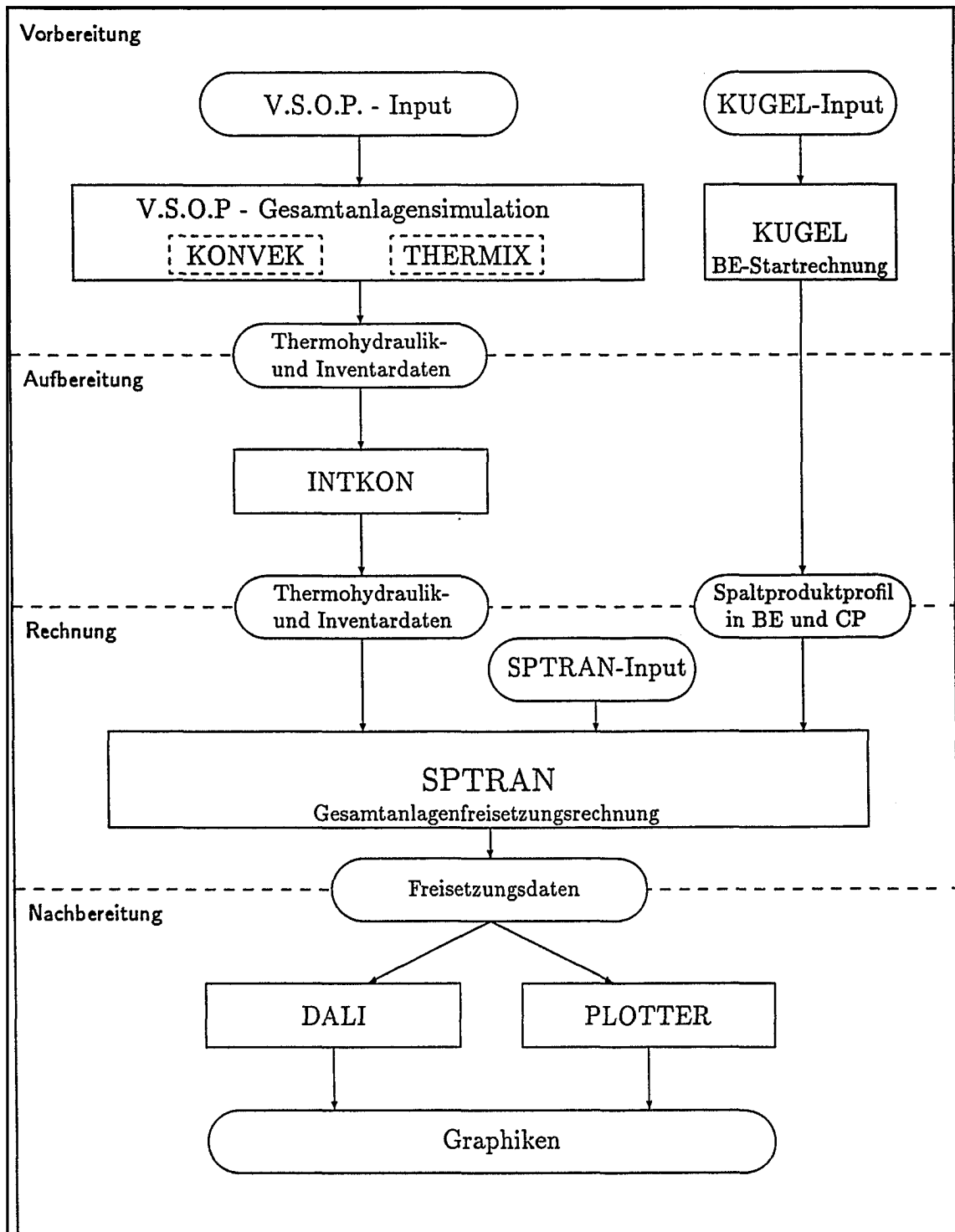


Abbildung 4.1: SPTRAN-Programmumgebung und Datenfluß

4.2.1 Programmpaket V.S.O.P.

Das Programmpaket V.S.O.P. [28] (für Very Superior Old Programs) ist über lange Zeit gewachsen und ist in der Summe seiner Programmodule in der Lage, eine komplette nukleare (Kern-)Auslegung, schwerpunktmäßig von Hochtemperaturreaktoren, durchzuführen.

Wesentliche Bestandteile der Rechnung liegen auf folgenden Aufgabengebieten:

- Neutronenspektrum
- Neutronendiffusion
- Thermohydraulik
- Brennstoffabbbrand
- Regelung
- Brennstoffmanagement
- Kostenrechnung

Der Vorteil der Koppelung des Programms SPTRAN an dieses Programmsystem besteht darin, daß hier mit sehr hoher Genauigkeit das nukleare bzw. neutronenphysikalische Geschehen in einem Hochtemperaturreaktor berechnet werden kann, wie beispielsweise die Erfassung des Neutronenspektrums mit bis zu 36 Energiegruppen zeigt. Wichtige Fragen der Kernausslegung wie Neutronendiffusion, Abbrand- und Spaltproduktrechnung für eine Vielzahl relevanter Nuklide werden ausführlich berücksichtigt; Erstcorezustand, Einbrennphase und Kugelfließen sind weitere Aspekte, die in die Rechnungen mit eingehen.

Das Programm SPTRAN übernimmt nun vom Programmpaket V.S.O.P. für den Gleichgewichtszyklus⁶:

– Geometriedaten des Diskretisierungsgitters⁷:

1. Anzahl der Coregitterlinien in axialer und radialer Richtung
2. Werte der zugehörigen Radien und Höhenlinien
3. Leervolumenanteile aller Maschen des Diskretisierungsgitters
4. Hydraulische Durchmesser aller durchstömten Maschen
5. Art der Maschen
6. Koppelpunkte an den Primärkreis

⁶Analoge Daten werden für Störfallszenarien berechnet, dann allerdings, wie angegeben, als Funktion der Zeit.

⁷Alle weiteren Daten sind innerhalb dieses Diskretisierungsgitters definiert.

4.2.2 Programm KUGEL

Bei den deutschen Bauformen von Hochtemperaturreaktoren haben sich bekanntermaßen kugelförmige Brennelemente gegenüber den prismatischen (im anglo-amerikanischen und japanischen Raum bevorzugten) durchgesetzt. Die Graphitkugeln von 6 cm Durchmesser bilden als statistische Schüttung den Reaktorkern. Als Hauptaufgabe erzeugen sie die thermische Leistung und sind gleichzeitig die zentrale Barriere für die Rückhaltung von Spaltprodukten in Hochtemperaturreaktoren.

Den prinzipiellen Aufbau eines solchen kugelförmigen Brennelementes zeigt Abbildung 4.2:

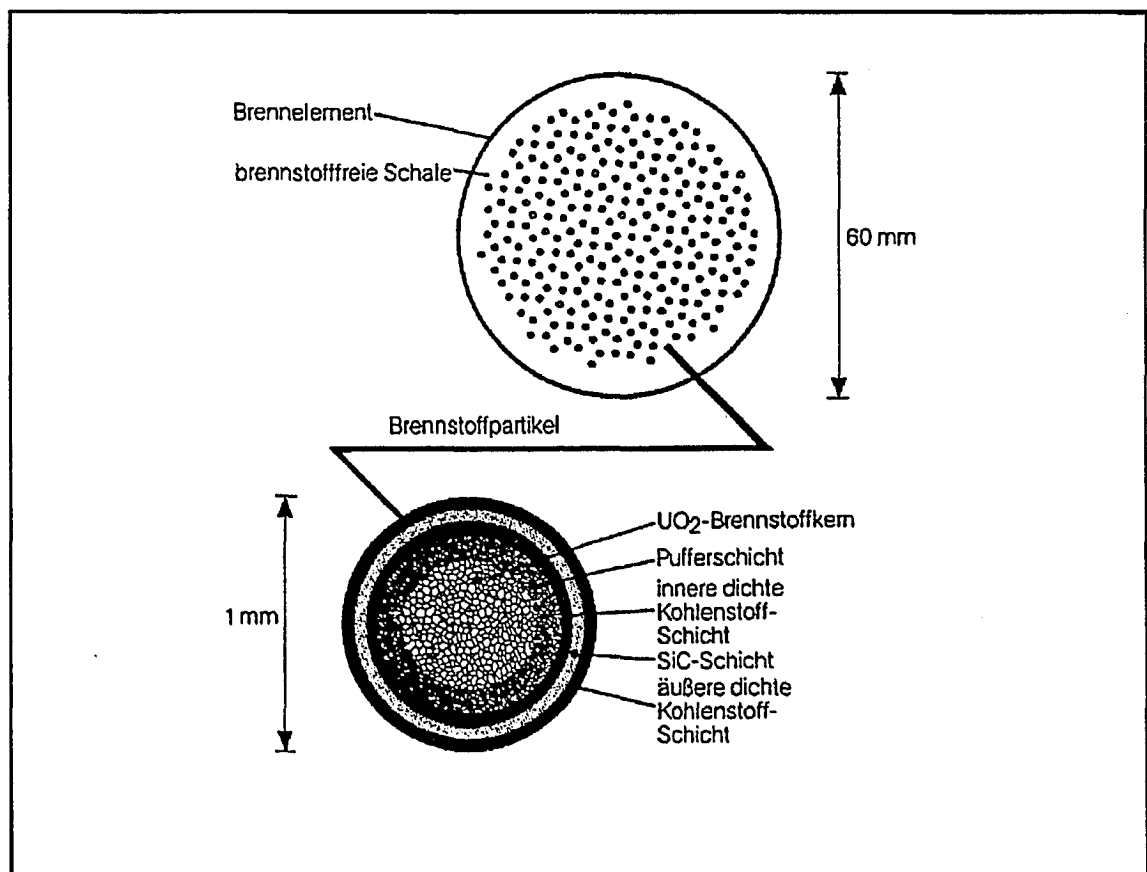


Abbildung 4.2: Aufbau von Brennelement und Coated Particle [12]

Das Brennelement besteht aus einer äußeren partikelfreien Zone sowie einer inneren Graphitmatrix, in der eingelagert sich eine Vielzahl kleiner Partikel (Coated Particles, abgekürzt CP) von etwa 1 mm Durchmesser befinden, die den Spaltstoff in Form von Urandioxid UO₂ enthalten.

Ein Coated Particle wiederum ist aus mehreren verschiedenen Schichten aufgebaut. Den Brennstoffkern, welcher die Hauptspaltproduktquelle darstellt, umgibt eine poröse Pufferschicht, die vor allem die bei der Spaltung entstehenden gasförmigen Elemente aufnimmt. Dann folgen zwei hochdichte Pyrokohlenstoffschichten

(PyC) mit eingelagerter Siliziumkarbidschicht (SiC), der eigentliche Hauptbarriere für Spaltprodukte. Coated Particles mit diesem Schichtaufbau werden als TRISO-Partikel bezeichnet; durch Entwicklung dieser Partikelart konnte bei gewissen Nukliden die Rückhaltung gegenüber den zuerst entwickelten und eingesetzten BISO-Partikeln, in denen die SiC-Schicht fehlt, insbesondere bei höheren Temperaturen verbessert werden.

Für diverse HTR-Konzepte sind in der Vergangenheit eine Reihe unterschiedlicher Brennelementtypen⁹ entwickelt worden, die sich je nach Aufgabe und Anforderung in der Art der eingesetzten Brennstoffe (UO₂, UC₂, Th), der Spaltstoffmenge, der Anzahl der Partikel je Brennelement, des Aufbaus der Beschichtungen usw. unterscheiden.

Im HTR-Modul ist der Einsatz von LEU-TRISO-Brennelementen¹⁰ vorgesehen, die den momentanen Stand der Technik darstellen. Für den Normalbetrieb des Reaktors ist es nun wesentlich, möglichst genau diejenige Menge von Spaltprodukten quantifizieren zu können, die trotz der ausgezeichneten Rückhalteeigenschaften der Coated Particles aus den Brennelementen auszutreten vermögen, um sich dann in Core und Primärkreis abzulagern.

Das Programm KUGEL beschäftigt sich nun, wie der Name nahelegt, mit der Spaltprodukttransportrechnung innerhalb eines Brennelementes, d.h. der graphitischen Brennelementmatrix und der Coated Particles. Das Programm KUGEL [19, 20] ist entstanden als Auskopplung aus dem Programm SPTRAN und ist allein lauffähig. Dies hat den Vorteil, den zentralen Teil des Programmes SPTRAN testen und verifizieren zu können, ohne rechenintensive Läufe des Gesamtprogrammes machen zu müssen.

Das Programm KUGEL beinhaltet die Transportrechnung der Spaltprodukte in den Coated Particles und in der Brennelementmatrix sowie deren Übergang in eine umgebende Gasphase. Das Modell zur Beschreibung der Transportvorgänge in den Feststoffen der Brennelementkugeln wurde in Kapitel 3.1 auf Seite 15 bereits vorgestellt; für den hier vorliegenden Fall der Kugelgeometrie lautet die eindimensionale Transportgleichung:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{x^2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff}(T(x,t)) \cdot x^2 \cdot \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right) - \lambda \cdot C(x,t) + \dot{Q}'''(x,t) \quad (4.1)$$

C	$[1/m^3]$	:	Konzentration
D_{eff}	$[m^2/s]$	:	effektiver Diffusionskoeffizient
T	$[K]$	:	Temperatur
λ	$[1/s]$	:	Zerfallskonstante
$\dot{Q}'''$	$[1/m^3s]$	:	Quelle
x	$[m]$	:	Ortskoordinate
t	$[s]$	:	Zeit

⁹siehe [16], S.12

¹⁰LEU - low enriched Uranium, niedrig angereichertes Uran

Die Diskretisierung dieser zentralen Gleichung und deren Umsetzung in das Programm beschreibt Ley in seiner Arbeit [19]. Als Ergebnis der Diskretisierung erhält man ein System von gekoppelten linearen Gleichungen; dieses läßt sich wie folgt in Form einer Tridiagonalmatrix darstellen:

$$\begin{pmatrix} F0_1 & FR_1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ FL_2 & F0_2 & \ddots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & F0_n & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \ddots & F0_{N-1} & FR_{N-1} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & FL_N & F0_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \\ C_{N-1} \\ C_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} RS_1 \\ RS_2 \\ \vdots \\ RS_n \\ \vdots \\ RS_{N-1} \\ RS_N \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

Die Konzentrationen C_i , $i=1 \dots N$ sind definiert auf den Maschenränden, nicht in der Maschenmitte; entsprechende Transformationen werden bei der Diskretisierung durchgeführt. Bedingt ist dies durch die verschiedenen Randbedingungen, die jeweils auf Oberflächen die Kenntnis der dortigen Konzentration erfordern; dies gilt u.a. für die Sorption an den Brennelementoberfläche oder die Kontaktfläche zwischen Coated Particle und Graphitmatrix, wo die Konzentration gleich und stetig sein muß.

Die Elemente der Tridiagonalmatrix Fm_i , $m=(L, 0, R)$, $i=1 \dots N$ beinhalten im wesentlichen die effektiven Diffusionskoeffizienten und geometrischen Parameter. Die Elemente RS_i , $i=1 \dots N$ des auf der rechten Seite stehenden Vektors enthalten u.a. die verschiedenen Quellterme sowie Konzentrationen des vorherigen Rechenschritts.

Diese Quellterme berücksichtigen auch Recoil und Knock-Out. Die Spaltprodukte legen bei ihrer Entstehung aufgrund der hohen kinetischen Energie noch einige μm Weg zurück, die sogenannte Recoilreichweite. Dabei können sie gegebenenfalls oberflächennahe Atomcluster herausschlagen, was als Knock-Out bezeichnet wird. Somit ist für die Transportrechnung nicht die Verteilung der Spaltprodukte nach ihrer Entstehung, sondern nach erfolgtem Recoil maßgeblich.

Diese Effekte sind allerdings temperaturunabhängig und tragen nur bei tiefen Temperaturen zur Freisetzung nennenswert bei, so daß sie für Rechnungen dieser Arbeit bei hohem Temperaturspektrum keinerlei Relevanz haben; durch die exponentielle Temperaturabhängigkeit der Diffusion hat dieser Mechanismus um Größenordnungen höheren Einfluß auf den Spaltprodukttransport.

Anhand des Programmes KUGEL wurden durch Vergleich mit den Ausheizexperimenten von Schenck [24, 25] die im Programm SPTRAN implementierten Modelle verifiziert [15, 20].

Eine weitere, hier interessierende Verwendung des Programms KUGEL ist die Beschreibung des Konzentrationsprofils innerhalb der Coated Particles und der Brenn-

elementmatrix als Startwert für die SPTRAN-Rechnungen. Die Programmversion von Berger-Rossa enthielt nur eine einfache Abbrandrechnung für ein Core mit OTTO-Beschickung, um ungefähre Startwerte für eine Störfallrechnung zu erhalten. Im Rahmen dieser Arbeit ist es jedoch zum einen notwendig, so genau wie möglich das Inventar im Brennelement bei Mehrfachdurchlauf desselben zu berechnen, zum anderen ist eine geeignete Methode zur Berücksichtigung des Mehrfachdurchlaufs der Brennelemente bei der MEDUL-Beschickung, die für schlanke Coregeometrien die einzig mögliche ist, zu finden. Die Implementation eines Kugelfließmodells mit einfacher Abbrandrechnung wurde nicht weiter verfolgt, da die benötigte Rechenkapazität auf jeden Fall wenig sinnvolle Größen erreichen würde, wenn für jede Brennelementmasche je ein repräsentatives Brennelement für jeden Durchlaufzustand gerechnet werden müßte, zumal für einen HTR-Modul mit 15-fachen Durchlauf mit einer fast ebensolchen zu erwartenden Vervielfachung der Rechenzeit.

Daher ist die Abbrandrechnung von Berger-Rossa aus dem Programm SPTRAN entfernt worden. Die benötigten Daten können viel exakter und eleganter aus dem Programmpaket V.S.O.P. importiert werden, jedoch liefert V.S.O.P. keine Informationen darüber, wie die Spaltprodukte im Brennelement und Coated Particles verteilt sind. Genau genommen kennt das Programmpaket V.S.O.P. nur über eine Masche „verschmierte“ Inventare bzw. Konzentrationen. Aus diesem Grund wird nun das folgende Verfahren eingesetzt: Es wird ein einzelnes Brennelement im Programm KUGEL (bei Annahme linearen Abbrands) gerechnet, welches zu erwartende Temperaturbereiche je nach Beschickungsart einfach oder mehrfach durchläuft. Somit können Spaltproduktprofile in der Graphitmatrix und den Partikeln ermittelt werden; beim Start des Programmes SPTRAN werden diese auf alle Brennelementmaschen übertragen und mit den aus dem Programmpaket V.S.O.P.-Inventardaten des betrachteten Nuklids normiert. Anschließend werden für jede Masche die Brennelementquellterme ins Gas ermittelt. Für den Fall der Normalbetriebsrechnung werden diese, da der Reaktor sich im stationären Zustand befindet, für die weiteren Rechnungsschritte als konstant angenommen. Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin, daß verschiedene Beschickungsarten berücksichtigt werden können, daß keine extrem aufwendigen Änderungen diesbezüglich in SPTRAN vorgenommen werden mußten und daß V.S.O.P. wesentlich genauere Inventardaten liefert, als das mit einfachen Abbrandmodellen in SPTRAN möglich wäre.

4.2.3 Programm INTKON

INTKON ist ein Interfaceprogramm, welches Ausgabendaten des Programmpakets V.S.O.P. für SPTRAN aufbereitet. Dabei werden die Daten sowohl nach Struktur und Inhalt verändert.

Die inhaltliche Änderung bezieht sich auf die Umrechnung aller Daten auf die SI-Basiseinheiten m , kg , s , K , die im Programm SPTRAN konsequent ohne Vorsatz von Zehnerpotenzen benutzt werden.

Der Änderung der Struktur umfaßt mehrere Punkte. Es werden in einem „Info“-

Block alle zeitinvarianten Daten wie z.B. Geometriedaten etc. zusammengefaßt, entsprechend alle zeitvarianten in einem sogenannten „Daten“-Block. Weiterhin wird das Diskretisierungsgitter, welches aus dem V.S.O.P.-Modul KONVEK stammt¹¹, modifiziert. Es wird zum einen die Orientierung der axialen Richtung um 180 Grad gedreht nebst einer Verschiebung des Ursprungs des Reaktorkoordinatensystems – in SPTRAN zeigt die positive z-Achse nach oben in Richtung Deckenreflektor; der Ursprung des Koordinatensystems liegt unten auf der Mittelachse, so daß keine negativen Koordinaten auftreten –, zum anderen wird die Kompositionseinteilung vereinfacht. Dies geschieht, weil für die V.S.O.P.-Rechnungen verschiedene Festkörpereigenschaften eine Rolle spielen, die jedoch für die Freisetzungsrechnungen unerheblich sind, so daß eine Reduktion auf 4 Kompositionsarten erfolgen kann. Diese Kompositionen sind wie folgt mit Kennzahlen kodiert:

- 1 = nicht durchströmter Festkörper
- 2 = Kugelhaufen
- 3 = Reflektoren
- 4 = durchströmte Festkörper

Es sei noch der Vollständigkeit halber erwähnt, daß für die Aufbereitung der Thermohydraulikdaten des Primärkreises, die das V.S.O.P.-Programmmodul KISMET berechnet, analog zum Programm INTKON das Interfaceprogramm INTKIS existiert; dieses findet aus bereits ausgeführten Gründen in dieser Arbeit keine Verwendung.

4.2.4 Graphikprogramme DALI, PLOTTER

Das Programm SPTRAN protokolliert nach Wahl Daten auf bis zu 5 Ausgabefiles. Die Auswertung und Darstellung dieser Daten übernehmen zwei Programme:

Die Vorgänge in den Brennelementkugeln graphisch darzustellen ist das Einsatzgebiet des Programmes PLOTTER, während alle anderen Daten durch das Programm DALI, welches sowohl zweidimensionale wie dreidimensionale Darstellung der Ergebnisse ermöglicht, bearbeitet werden.

Beide Programme sind speziell auf die Verwendung und die Datenformate der Programme SPTRAN und KUGEL ausgelegt und sind nicht anderseitig verwendbar. Beide Programme verwenden nichtstandardisierte GR-Software-Graphikroutinen des Zentralinstituts für angewandte Mathematik des Forschungszentrums Jülich, was eine Konvertierung auf andere Rechner ggf. erschwert.

¹¹Im Programmmodul THERMIX existiert ein weiteres, den kompletten Reaktor umfassendes Diskretisierungsgitter, für die SPTRAN-Rechnung reicht das kleinere KONVEK-Gitter des Reaktorcores.

4.3 Modellierung des Reaktors

4.3.1 Anlagenbeschreibung

Die Vor- und Nachteile verschiedener HTR-Anlagenkonzepte mit Heliumturbine sind bereits eingangs erörtert worden. Die Hauptunterscheidung ist sicherlich zu treffen zwischen einem reinen Gasturbinenprozeß auf der einen Seite und einem kombinierten Gasturbinen-/Dampfturbinenprozeß auf der anderen Seite. Nochmals erwähnt werden soll, daß es bei beiden Konzepten möglich ist, durch einen Helium/Heliumwärmetauscher alle wesentlichen Anlagenteile in einen Sekundärkreislauf einzubringen. Der Vorteil liegt in der erhöhten Sicherheit gegenüber Wasser- oder Lufteinbruchstörfällen und in einem absolut nicht kontaminierten Sekundärheliumkreislauf. Nachteilig ist der erhöhte Aufwand durch einen zweiten Kreislauf und der damit verbundene Verlust an Kompaktheit der Anlage sowie der Wirkungsgradverlust durch Wärmeaustausch.

Da die Aufgabe dieser Arbeit jedoch die Klärung der Fragestellung ist, ob man vom Gesichtspunkt der Kontamination aus annehmen kann, daß diese so extrem gering sein wird, daß auf einen Sekundärheliumkreislauf verzichtet werden kann, wird ein Anlagenkonzept gemäß Abbildung 4.3 zugrundegelegt.

Für die Untersuchung eines solchen Konzeptes sprechen zwei maßgebliche Gründe:

- Ein solcher Kombiprozeß erreicht einen sehr hohen Gesamtwirkungsgrad (etwa 50% sind beim Stand der Technik erzielbar) und bietet die Möglichkeit, Wärme für verschiedene Verwendungszwecke auszukoppeln.
- Es ist die Möglichkeit gegeben, einen HTR-Modul bisheriger Auslegung einzusetzen, während bei einer reinen Gasturbinenanlage aufgrund der völlig anderen thermodynamischen Auslegung eine Neukonzeption des Reaktors erforderlich wäre. Die Gaseintrittstemperatur bleibt bei 250°C, die Gasaustrittstemperatur wird auf ca. 950°C erhöht, da ein Gasturbinenprozeß nur bei hohen Eintrittstemperaturen einen akzeptablen Wirkungsgrad erzielt. Daß dies ohne größere Probleme realisierbar ist, beweisen die Erfahrungen beim AVR-Reaktor, dessen mittlere Gasaustrittstemperatur ebenfalls auf diesen Wert gesteigert wurde, obwohl er ursprünglich für eine 100°C niedrigere Temperatur konzipiert war.

Das Prinzip der inhärenten Sicherheit verlangt, daß bei allen Störfällen, auch hypothetischen, die im Reaktor entstehende Wärme allein durch passive Mechanismen wie Wärmeleitung und Wärmestrahlung abgeführt werden kann. Dabei darf ein maximaler Temperaturwert von 1600°C nicht überschritten werden. Dieser Grenzwert ergibt sich durch zahlreiche Experimente, vor allem von Schenk [24, 25], die nachweisen, daß das Brennelement sowie die Coated Particles bis zu dieser Temperatur völlig intakt bleiben und nichts an ihrer Rückhaltefunktion verlieren außer einer vergleichsweise geringen Diffusion durch die intakten Coated-Particle-Schichten. Um

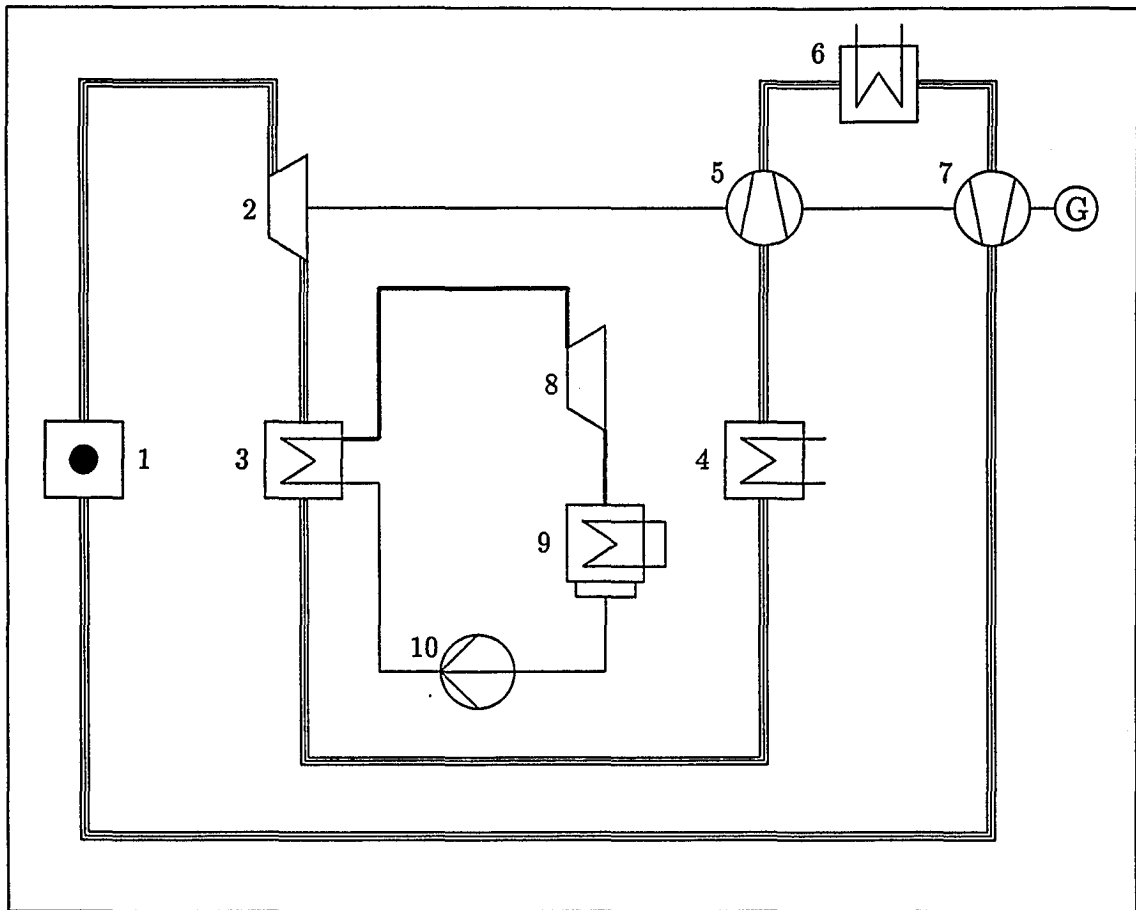


Abbildung 4.3: Prinzipschaltung kombinierter Gasturbinen-/Dampfturbinenprozeß
 1. Hochtemperaturreaktor, 2. Heliumturbine, 3. Dampferzeuger, 4. Vorkühler, 5. Vorverdichter, 6. Zwischenkühler, 7. Endverdichter, 8. Dampfturbine, 9. Kondensator, 10. Speisewasserpumpe

die 1600°C Grenze auch bei erhöhter Gasaustrittstemperatur einhalten zu können, wird die Reaktorleistung von 200MW_{th} auf 170MW_{th} reduziert.

Bei Hochtemperaturreaktoren größerer Leistung können unter Zugrundelegung hypothetischer Störfallereignisse durchaus Temperaturen in den heißesten Brennelementzonen von bis zu 2500°C erreicht werden [15]. Die Graphite sind auch gegen solche Temperaturen noch unempfindlich, jedoch setzt ein umfangreicher Bruch der Coated-Particles mit hoher diffusionsbedingter Freisetzung ein, was eine massive Freisetzung von Spaltprodukten innerhalb kürzerer Zeiträume, d.h. im Stundenbereich, bedeutet, da auch die Graphite bei diesen Temperaturen keine Diffusionsbarrieren mehr darstellen.

allerdings nicht äquidistant¹², wie es die Prinzipskizze aus darstellungstechnischen Gründen zeigt.

Die Wichtigkeit der hohen Maschenzahl soll hier kurz angedeutet werden; aus dem Inhalt der folgenden Kapiteln wird dies unmittelbar deutlich. Die Erhöhung der mittleren Gasaustrittstemperatur auf 950°C hat eine allgemeine Anhebung des Temperaturspektrums im Core¹³ zur Folge. Die Diffusionsvorgänge in den Brennelementen sowie der Stoffübergang in das Kühlgas¹⁴ werden bemerkbar bei Temperaturen ab 600°C. In Temperaturbereichen über 800°C haben Temperaturdifferenzen von 50 Grad bereits erhebliche Auswirkungen auf die Freisetzungsquellterme. Insofern ist es unerlässlich, das Temperaturspektrum des Reaktors genau zu erfassen.

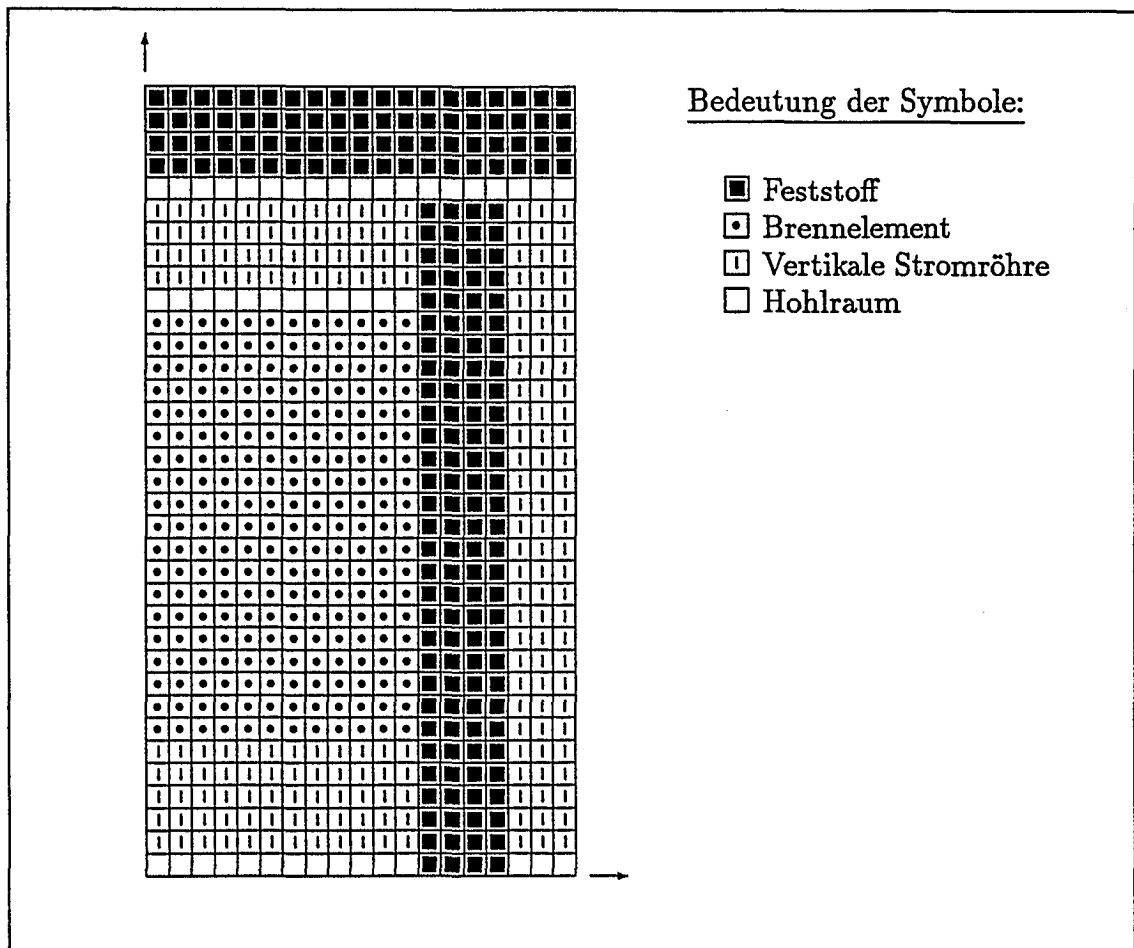


Abbildung 4.5: Diskretisierungsgitter des Cores

Die Diskretisierung der *einzelnen* Kompositionen erfolgt durch Wahl eines Diskretisierungsgitters, das eine Einteilung der betreffenden Kompositionsmasche in Grob-

¹²V.S.O.P. benötigt im Bereich der Decken-, Boden-, Seitenreflektoren eine lokal feinere Diskretisierung; aus Abbildung 6.3, Seite 62 sind die unterschiedlichen Mascheneinteilungen ersichtlich.

¹³vgl. Abbildung 6.1, Seite 60

¹⁴siehe Sorptionsisothermen, Kapitel 5.1, Seite 48

zonen vornimmt. Innerhalb dieser Grobzonen werden die Materialeigenschaften als konstant angenommen. Diese Grobzonen wiederum werden in eine Vielzahl von Feinzonen unterteilt, und zwar derart variabel, daß an Stellen, wo große Gradienten zu erwarten sind, sehr feinmaschig gerechnet wird, und dort, wo sehr geringe Gradienten vorliegen, durch gröbere Diskretisierung unnötiger Rechenaufwand vermieden wird. Bei der Modellierung des Kompositionstyps Brennelement wird pro Masche ein Brennelement gerechnet. Innerhalb eines Brennelementes wird dann je ein intaktes und defektes Coated Particle eingeführt und die Quellterme in die Matrix anteilig der Anzahl von defekten und intakten Partikeln gemittelt.

Die Modellvorstellung geht davon aus, daß ein defektes Coated Particle als „nackter“ UO_2 -Kern ohne Coatings behandelt wird. Müssen Partikelbrüche während der Simulation (beispielsweise in der Störfallrechnung aufgrund hoher Temperaturtransienten) angenommen werden, so wird das Spaltproduktinventar der Coatings homogen in der Matrix verteilt und der Anteil intakter und defekter Partikel neu bestimmt.

Kapitel 5

Brennelementrechnung

Im Laufe der Entwicklung des Hochtemperaturreaktors hat sich immer deutlicher herausgestellt, daß den Brennelementen und hier insbesondere den Coated Particles die zentrale Barrierenfunktion bei der Spaltproduktrückhaltung zukommt.

Die Fertigung von Brennelementen mit exzellenten Rückhalteeigenschaften ist realisiert; die Forschung und Entwicklung konzentriert sich zur Zeit auf die Beschichtung von Brennelementen mit dem Ziel, eine deutliche Verbesserung der Korrosionseigenschaften zu erreichen, was bei der Betrachtung hypothetischer Störfallereignisse wie Luft- und Wassereinbruch von Bedeutung ist. Anzunehmen ist, daß die Spaltproduktrückhaltung durch eine Beschichtung ebenfalls verbessert werden kann. Bei einem Anlagenkonzept wie dem hier zugrundegelegten befinden sich im Primärkreis statt eines Dampferzeugers drei Komponenten, die einen Wassereinbruch verursachen können, sowie eine Turbine, die durch Schaufelabriß einen massiven Lufteinbruch in den Primärkreis verursachen kann. Aus diesem Grund ist die Entwicklung von Brennelementbeschichtungen für Anlagen mit Heliumturbine im Primärkreis von nicht zu unterschätzender Bedeutung.

Hier soll jedoch die Brennelementberechnung ohne Berücksichtigung einer äußeren Korrosionsschutzbeschichtung durchgeführt werden. Die Berechnung der zu erwartenden Spaltproduktprofile in Brennelement und Coated Particles ist der wichtigste Schritt zur Initialisierung der SPTRAN-Gesamtanlagenrechnung. Wie im vorherigen Kapitel bereits dargelegt, erfolgt dies durch das Programm KUGEL. Die relevanten Eingabedaten für die konkrete Rechnung sind im nächsten Abschnitt zusammengefaßt.

Aufgeführt in den Tabellen und Abbildungen sind dabei jeweils nur die Daten, die für die gerade durchzuführenden Rechnungen benötigt werden. Im Anhang B sind jeweils die kompletten Datenbasen, soweit bekannt, aufgeführt; diese umfassen weitere Materialien, Nuklide und Temperaturbereiche.

5.1 Datenbasis

Die Brennelementrechnung gründet sich auf einer Reihe von Voraussetzungen und Daten, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden. Die Tabelle 5.1 faßt die allgemeinen Daten für die Brennelementrechnung zusammen; für den Einsatz im HTR-Modul sind TRISO-Brennelemente vorgesehen mit niedrig angereichertem Uran (LEU - low enriched uranium).

Anzahl der Brennelemente	360 000	
Coated Particle Anzahl pro BE	11600	
Abbrand (in Volllasttagen)	1007	[d]
Anzahl der Durchläufe	15	
mittlere Brennelementleistung	472.2	[W]
Uraninventar	$7 \cdot 10^{-3}$	[kg]
Verhältnis U^{235}/U^{238}	8% $\pm 0.5\%$	

Tabelle 5.1: Brennelementdaten

Im Unterschied zur Standardauslegung für den HTR-Modul ist die mittlere Brennelementleistung mit 472.2 W etwas geringer; dies ergibt sich bei gleicher Brennelementanzahl aus der sicherheitstechnisch bedingten verminderten Gesamtleistung des Reaktors.

Die Daten zur Berechnung der effektiven Diffusionskoeffizienten, Gleichung 3.9, S. 18, sind für die TRISO-Brennelementmaterialien in der Tabelle 5.2 aufgeführt.

	$D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q \left[\frac{J}{mol} \right]$	$D'_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q' \left[\frac{J}{mol} \right]$
UO ₂	$5.6 \cdot 10^{-8}$	$209 \cdot 10^3$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	$362 \cdot 10^3$
Puffer ^a	$1.0 \cdot 10^{-12}$	—	—	—
LTI	$6.3 \cdot 10^{-8}$	$222 \cdot 10^3$	—	—
SiC ^b	$1.8 \cdot 10^{-11}$	$176 \cdot 10^3$	—	—
A3-3 Graphit	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$181 \cdot 10^3$	—	—

^asiehe [29], S.107

^bNormalbetrieb

Tabelle 5.2: Frequenzfaktoren und Aktivierungsenergien für Cäsium [21]

Der konstante Wert für den effektiven Diffusionskoeffizienten in der Pufferschicht gilt nach Zoller [29] für einen Temperaturbereich zwischen 800°C und 1300°C ; die Temperaturabhängigkeit ist dort vernachlässigbar gering. Die Extrapolation in Richtung niedrigerer Temperaturen ist zulässig, da der Wert bei sinkender Temperatur höchstens kleiner werden kann und gegenüber den anderen Materialien sowieso

vernachlässigbar ist. Lediglich bei Extrapolation zu höheren Temperaturen ist Vorsicht geboten, da von diesem sehr porösen Material keinerlei Rückhaltewirkung zu erwarten ist.

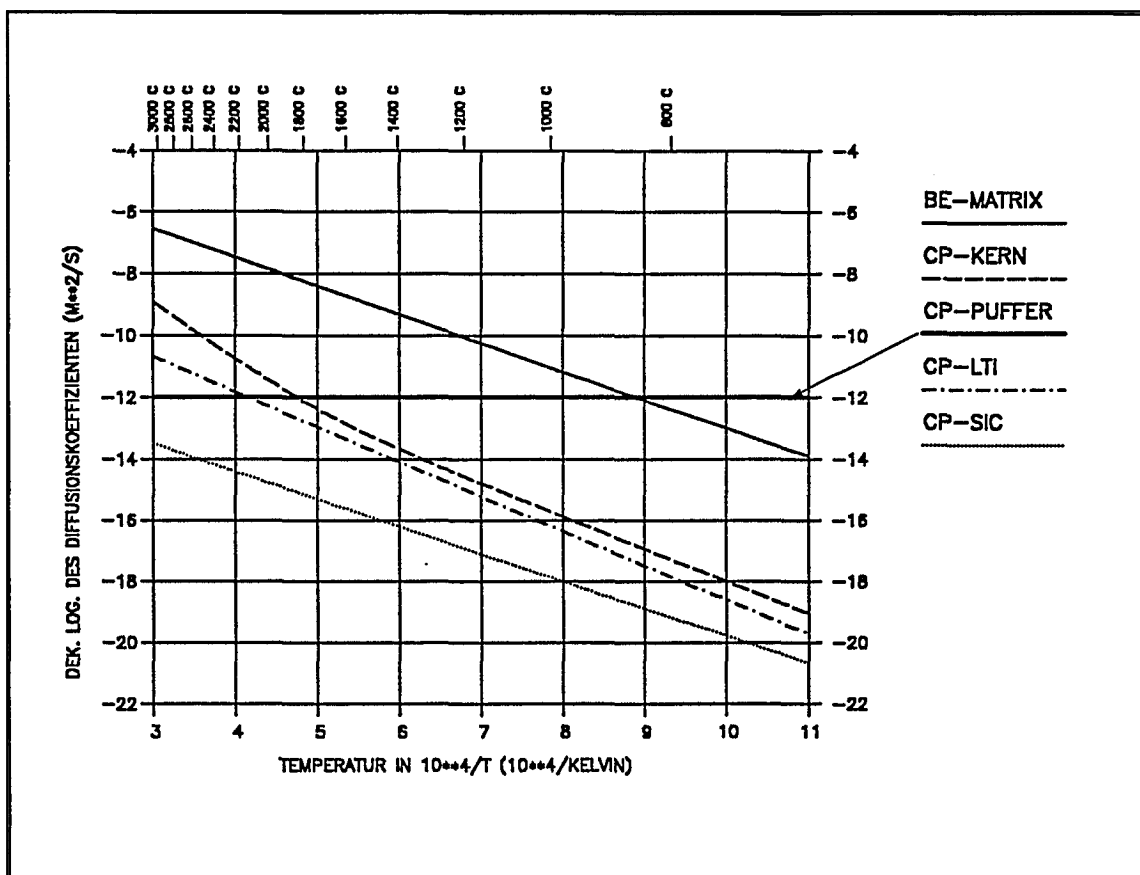


Abbildung 5.1: Diffusionskoeffizienten von Cäsium in Brennelementmaterialien

Aus der Abbildung 5.1 ist ersichtlich, daß die SiC-Schicht die größte Barriere für Cäsium darstellt. Datengrundlage hierfür sind die Messungen von Allelein [1] an SiC-Beschichtungen der Firma HOBEG. Für den Normalbetrieb bei Standardauslegung, d.h. mittlere Gasaustrittstemperaturen um 700°C, kann diese Schicht als undurchlässig angesehen werden; dies bestätigen alle bisher bekannten Rechnungen. Da die Spaltprodukte in den intakten Coated Particles vollständig zurückgehalten werden, sind ursächlich für eine Kontamination des Reaktors nur jene Urananteile im Brennelement, die nicht in intakten Coated Particles eingeschlossen sind; diese werden im allgemeinen Sprachgebrauch als herstellungsbedingt „freies Uran“ bezeichnet. Die genaue Bestimmung und Kenntnis der Menge freien Urans im Brennelement ist für die Berechnung der Freisetzung im Normalbetrieb von grundlegender Bedeutung.

Der Stand der Forschung auf dem Gebiet der Brennelementfertigung bezüglich der momentan technisch realisierbaren Minimierung des freien Urans wird in [23] zusammengefaßt; wegen der grundlegenden Bedeutung sollen hier einige zentrale Passagen

zitiert werden:

Als untere Begrenzung der Quellstärke einer Spaltproduktfreisetzung verbleibt also das freie Uran, das in den Brennelementen aufgrund ihrer Herstellung eingesetzten Materialien und Methoden vorliegt. Ein solcher Anteil nicht intakt SiC-beschichteten Urans kann drei verschiedene Ursachen haben:

- Beschädigung von Partikeln während des Hochdruckpressens der Brennelementkugeln,
- Uran, welches in den Rohstoffen der Brennelementmatrix bzw. der äußeren Pyrokohlenstoffschicht der Particles enthalten ist,
- Uran, welches durch die Methode des Herstellungsprozesses eingebracht wird.

Gemäß Spezifikation wird das freie Uran nach einem „burn-leach“-Verfahren gemessen, das jedoch nicht nach den einzelnen Ursachen zu unterscheiden vermag. Deshalb müssen indirekte Rückschlüsse bzw. zusätzliche Messungen zur Aufklärung der tatsächlichen Aufteilung des freien Urans herangezogen werden.

Bei der Qualitätskontrolle in der Produktion von Brennelementen des LEU-TRISO-Referenztyps für den AVR-Betrieb bzw. Bestrahlungsexperimente werden üblicherweise Meßwerte des „freien Urans“ unterhalb der Nachweisgrenze erhalten, die bei der AVR-Standardauslegung (gemäß Nachladung 21) z.B. bei einem Anteil von weniger als $1 \cdot 10^{-6}$ liegt. In Einzelfällen treten daneben Meßwerte auf, die i.a. dem Einfachen, selten Mehrfachen eines Partikelinventars entsprechen. Ein Partikelinventar bedeutet dabei ca. $1 \cdot 10^{-4}$ des Brennelementinventars. Der über die gesamte Produktion von LEU-TRISO-Brennelementen gemittelte Anteil des „freien Urans“ von etwa $3 \cdot 10^{-5}$ beruht also praktisch ausschließlich auf einzelnen, gelegentlich auftretenden Partikelfekten. ... Eine daneben vorliegende, gleichmäßig feinverteilte Kontamination beruht allein auf nach praktischen Maßstäben nicht weiter reduzierbaren Natururan-Verunreinigungen der graphitischen Matrix-Rohstoffen. Ihr wirksamer Beitrag hinsichtlich des spaltbaren U^{235} -Anteils ist ca. 2 Zehnerpotenzen geringer als der aus den vorgenannten seltenen Defektpartikeln, und mithin in der Praxis vernachlässigbar.

Als weitere Annahme liegt den Brennelementrechnungen zugrunde, daß die Spaltproduktkonzentration im die Kugel anströmenden Kühlgas sehr klein ist, also Reinsthelium vorliegt. Diese Annahme bedingt, daß konservativ abgeschätzte Quellterme für den Übergang von der Brennelementoberfläche ins umgebende Gas in SPTRAN errechnet werden.

Die Daten, die der Rechnung der Sorptionsisothermen¹ (siehe Gleichung 3.11, Seite 19) zugrunde liegen, können der Tabelle 5.3 entnommen werden.

¹Es sei an dieser Stelle nochmals ausdrücklich darauf hingewiesen, daß die Sorptionsisothermen aus Experimenten resultieren und die beschreibenden Gleichungen Fits an Meßwerte wird, also *Größengleichungen*.

A3-3 Matrixgraphit			
	Referenz	+ Sicherheitszuschlag	Kwasny [18]
A_H	21.94	24.24	18.87
B_H	-44093	-44093	-41244
A_F	97.81	100.0	149.46
B_F	-248213	-248210	-319072
D_F	-1.3689	-1.3689	-2.354
E_F	3683	3683	5013
C_t $[\frac{1}{m^3}]$	$1.17 \cdot 10^{24}$	$1.17 \cdot 10^{24}$	$1.17 \cdot 10^{24}$

Tabelle 5.3: Sorptionsdaten für Cäsium [21]

Aufgeführt sind die Daten nach Moormann, Verfondern [21]², die den bisherigen Rechnungen zugrunde lagen, sowie neueste Messungen von Kwasny [18], jeweils umgerechnet auf das SI-Einheitensystem. Diesen zufolge ist die Sorptionsfähigkeit von A3-Graphit im Henry-Bereich etwas besser als der Referenzdatensatz bisher ausgewiesen hat. Für Störfallanalysen wird empfohlen, nicht die Referenzwerte anzusetzen, sondern diese noch mit einem Sicherheitszuschlag zu versehen³. Dies ist somit die konservative Abschätzung zu einer Obergrenze hin.

Abbildung 5.2 ist die graphische Darstellung der Daten aus Tabelle 5.3 mit Sicherheitszuschlag. Durch Schraffur hervorgehoben sind die Bereiche, in denen Messungen für den Henrybereich vorliegen. Alle anderen Werte für den Henrybereich sind aus diesen Meßwerten extrapoliert. Der Bereich in dem sich Sorptionsvorgänge im Normalbetrieb des Reaktor abspielen, ist ebenfalls hervorgehoben. Man erkennt, daß über mehrere Zehnerpotenzen extrapoliert werden muß. Das Fehlen von Meßwerten in diesem Bereich erklärt sich durch die Grenzen der Meßtechnik, so geringe Partialdrücke noch erfassen zu können. Die Zulässigkeit einer weitreichenden Extrapolation der Meßwerte ist implizit durch die Definition des Henrybereiches gegeben. Stimmt die Annahme, daß ein Bereich existiert, in dem genügend Sorptionsplätze zur Verfügung stehen – d.h. es kann von einer energetisch gleichwertigen Anlagerung bei konstanter Sorptionsenthalpie ausgegangen werden – so kann, da keine Konzentrationsabhängigkeit vorliegt, extrapoliert werden. Stimmt die Annahme jedoch nicht, und es gibt noch Plätze, die energetisch günstiger sind als die gemessenen, d.h. es existiert noch eine Konzentrationsabhängigkeit (Extrapolation des Freundlichbereiches), so ergäben sich geringere Partialdrücke, als durch den Henrybereich vorgegeben. Insofern kann die Extrapolation als nicht zu optimistische Abschätzung angesehen werden.

Da die Transportvorgänge in der Regel stark temperaturabhängig sind, ist es für die

²die im Bericht stehende Tabelle mit Sorptionsdaten ist inzwischen von den Verfassern überarbeitet worden, die aktuellen Daten können dem Anhang B entnommen werden

³Es werden hierbei noch zwei Temperaturbereiche unterschieden; die in der Tabelle aufgeführten Werte gelten für eine Temperatur kleiner 1350°C

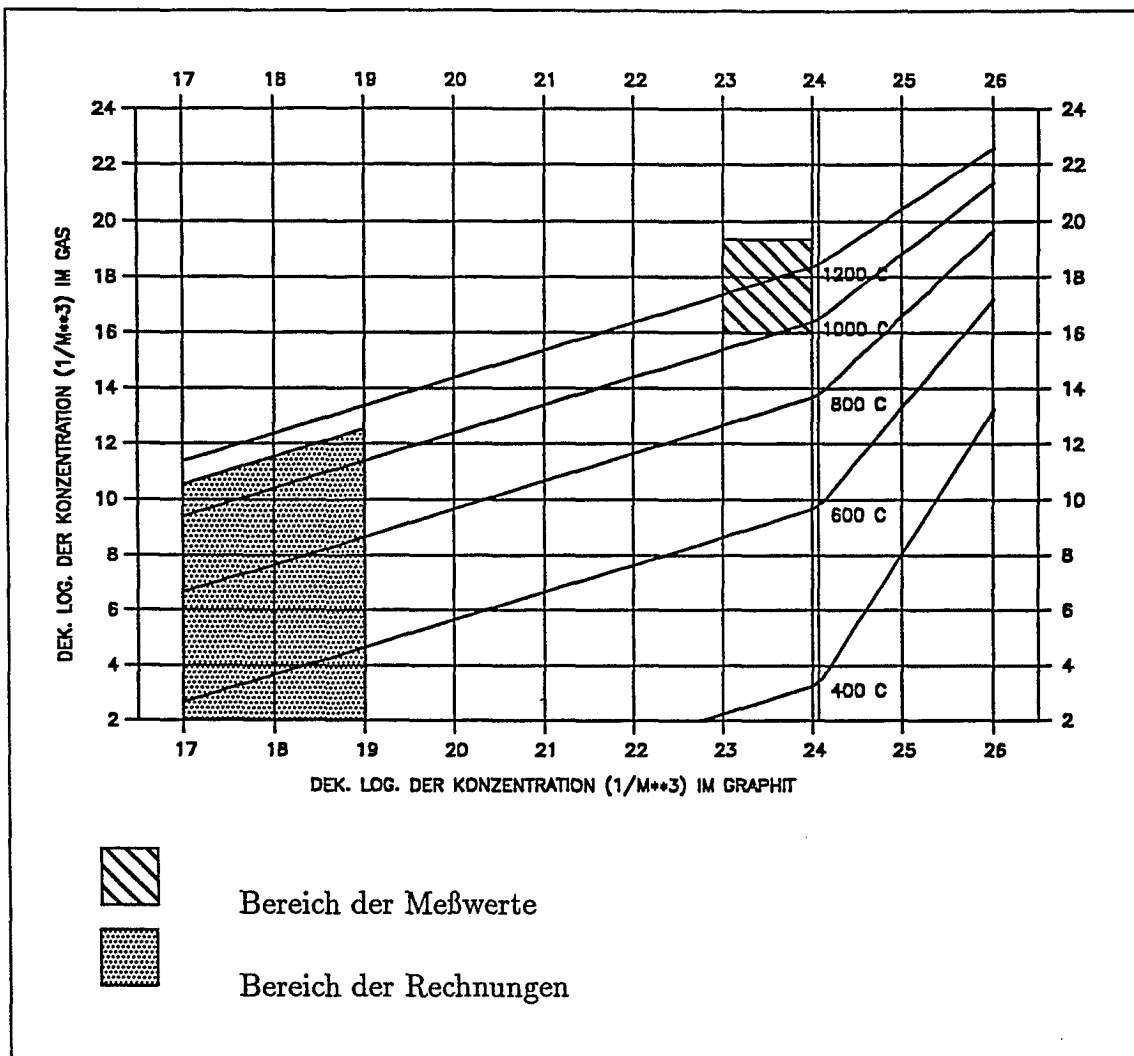


Abbildung 5.2: Sorptionsisothermen für Cäsium

Rechnung des repräsentativen Brennelementes von hoher Bedeutung, den tatsächlichen Temperaturverlauf, dem eine Kugel im Reaktor während ihrer Lebensdauer ausgesetzt ist, möglichst genau zu erfassen. Abbildung 5.3 zeigt den Temperaturverlauf, der für das repräsentative Brennelement gewählt wurde.

Die Daten hierfür sind der V.S.O.P.-THERMIX-Rechnung entnommen worden. Da beim HTR-Modul die Kugeln den Reaktor 15-mal durchlaufen, wird als Referenzverlauf angenommen, daß statistisch gemittelt die Kugeln alle Zonen durchlaufen mit leichter Präferenz zur Coremitte hin; insofern sind von den 12 radialen Coremaschen 5 ausgewählt worden, die die Kugeln in axialer Richtung abwechselnd durchlaufen. Ein Kugelfluß in radialer Richtung in der Nähe des Bodenreflektors wird nicht berücksichtigt⁴.

⁴Hier erkennt man die Wichtigkeit eines richtigen Kugelfließmodells; wie auch die Erfahrungen beim THTR-300 gezeigt haben, eine bisher nicht zufriedenstellend gelöste Aufgabe.

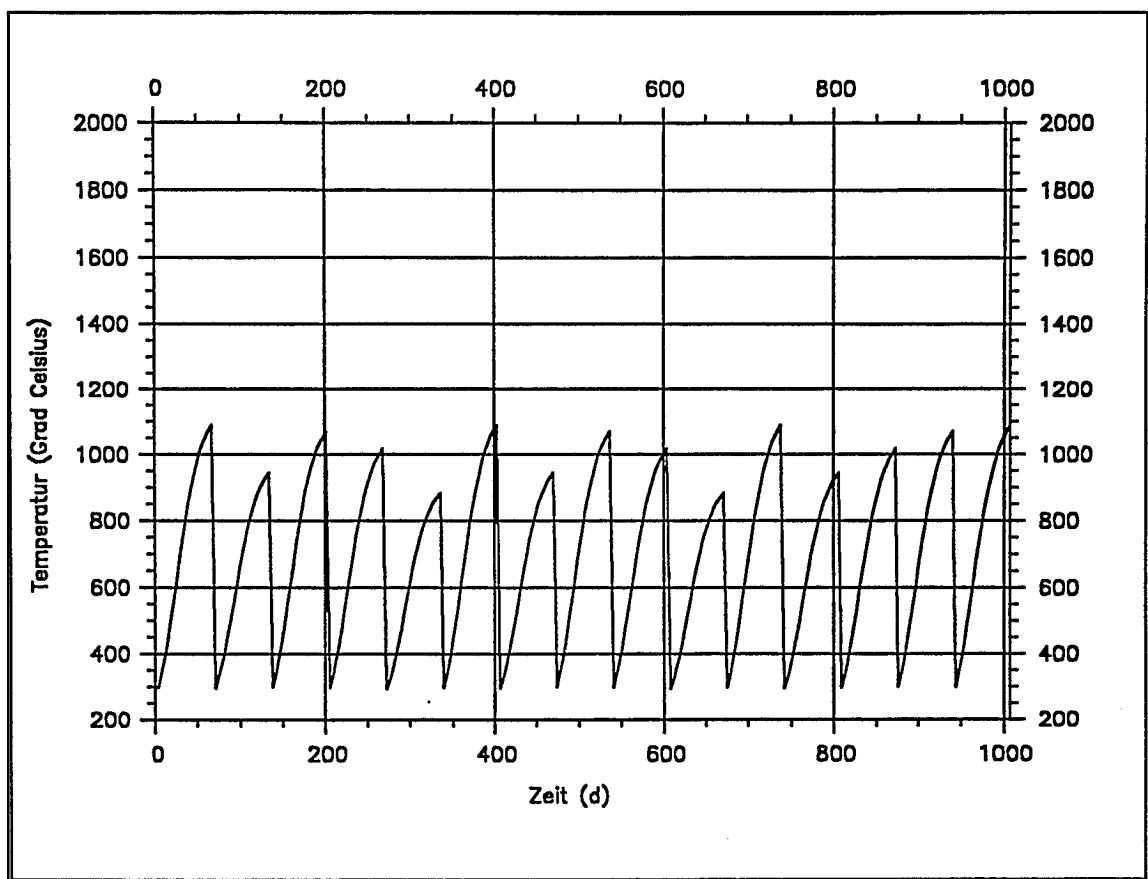


Abbildung 5.3: Temperaturverlauf für repräsentatives Brennelement

Vergleichende Rechnungen haben gezeigt, daß bei der Zugrundelegung einfacherer Temperaturverläufe, die errechneten Quellterme deutliche Abweichungen aufweisen. Für die Annahme, daß eine Kugel mehrfach einen Bereich zwischen minimal und maximal im Core vorhandener Temperatur linear durchläuft, werden geringere Quellterme ermittelt. Dies resultiert aus der nicht genügend berücksichtigten Verweildauer in den unteren, heißeren Corebereichen. Wird dagegen der tatsächliche Temperatur-Zeitverlauf in Coreachse als Referenz genommen, zeigt sich, daß die SiC-Schicht bereits nach einem Jahr ihre Barrierenwirkung verliert und Spaltprodukte aus den intakten Coated Particles in die Brennelementmatrix gelangen, von wo sie aufgrund der hohen Temperaturen relativ zügig in Kühlgas freigesetzt werden; diesen Temperaturverlauf als Referenz zu wählen, kann als viel zu konservativ betrachtet werden, aber als Abschätzung zu einer Obergrenze hin durchaus dienlich sein (siehe Abbildung 6.6, Seite 65).

In diesem Zusammenhang sollte erwähnt werden, daß der Einfluß der Temperaturverteilung innerhalb der Brennelementkugeln auf die Diffusion durch die Temperaturabhängigkeit der effektiven Diffusionskoeffizienten im Programm berücksichtigt wird.

5.2 Ergebnisse

Die im letzten Abschnitt geschilderten Voraussetzungen und Daten liefern nun ein definiertes Spaltproduktprofil innerhalb der Brennelementmatrix sowie den intakten und defekten Coated Particles. Wie bereits erläutert, ist für die Ausbildung der Profile der Temperaturverlauf der dominierende Parameter. Die Diffusionsprozesse im Graphit und in der SiC-Schicht haben für Cs^{137} erst oberhalb einer Temperatur von 800°C Einfluß auf die Spaltproduktprofile, was aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit des effektiven Diffusionskoeffizienten von der Temperatur leicht ersichtlich ist (vgl. Gleichung 3.9, S. 18).

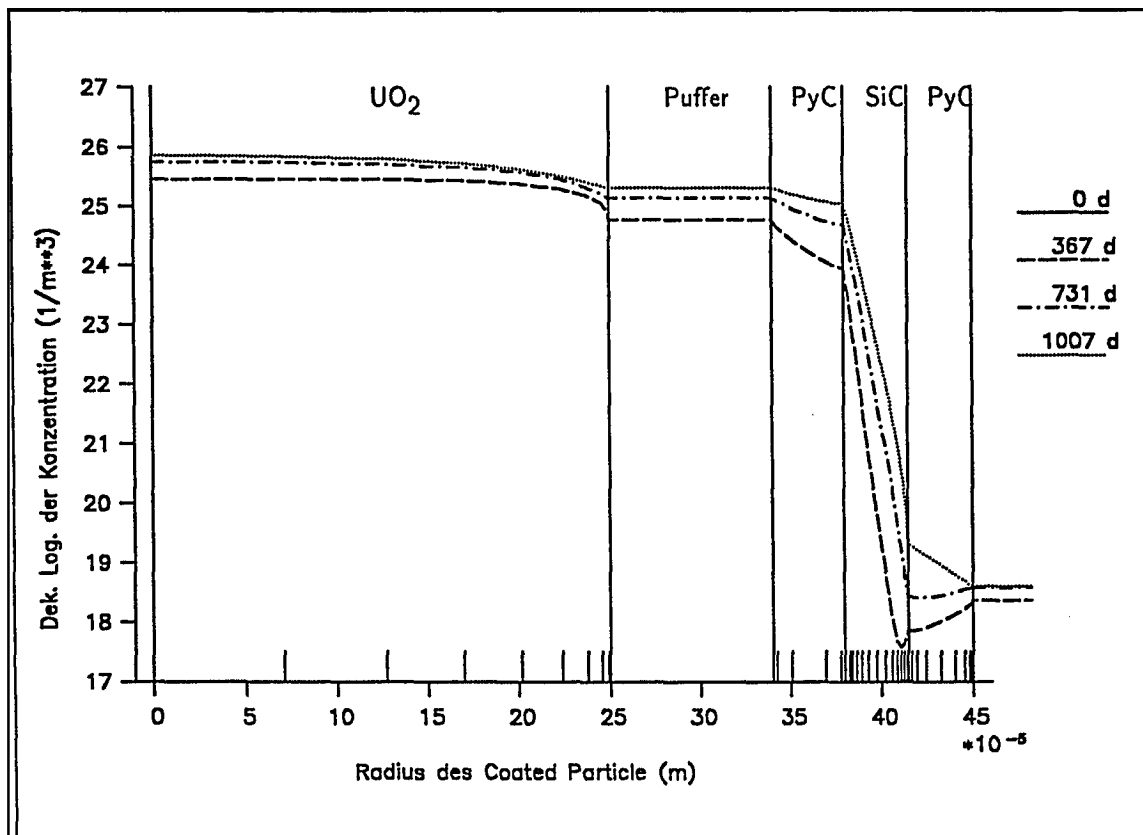


Abbildung 5.4: Cs-Konzentrationsverlauf im intakten Coated Particle

Abbildung 5.4 zeigt den Konzentrationsverlauf in einem intakten Coated Particle. Aufgetragen ist der dekadische Logarithmus der Spaltproduktkonzentration über dem Radius des Coated Particles; beachtet werden sollte bei dieser Art der Darstellung, daß keine absoluten Spaltproduktmengen aufgetragen sind sondern Konzentrationen und daß dabei das Volumen mit der dritten Potenz des Radius eingeht. Unten im Bild ist durch Strichelung die Verteilung und die Dichte der Diskretisierungsfeinzonen angedeutet. Man erkennt, daß in den Zonen großer Gradienten sehr fein diskretisiert wird bzw. werden muß und daß aufgrund der Volumenverteilung in einer Kugel generell mit steigendem Radius feiner diskretisiert werden sollte.

Die Pufferschicht ist mit nur einer Feinzone erfaßt worden, da dort die Diffusionsvorgänge derart schnell ablaufen (vgl. Abbildung 5.2 auf S.46, Diffusionskoeffizient CP-Puffer), daß sich über den hier betrachtenden Zeiträumen stets ein konstantes Spaltproduktprofil herausbildet.

Man erkennt, daß die SiC-Schicht für Cäsium eine erhebliche Barriere darstellt. Bis zu einem Zeitraum von zwei Jahren wird alles Cäsium komplett zurückgehalten; darüber hinaus kann es, wenn das Brennelement in die heißesten Zonen des Reaktors gelangt, zu geringfügiger Freisetzung aus den intakten Coated Particles kommen. Ferner zeigt die Abbildung, daß während 80% der Zeit Spaltprodukte aus der Matrix in die äußere PyC-Schicht und in die SiC-Schicht diffundieren können, wenn wie hier angenommen, ein Defektpartikelanteil vorausgesetzt wird. Ein einzelnes defektes Partikel ist mehr als hinreichend, das Konzentrationsniveau in der Matrix deutlich steigen zu lassen, so daß Spaltprodukte durch Konzentrationsausgleich in die beiden äußeren Zonen der intakten Partikel gelangen. Ein Rückhalteeffekt gegenüber der Freisetzung aus den Brennelement in die Gasphase kann aufgrund der geringen Mengen und Volumina nicht hergeleitet werden.

Die Spaltproduktverteilung in den defekten Coated Particles zeigt die Abbildung 5.5.

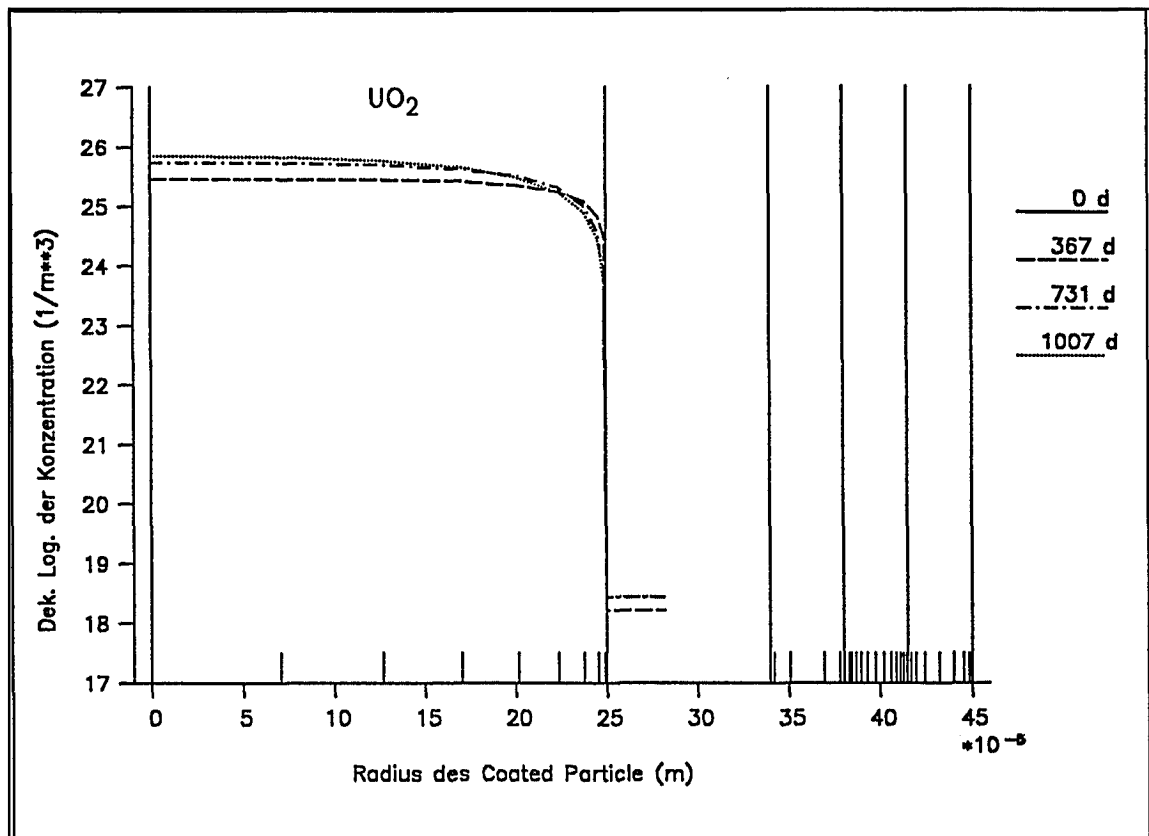


Abbildung 5.5: Cs-Konzentrationsverlauf im defekten Coated Particle

Die Spaltprodukte, die das defekte Coated Particle verlassen, gelangen in die Matrix, wobei sie rechnerisch gleichmäßig verteilt werden. Für die defekten Coated Particles gilt, daß diejenigen Spaltprodukte, die kontinuierlich durch Spaltung erzeugt werden, die Matrix zügig verlassen und somit den wesentlichen Beitrag zum Quellterm liefern.

Die Spaltproduktverteilung in der Brennelementmatrix zeigt die Abbildung 5.6.

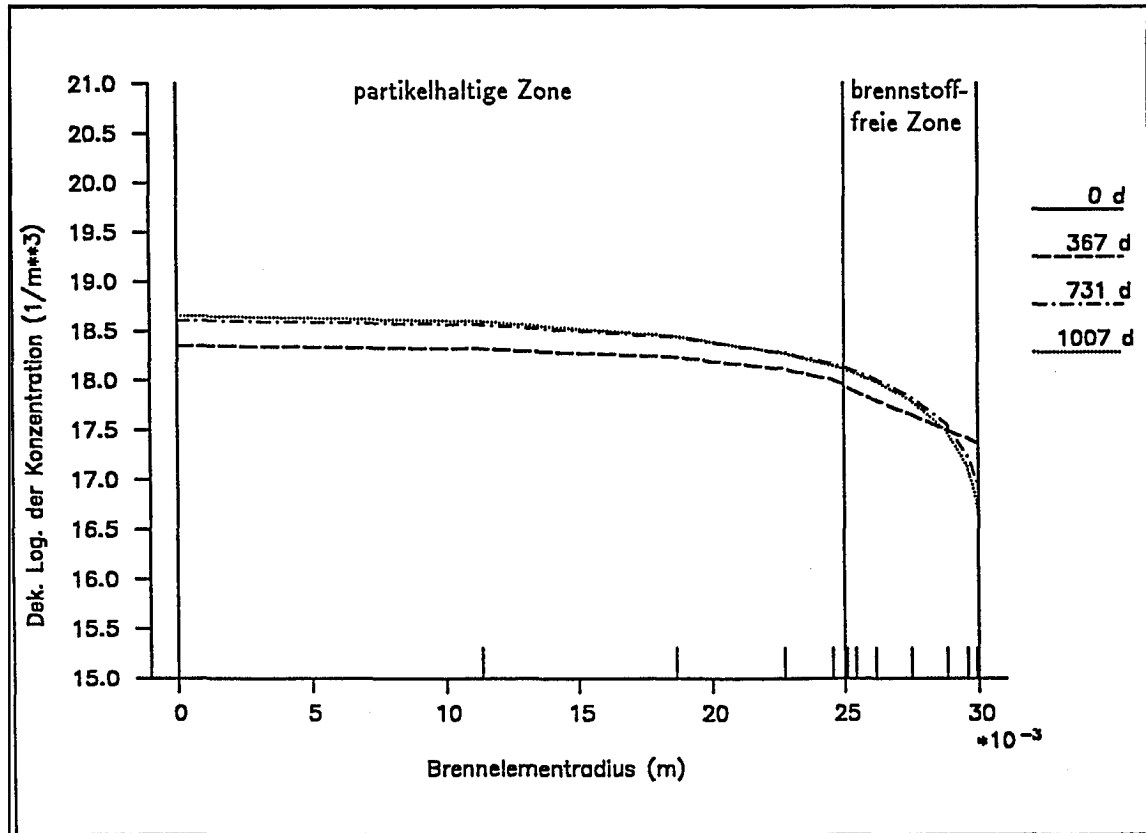


Abbildung 5.6: Konzentrationsverlauf in der Brennelementmatrix

Aufgetragen ist analog zum Coated Particle die Konzentration über dem Radius des Brennelementes. Mit fortschreitender Lebensdauer, d.h. höherem Abbrand, steigt die Konzentration und damit der Quellterm in die Gasphase. Die Abbildung ist zu sehen im Zusammenhang mit dem Temperaturverlauf Abbildung 5.3 auf Seite 51. Vergleicht man die Spaltproduktprofile für die aufgetragenen Zeiten mit den Temperaturen zu diesen Zeitpunkten, wird deutlich, daß zu den Zeitpunkten 731 und 1007 Tagen sich das Brennelement gerade in einer heißen Zone befindet. Dies hat im Gegensatz zum ersten Zeitpunkt zur Folge, daß die Spaltprodukte durch die hohen Temperaturen bedingt die äußeren Zonen des Brennelementes schnell verlassen können, während bei niedrigeren Temperaturen der Stoffübergang nicht so gut ist, was ein flacheres Profil innerhalb der brennstofffreien Zone bewirkt.

Für eine einzelne Kugel ergibt sich ein Fractional Release, wie es die nächste Abbildung 5.7 zeigt. Diejenigen Durchläufe durch die Temperaturmaxima in der Co-

remitte sind deutlich zu erkennen; die lokalen Temperaturmaxima bei geringeren Temperaturen haben nur untergeordneten Einfluß auf die Freisetzung.

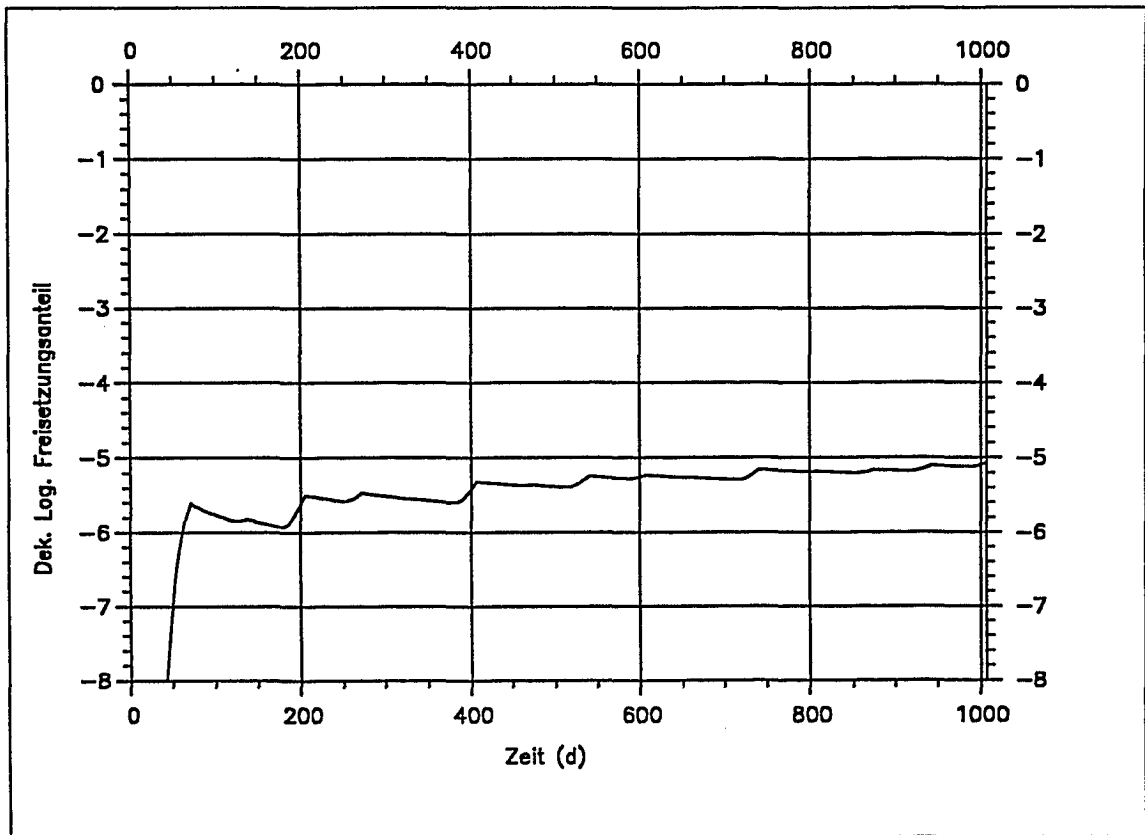


Abbildung 5.7: Relative Freisetzung aus repräsentativen Brennelement

Die zeitweisen Phasen mit negativer Steigung im Verlauf des Freisetzunganteils sind bedingt durch Stagnation des Stofftransportes aufgrund niedriger Temperaturen bei gleichzeitig kontinuierlichem Spaltproduktaufbau.

Die relative Freisetzung eines HTR-Modul bisheriger Standardauslegung ist unter sonst gleichen Voraussetzungen sogar noch um ungefähr drei Größenordnungen geringer, also etwa 10^{-8} . Diese hervorragenden Rückhalteeigenschaften resultieren aus der Tatsache, daß auch in der heißesten Corezone ein Brennelementtemperatur von 800°C nicht überschritten wird; im Hinblick auf die eingangs des Abschnittes erwähnte Temperaturabhängigkeit der Diffusionskoeffizienten ist dieses Ergebnis durchaus nicht überraschend.

Kapitel 6

Gesamtanlagenrechnung

Um Aussagen über die Freisetzung aus dem Core des Reaktors in den Primärkreis machen zu können, ist es notwendig, über die Rechnung eines einzelnen repräsentativen Brennelementes hinaus Rechnungen für den stationären Betrieb des Gesamtreaktors zu machen; nur auf diese Weise können die für die Freisetzung sehr wichtigen ortsabhängigen thermohydraulischen Bedingungen entsprechend berücksichtigt werden. Das Programm SPTRAN ist prinzipiell in der Lage, auch eine Verteilungsrechnung innerhalb des Primärkreises durchzuführen, da ein Ablagerungsmodell auf Metallen implementiert ist. Dies hat jedoch keine Relevanz für diese Arbeit, da eine Kreditnahme von der Verteilung innerhalb des Primärkreises beim momentanen Kenntnis- und Modellbildungsstand nicht belastbar genug ist; die vorliegenden Kenntnisse über das Spaltproduktablagerungsverhalten auf Metallen und Metalloxiden stammt im wesentlichen aus Experimenten im Rahmen des HHT-Projektes [11]. Die Standardannahme ist daher, daß sich alle Spaltprodukte, die den Reaktor durch die Heißgasleitung verlassen, sich auf der ersten Komponente des Primärkreises, der Heliumturbine, niederschlagen werden. Die Möglichkeit, durch geeignete Oberflächenbehandlung oder Beschichtung der Turbinenoberflächen eine Ablagerung deutlich zu reduzieren oder eine leichte Entfernbarkeit der Spaltprodukte zu garantieren, ist eine zusätzliche Option auf die Realisierung einer Anlage mit Heliumturbine.

Die Betrachtung der Ergebnisse aus dem vorherigen Kapitel für ein einzelnes Brennelement lassen bereits vermuten, daß die Freisetzung aus dem Core des Reaktors für den Fall, daß alle Auslegungsspezifikationen (d.h. kein Bruch von Coated Particles) eingehalten werden, so gering sein wird, daß prinzipiell Einbauten in den Primärkreis vorgenommen werden könnten. Die SiC-Schicht im Coated Particle stellt eine sehr wirksame Barriere dar, und die Kontamination durch freies Uran in der Matrix liegt an oder unterhalb der Nachweisgrenze.

Interessant ist nun die Fragestellung, wie die Freisetzung aussieht, wenn beispielsweise eine Fehlcharge von Brennelementen ins Core gelangt, wie beim AVR-Reaktor geschehen. Ein wesentlicher Variationsparameter ist folglich die Bruchrate von Coated Particles.

6.1 Datenbasis

Den Freisetzungrechnungen liegt das Anlagen- bzw. Reaktorkonzept zugrunde, wie es in Kapitel 4.3.1, Seite 40 vorgestellt wurde. Die Daten für das Reaktorcore entsprechen im wesentlichen denen des HTR-Modul in bisheriger Konzeption als Zweikreisanlage mit Dampfturbine. Durch die auf 945°C erhöhte Heliumaustrittstemperatur wird aufgrund der Gewährleistung passiv sicherer Wärmeabfuhr die Leistung auf 170 MW_{th} zurückgenommen. Dadurch ergeben sich gegenüber der Standardauslegung der Firma Interatom/Siemens eine weitere Reduzierung der mittleren Leistungsdichte und ein geringerer Heliumkühlmittelstrom.

Alle geometrischen Daten sowie Materialdaten des Reaktordruckbehälters werden unverändert übernommen. Für den Primärkreis wird keine detaillierte Auslegung vorgenommen, da wie bereits dargelegt von der Verteilung innerhalb des Primärkreises kein Kredit genommen wird. Programmtechnisch wird daher gewährleistet, daß die thermohydraulischen Randbedingungen an der Koaxialleitung des Reaktordruckbehälters gesetzt werden und keine Spaltprodukte in den Kaltgassammelraum gelangen. Der Primärkreis mit Turbine und drei wärmetauschenden Komponenten bietet für die metallischen Spaltprodukte soviel Oberfläche insbesondere auch bei niedrigen Temperaturen, daß ohne weiteres davon ausgegangen werden kann, daß keine Spaltprodukte mit dem Kühlgas von oben in den Reaktor wiedereintreten.

Die allgemeinen Reaktordaten, die den Thermohydraulik- und Freisetzungsberechnungen zugrunde liegen, sind in der folgenden Tabelle 6.1 zusammengefaßt.

Thermische Leistung	170	[MW]
Corehöhe	9.43	[m]
Coredurchmesser	3	[m]
Mittlere Leistungsdichte	2.55	[MW/m ³]
Kühlmittel	Helium	
Kühlmittelstrom	46.8	[kg/s]
Gaseintrittstemperatur	250	[°C]
Gasaustrittstemperatur	945	[°C]
Reaktordruck	60	[bar]
Anzahl der BE	360 000	
Anzahl der Anreicherungszone	1	
Art der BE-Beschickung	MEDUL	
Anzahl der BE-Durchläufe	15	
Porosität der Kugelschüttung	0.39	

Tabelle 6.1: Hauptdaten für HTR-Modul 170 MW

Für die Brennelementrechnung gilt die gleiche Datenbasis, wie sie für die Rechnung eines einzelnen Brennelementes angegeben wurde. Für alle anderen zu berücksichtigenden Anlagenteile (das sind die Reflektoren, Metalloberflächen existieren inner-

halb der durch das Diskretisierungsgitter abgebildeten Bereiches des Cores nicht) sind die Daten bzgl. des Diffusions- und Sorptionsverhaltens im Anhang B aufgeführt; als Strukturgraphit werden die Werte für H-451 verwendet, da belastbare Daten für andere Strukturgraphite nicht verfügbar sind (siehe [21]).

Zur Interpretationshilfe der folgenden dreidimensionalen Darstellungen werden in der folgenden Tabelle die Abmessungen der Komponenten im Diskretisierungsgitter (vgl. Abbildung 4.5, Seite 43) aufgeführt.

Komponente	radial [m]		axial [m]	
	Beginn	Ende	Beginn	Ende
Kugelhaufen	0.0	1.50	1.75	11.18
Deckenreflektor				
- durchströmter Teil	0.0	1.50	11.68	12.68
- nicht durchströmter Teil	0.0	2.16	13.08	14.63
Bodenreflektor	0.0	1.50	0.75	1.75
Seitenreflektor				
- durchströmter Teil	1.81	2.16	0.75	12.68
- nicht durchströmter Teil	1.50	1.81	0.0	12.68

Anmerkung: Seitenreflektor im Sinne der Diskretisierung seien die Komponenten *Hohlraum* und *vertikale Stromröhre* rechts neben dem Kugelhaufen.

Tabelle 6.2: Geometrische Abmessungen im Diskretisierungsgitter

In allen Abbildungen ist das Core stets so dargestellt, daß nach rechts die Höhe zunimmt und nach vorne der Radius. Alle geometrischen Maße sind in Meter angegeben; der Maßstab in radialer Richtung ist aufgrund der extrem schlanken Reaktorform größer gewählt als in axialer.

Für den stationären Betrieb des Reaktors stellt sich eine Feststofftemperaturverteilung im Core ein, wie es die folgende Abbildung 6.1 zeigt.

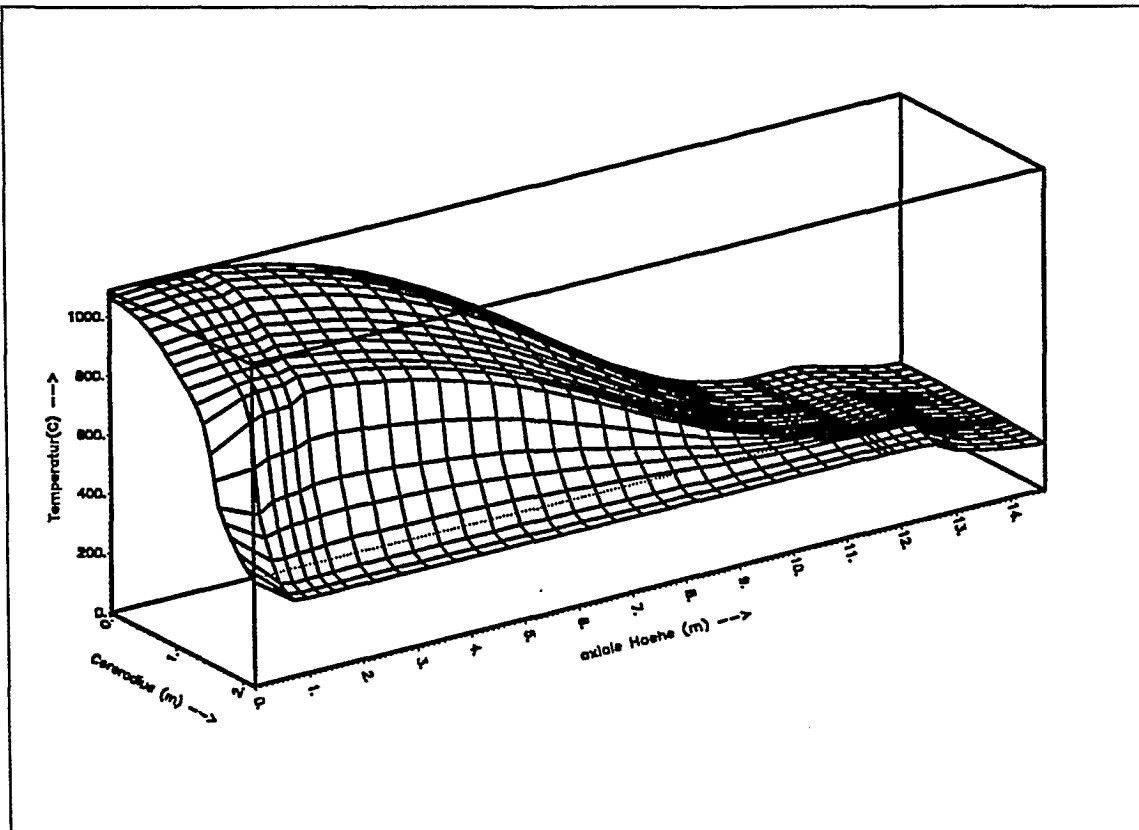


Abbildung 6.1: Feststofftemperaturen im Core

Einem maximalen Temperaturspektrum ist ein Brennelement dann ausgesetzt, wenn es das Core genau mittig durchläuft, wobei die höchste Temperatur ungefähr 1100°C beträgt; das Brennelement durchläuft während durchschnittlich 67 Tagen einen Temperaturdifferenz von 850°C .

Vergleichende V.S.O.P.-Rechnungen mit einem HTR-Modul bisheriger Auslegung, d.h. $200 \text{ MW}_{\text{th}}$ und 700°C mittlere Gasaustrittstemperatur, zeigen, daß sich an den Außenseiten der Reflektoren fast exakt die gleichen Feststofftemperaturen einstellen, wie bei der hier angenommenen Auslegung des Reaktors. Die Anhebung der mittleren Gasaustrittstemperatur wird, was die thermische Belastung aller Komponenten außerhalb der Reflektoren betrifft, durch die Reduktion der Reaktorleistung um 30 MW kompensiert.

Die Temperaturverteilung in der Gasphase ist nicht explizit dargestellt, weil sie in etwa gleich mit den Festkörpertemperaturen ist und keine zusätzliche Informationen bietet.

Die Cäsiumkonzentration im Reaktor, wie es die V.S.O.P.-Rechnung ergeben hat, ist in der Abbildung 6.2 dargestellt.

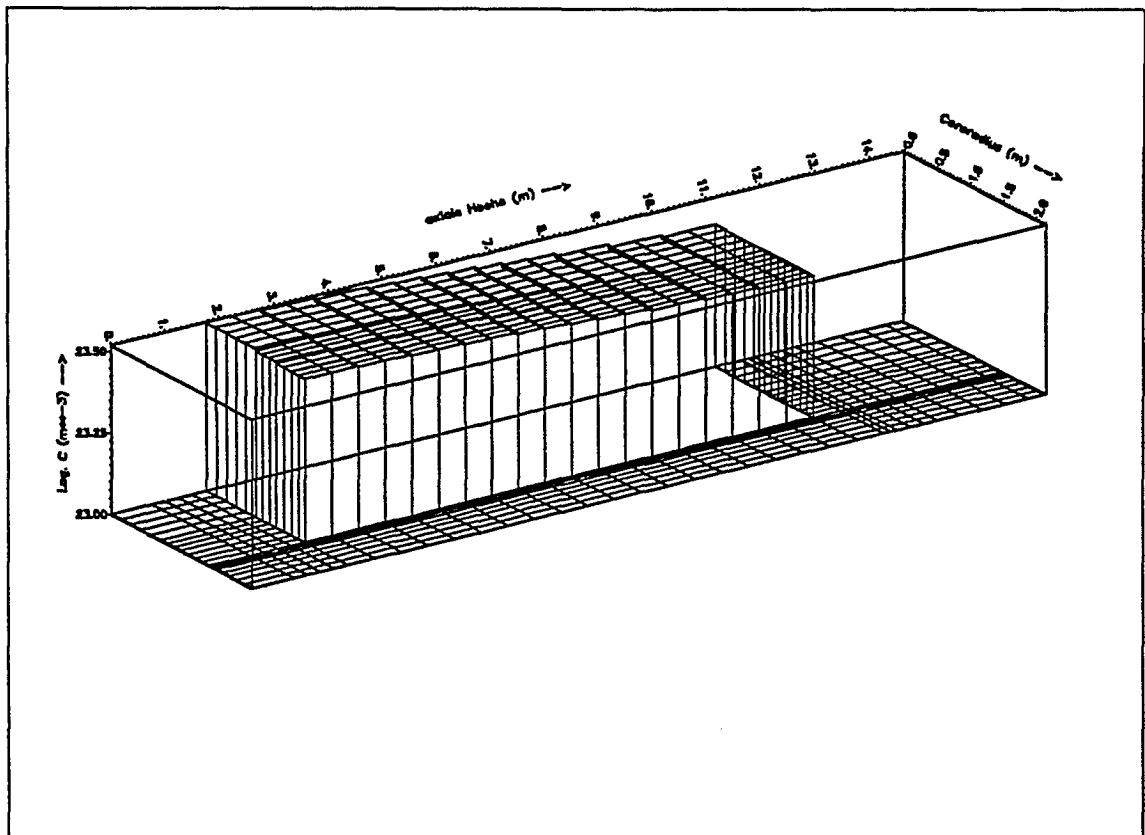


Abbildung 6.2: Cäsiumkonzentration im Reaktor

Die Konzentrationsverteilung im Core ist aufgrund der MEDUL-Beschickung sehr gleichmäßig; nur eine starke Vergrößerung, wie hier vorgenommen, zeigt überhaupt kleine Abweichungen. Dieses Cäsiuminventar befindet sich zu Beginn der SPTRAN-Rechnung ausschließlich in den Coated Particles und in der Brennelementmatrix und zwar anteilig so verteilt, wie es die KUGEL-Rechnung für ein einzelnes repräsentatives Brennelement ergeben hat.

Insgesamt hat der Reaktor ein Cs^{137} -Inventar von $N = 2.0 \cdot 10^{25}$ Atomen, was einer Aktivität von $A = \lambda N = 3.9 \cdot 10^5$ Ci entspricht. Die Beschränkung bei der Rechnung allein auf das Nuklid Cs^{137} ist bei der Normalbetriebsrechnung zulässig, da sich die Konzentrationen in den Graphiten in weitem Abstand von den Bereichen befinden, in denen Konzentrationsabhängigkeiten beim Stofftransport berücksichtigt werden müssten; in diesen Fällen, d.h. Störfallrechnungen mit massiver Freisetzung, müssen dann alle Cäsiumnuklide in die Rechnung eingehen.

6.2 Ergebnisse

Eine erste Näherung für die zu erwartende Freisetzung kann aus den Werten für die HHT-Demonstrationsanlage abgeschätzt werden. Setzt man voraus, daß die Freisetzung linear zur thermischen Leistung des Reaktors ist, so ergibt sich für Cs^{137} ein Wert von ungefähr 4.6 Ci pro Vollastjahr für einen 170MW_{th} Reaktor; bei einer Betriebszeit von 30 Jahren sind das circa 100 Ci. Unterschiede in der Thermohydraulik und der nuklearen Auslegung sind dabei nicht berücksichtigt.

Die einfache Multiplikation der errechneten Freisetzung für ein einzelnes Brennelement ist deutlich zu konservativ, da dort Freisetzung in spaltproduktfreies Helium angenommen wurde. Erst die Normierung mit den für den Reaktor errechneten ortsabhängigen Inventarwerten erlaubt eine Aussage über den Freisetzungsquellterm aus dem Bodenreflektor in den Primärkreis. Desweiteren können die Rechnungen für das einzelne Brennelement die wichtigen Ortsabhängigkeiten der thermohydraulischen Größen und der Spaltproduktkonzentration im Heliumstrom nicht berücksichtigen.

Die folgende Abbildung 6.3 zeigt die Verteilung der Spaltprodukte der Gasphase für den stationären Zustand.

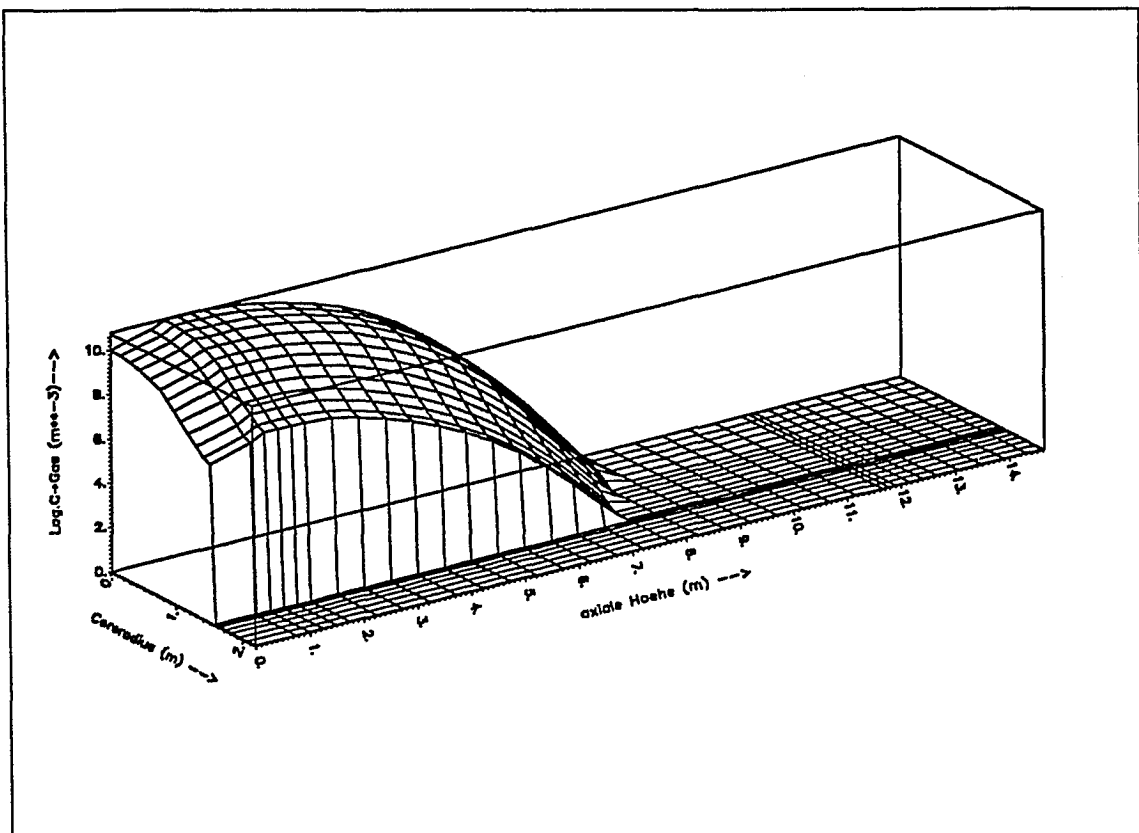


Abbildung 6.3: Cäsiumkonzentration in der Gasphase

Dargestellt ist die Konzentration in Teilchen pro Kubikmeter über der Reaktorgeometrie. Zu berücksichtigen ist die logarithmische Darstellung der Konzentration; nur in einem Bereich von 0m bis etwa 3m über dem Bodenreflektor ist sie von Bedeutung.

Das Verteilungsprofil der Spaltprodukte in der Gasphase korreliert mit dem Quellterm aus den Brennelementen ins Kühlgas Helium¹. Dieser ist in der nächsten Abbildung 6.4 gezeigt.

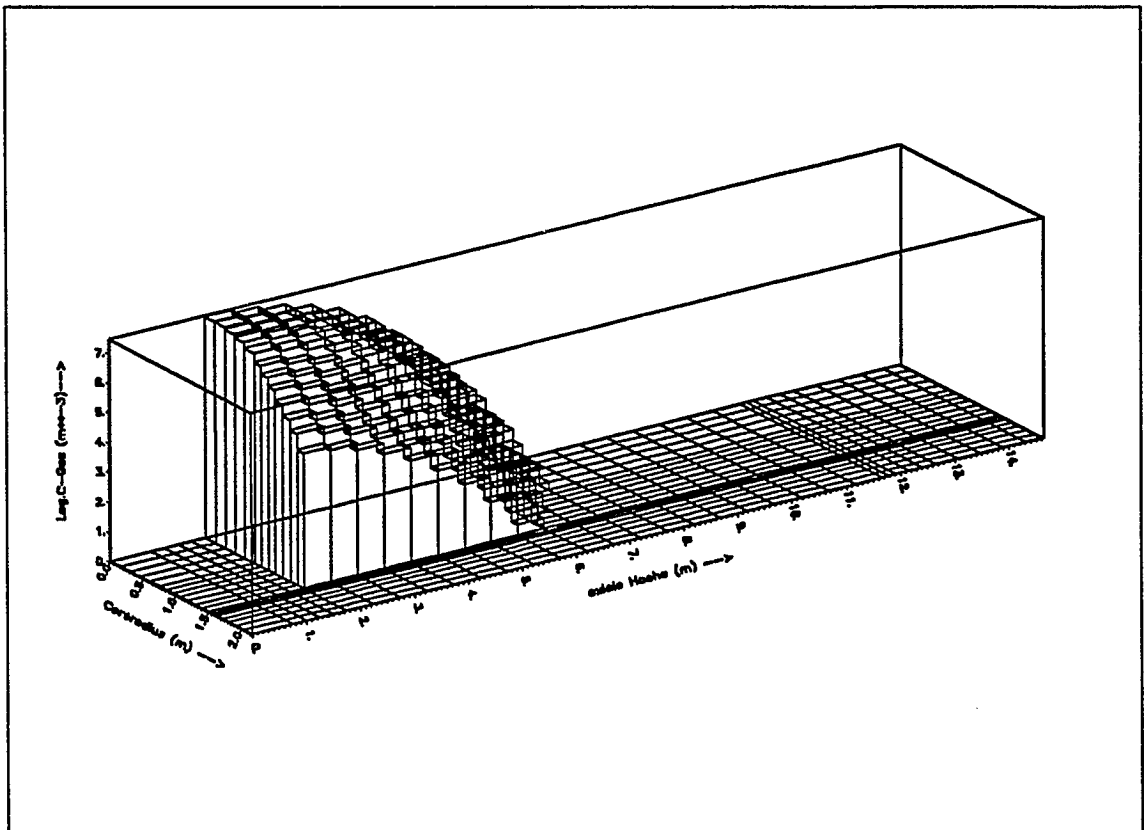


Abbildung 6.4: Quellterm aus den Brennelementen

Aufgetragen ist die Quellstärke in Anzahl Spaltprodukten pro Sekunde und einzeltem Brennelement über der Reaktorgeometrie; wiederum ist die logarithmische Darstellung zu berücksichtigen.

Die Quellterme sind, da der sich der Reaktor im stationären Zustand befindet, zeitlich invariant. In Bereichen oberhalb von 600°C ist überhaupt eine geringfügige Freisetzung zu beobachten und erst ab etwa 800°C sind die Quellterme so groß, daß sie nennenswert zur Freisetzung beitragen.

¹Bei genauer Betrachtung setzt der Anstieg der Spaltproduktkonzentration in der Gasphase vor dem Anstieg der Quellterme ein. Dies ist die Folge der Definition von Konzentrationen auf Gitterpunkten und anschließender Mittelung auf eine Masche einerseits (vgl. Anhang A) und zusätzlich der linearen Interpolation durch das Zeichenprogramm andererseits.

Der Bodenreflektor, die Abbildung 6.5 zeigt die Cäsiumverteilung in der obersten Masche Coremitte, ist kein Filter für Cäsium im Normalbetrieb.

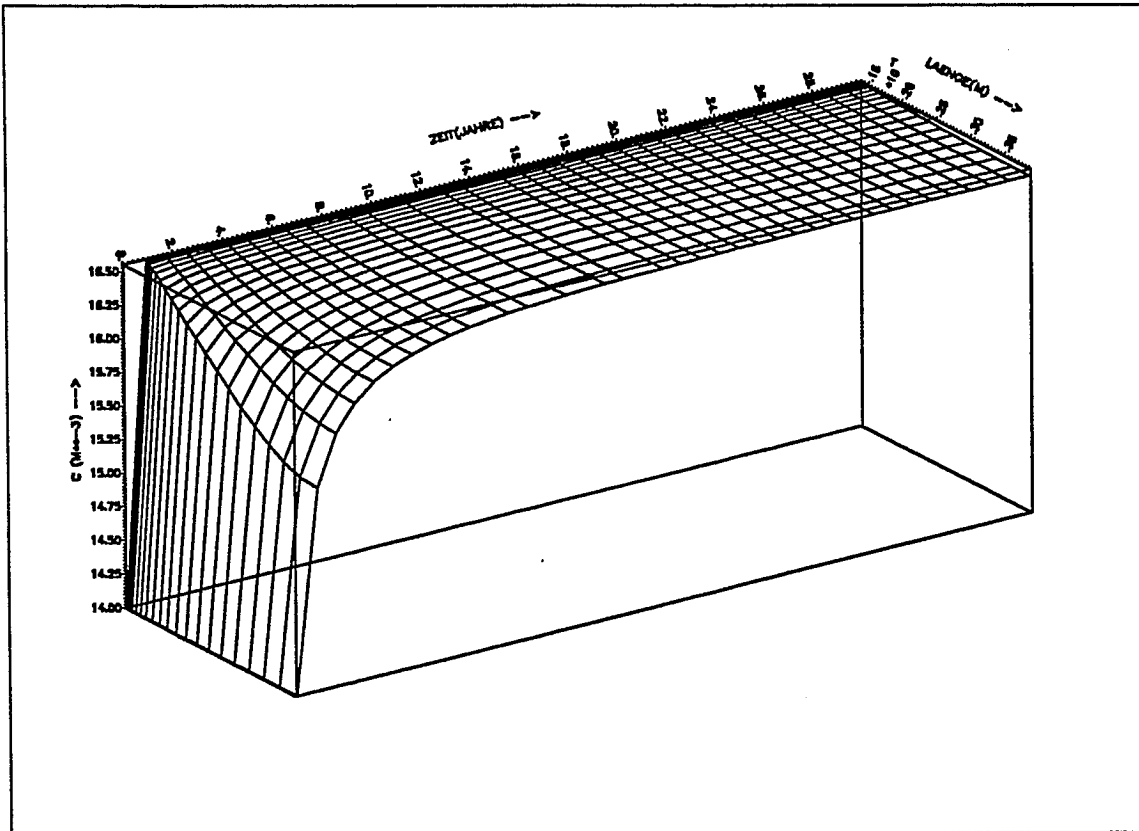


Abbildung 6.5: Cäsiumverteilung im Bodenreflektor

Aufgrund der geringen Konzentration im Gas kann sich durch die Kopplung über die Sorptionsisothermen keine große Spaltproduktkonzentration auf der Graphitoberfläche ergeben. Der Strukturgraphit H-451 hat ein deutlich schlechteres Sorptionsverhalten als Matrixgraphit der Sorte A3, so daß die Konzentrationen auf der Oberfläche unter $5 \cdot 10^{16} [1/m^3]$ liegen.

Der Graphit füllt sich über das erste Drittel der Betriebszeit allmählich mit Spaltprodukten, aber insgesamt werden im Bodenreflektor weniger als 0.1% der aus den Brennelementen freigesetzten Spaltprodukte gebunden. Allgemein kann festgehalten werden, daß Spaltprodukte, die aus den Brennelementen freigesetzt werden, in den Primärkreis gelangen.

Die entscheidende Aussage über die Spaltproduktmenge, die in den Primärkreis freigesetzt wird, enthält die nächste Abbildung. Aufgetragen ist der integrale Freisetzungswert aus dem Bodenreflektor in den Primärkreis bei einer erwarteten Betriebsdauer von 30 Jahren als Aktivität in Curie über der Bruchrate der Coated Particles.

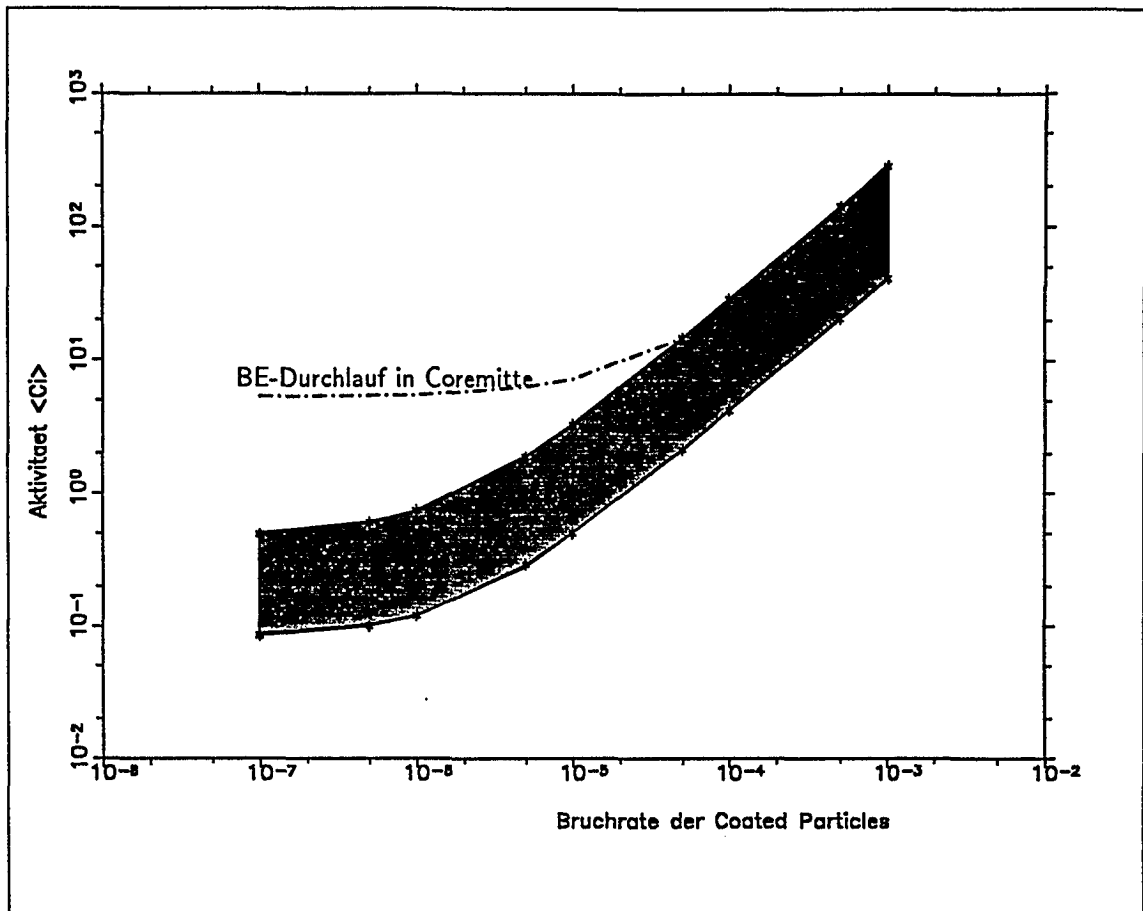


Abbildung 6.6: Freigesetzte Aktivität in 30 Betriebsjahren

Bei geringem Partikelbruch wird die Freisetzung durch den Anteil freien Urans im Matrixgraphit² bestimmt sowie der geringen Menge von Spaltprodukten, die durch die intakte Coated Particle Beschichtung diffundieren können. Dadurch nähert sich die Freisetzungskurve bei abnehmendem Partikelbruch einem Wert, der durch diese beiden Faktoren bestimmt wird. Sobald der mittlere Partikelbruch jedoch einen Wert von etwa 10^{-5} erreicht, ist nur die Freisetzung aus den defekten Partikeln entscheidend; alle anderen Quellen liegen dann Größenordnungen darunter.

Der Einfluß der Sorptionsisothermen auf die Berechnung der freigesetzten Aktivität soll durch den eingetragenen Streubereich deutlich gemacht werden. Dieser wird nach oben begrenzt durch die Sorptionsisothermen mit Sicherheitszuschlag [21]; die untere Begrenzung wird gebildet durch die neuesten Messungen von Sorptionsdaten nach Kwasny [18]. Als konservativ abgeschätzt kann die obere Kurve interpretiert werden, während die untere eher den Erwartungswert angibt.

Eingetragen ist noch zusätzlich eine weitere durch Strichelung gekennzeichnete Kurve; dieser Rechnung wurde zugrunde gelegt, daß das repräsentative Brennele-

²Für das im Graphit eines Brennelementes enthaltene freie Uran – ohne Urananteile durch herstellungsbedingte Kontamination – wird ein Wert von $10\mu\text{g}$ pro Kugel [23] eingesetzt.

ment stets den heißesten Corebereich durchläuft. Es ist gut zu erkennen, daß in Bereichen geringer Bruchrate eine erhöhte Freisetzung aus den intakten Coates Particles erfolgt, die deutlich über dem Anteil des freien Urans im Brennelement liegt. Dies gilt solange, bis wiederum der stark ansteigende Anteil der Spaltprodukte aus den defekten Parikeln alle anderen Quellen dominiert.

Eine Bewertung der Ergebnisse hängt davon ab, unter welchen Randbedingungen eine Anlage mit wartungsbedürftigen Einbauten im Primärkreis letztendlich betrieben werden soll. Dies umfaßt die Einschätzung, welche Strahlendosen dem Wartungspersonal gegenüber vertretbar sind und auf welcher Konzeption die Anlage beruht. Die in der Einleitung erwähnte Konzeptstudie des MIT [27] geht beispielsweise von der Annahme aus, daß bei zu hoher Kontamination der Turbine diese einfach gegen eine neue ausgetauscht wird und daß dies kostengünstig realisierbar sei.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Die Frage, ob beim gegenwärtigen Stand der Hochtemperaturreaktortechnik, insbesondere der Brennelementfertigung, eine Anlage verwirklicht werden kann, die wartungsbedürftige Anlagenteile im Primärkreislauf in Form einer Heliumturbine aufweist, muß insgesamt eher skeptisch beurteilt werden.

Für einen Hochtemperaturreaktor kleiner Leistung am Beispiel des HTR-Modul der Firma Siemens, dessen mittlere Gasaustrittstemperatur durch den Einsatz der Heliumturbine um 250°C auf 950°C erhöht angenommen wurde, sind Freisetzungsberechnungen sowohl für ein einzelnes Brennelement als auch für eine Gesamtanlage durchgeführt worden. Die größten Kontaminationsprobleme hinsichtlich der Turbine werden durch radioaktives Cäsium verursacht; die Betrachtungen konzentrieren sich aus diesem Grund auf Cs^{137} als Leitnuklid.

Die Rechnungen sowohl für ein einzelnes Brennelement wie für den Gesamtreaktor bestätigen die hervorragenden Spaltprodukt-rückhalteeigenschaften der Brennelemente bzw. der in ihnen enthaltenen Coated Particles. Die errechnete Freisetzung ist extrem gering und wird, wenn von intakten Partikeln ausgegangen wird, durch den Anteil freien Urans bestimmt, der in den graphitischen Brennelementmaterialien enthalten ist.

Über eine angenommene Betriebsdauer des Reaktors von 30 Jahren ergibt sich ein Erwartungswert für die in den Primärkreis freigesetzte Cäsiumaktivität in der Größenordnung von 1 Ci bei Brennelementen gemäß momentaner Standardspezifikation. Unterstellt man, daß herstellungsbedingter Partikelbruch fast völlig ausgeschlossen werden kann, ist dieser Wert nochmals um mehr als eine Größenordnung geringer.

Das eingangs erwähnte skeptische Gesamturteil, die Realisierbarkeit von wartungsbedürftigen Primärkreiseinbauten betreffend, resultiert aus den Untersuchungen über die Auswirkung des Bruches von Partikelbeschichtungen. Ein Bruch der Coatings ist bisher in sehr geringem Maße herstellungsbedingt vorhanden oder kann während des Reaktorbetriebes störfallbedingt durch zu hohe Temperaturen oder Strahlungsdosen hervorgerufen werden, sollten beispielsweise Brennelemente nicht

die Spezifikationen einhalten. Ein defektes Partikel pro Brennelement, dies entspricht einer Bruchrate von 10^{-4} , ist hinreichend, die ursprünglich ausgesprochen geringe Kontamination um bis zu zwei Größenordnungen zu steigern. Dies ist sowohl bei Wassereinbruchstörfällen sicherheitstechnisch relevant und führt bezüglich der Wartbarkeit der Turbine bereits zu Problemen.

Inwieweit es möglich ist, Maßnahmen zur Dekontamination zu ergreifen, ist Gegenstand sehr kontrovers geführter Diskussionen. Der Unsicherheitsfaktor bezüglich der Ablagerungen auf metallischen Oberflächen wird derzeit noch auf bis zu 4 Größenordnungen geschätzt. Ungeklärt ist die Frage, inwieweit die Spaltprodukte in die Oberflächen eindringen, damit die Frage, wie leicht sie sich wieder entfernen lassen. Das Spektrum der Meinungen reicht von der einfachen Abwaschbarkeit bis zur irreversiblen Kontamination.

Als Resultat der Rechnungen muß festgehalten werden, daß der Einsatz wartungsbedürftiger Einbauten im Primärkreis, wie hier angenommen in Form einer Heliumturbine, nicht unbedenklich ist. Unter der Voraussetzung, daß zuverlässige Prüfverfahren entwickelt werden können, kann zwar verhindert werden, daß Brennelemente mit herstellungsbedingtem Partikelbruch in den Brennelementkreislauf gelangen, kommt es jedoch zu störfallbedingtem Partikelbruch, kann die Menge der freigesetzten Spaltprodukte kaum noch beeinflusst werden. Insofern kann erst die Verwendung SiC-beschichteter Brennelemente – falls zukünftige experimentelle Untersuchungen die Erwartungen sehr guter Spaltproduktrückhalteeigenschaften bestätigen – die Realisierung einer Anlage mit Heliumturbine ermöglichen.

Anhang A

Diskretisierung der Transportgleichungen

Die Differentialgleichungen für den Stofftransport werden im Programm SPTRAN mittels der Methode der *Finiten Differenzen* gelöst. Die Grundlagen für die numerische Behandlung solcher linearer Differentialgleichungssysteme entstammen [22] und werden entsprechend den Bedürfnissen der Spaltproduktrechnung in SPTRAN angewandt, wobei unterschieden werden muß in:

- Transport im Feststoff (Graphit)
- Transport im Gas
- Transport auf und in metallische Oberflächen

Die aufwendigste Diskretisierung ist für den Transport im Gas notwendig, da dieser Fall im Core zweidimensional behandelt werden muß. Für den Transport in den Feststoffen genügt jedoch eine eindimensionale Betrachtungsweise.

Die zweidimensionale Transportgleichung für das Core in Zylinderkoordinaten lautet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial t} = & - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(C(r, z, t) \cdot u(r, z, t) \cdot r \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial z} \left(C(r, z, t) \cdot v(r, z, t) \right) \\ & + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad}(T(r, z, t)) \cdot r \cdot \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial r} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax}(T(r, z, t)) \cdot \frac{\partial C(r, z, t)}{\partial z} \right) \\ & - \lambda \cdot C(r, z, t) + \dot{Q}'''(r, z, t) \end{aligned} \quad (A.1)$$

Bedeutung der Variablen:

- $C(r, z, t)$: zeitlich und örtlich abhängiges Konzentrationsfeld
- $D_{rad}(T(r, z, t))$: temperaturabhängiger turbulenter Diffusionskoeffizient in radialer Richtung
- $D_{ax}(T(r, z, t))$: temperaturabhängiger turbulenter Diffusionskoeffizient in axialer Richtung
- $T(r, z, t)$: zeitlich und örtlich abhängige Temperatur
- $\dot{Q}'''(r, z, t)$: zeitlich und örtlich abhängige Quelle
- $u(r, z, t)$: zeitlich und örtlich abhängige Geschwindigkeitskomponente in radialer Richtung r
- $v(r, z, t)$: zeitlich und örtlich abhängige Geschwindigkeitskomponente in axialer Richtung z
- λ : Zerfallskonstante des transportierten Nuklides
- r : radiale Koordinate
- z : axiale Koordinate
- t : Zeit

Im folgenden werden diese funktionalen Zusammenhänge als bekannt vorausgesetzt und die Gleichung kann in der kürzeren Form

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial C}{\partial t} = & - \underbrace{\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) - \frac{\partial}{\partial z} (C \cdot v)}_{\text{Konvektion}} \\
 & + \underbrace{\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{Diffusion}} \\
 & - \lambda \cdot C + \dot{Q}'''
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

verwendet werden.

Die Gleichung ist nun über das Volumen zu integrieren; dies führt zu:

$$\begin{aligned}
 \int_V \frac{\partial C}{\partial t} dV = & - \int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) dV - \int_V \frac{\partial}{\partial z} (C \cdot v) dV \\
 & + \int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) dV + \int_V \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) dV \\
 & - \int_V \lambda \cdot C dV + \int_V \dot{Q}''' dV
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

Für die Diskretisierung ist ein geeignetes Gitter zu wählen. Die Diskretisierung bezüglich der Ortskoordinaten erfolgt unter der Annahme konstanter Konzentrationen für das Bilanzvolumen (BV); bezüglich des zeitlichen Verlaufs wird ein linearer Ansatz gemacht. Das folgende Bild veranschaulicht das Diskretisierungsgitter.

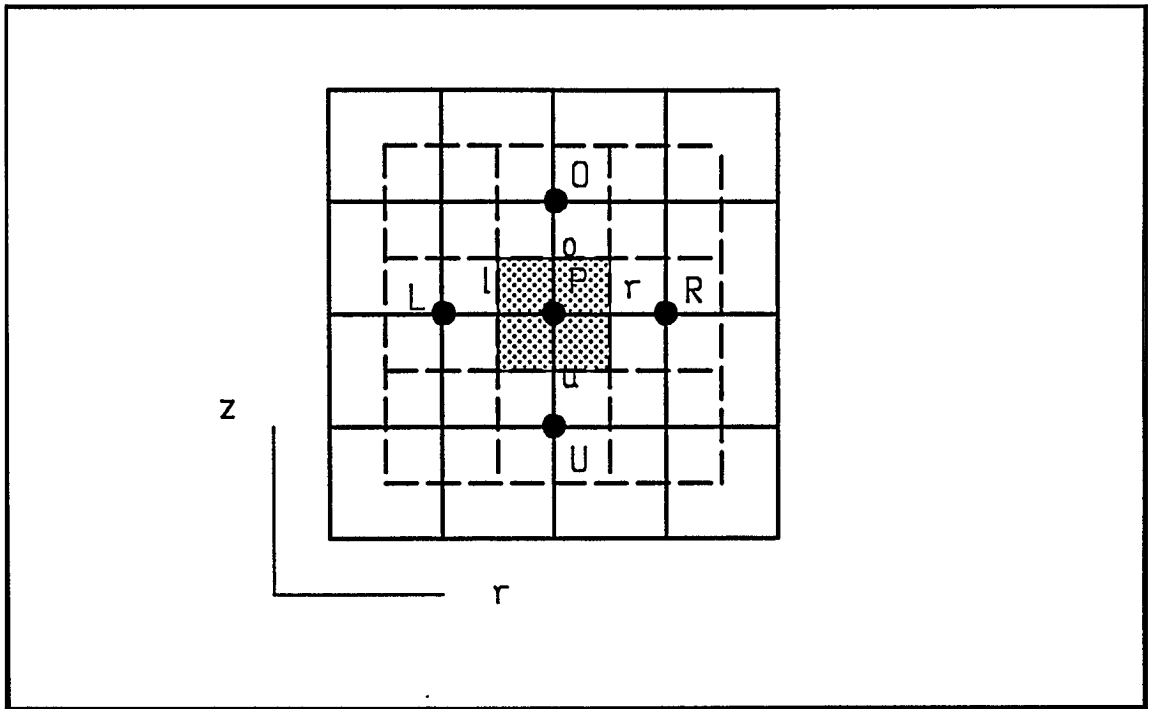


Abbildung A.1: Diskretisierungsgitter

Einige der Volumenintegrale sind unter den obigen Annahmen trivial zu diskretisieren. Es ergibt sich direkt:

$$\int_V \frac{\partial C}{\partial t} dV = \frac{C_P - C_{P,alt}}{\Delta t} V \quad (A.4)$$

$$\int_V \lambda \cdot C dV = \lambda \cdot C \cdot V \quad (A.5)$$

$$\int_V \dot{Q}''' dV = \dot{Q}''' \cdot V \quad (A.6)$$

Die Integrale, die den Diffusions- bzw. Konvektionsanteil beschreiben, sind ein wenig komplizierter in der Lösung.

Das Volumen dV , welches einen Kreisring mit der Breite dr und der Höhe dz beschreibt, lässt sich darstellen als:

$$dV = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \cdot dz \quad (A.7)$$

Somit ergibt sich für den konvektiven Anteil in radialer Richtung:

$$\begin{aligned}
 & \int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) dV \\
 &= \int_r \int_z \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \, dz \, dr \\
 &= 2 \cdot \pi \cdot (z_o - z_u) \int_r \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) \, dr \\
 &= 2 \cdot \pi \cdot (z_o - z_u) \cdot (C_r \cdot u_r \cdot r_r - C_l \cdot u_l \cdot r_l)
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

Analoge Lösung für die axiale Richtung:

$$\begin{aligned}
 & \int_V \frac{\partial}{\partial z} (C \cdot v) dV \\
 &= \int_z \int_r \frac{\partial}{\partial z} (C \cdot v) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \, dr \, dz \\
 &= \pi \cdot (r_r^2 - r_l^2) \int_z \frac{\partial}{\partial z} (C \cdot v) \, dz \\
 &= \pi \cdot (r_r^2 - r_l^2) \cdot (C_o \cdot v_o - C_u \cdot v_u)
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

Für den durch Diffusion bedingten Anteil in radialer Richtung gilt:

$$\begin{aligned}
 & \int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) dV \\
 &= \int_r \int_z \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \, dz \, dr \\
 &= 2 \cdot \pi \cdot (z_o - z_u) \int_r \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) \, dr \\
 &= 2 \cdot \pi \cdot (z_o - z_u) \cdot \left(D_{rad} \cdot r_r \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_r \right. \\
 &\quad \left. - D_{rad} \cdot r_l \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_l \right)
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Analoge Lösung wiederum für axiale die Richtung:

$$\begin{aligned}
 & \int_V \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) dV \\
 &= \int_z \int_r \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \, dr \, dz \\
 &= \pi \cdot (r_r^2 - r_l^2) \int_z \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) dz \\
 &= \pi \cdot (r_r^2 - r_l^2) \cdot \left(D_{ax} \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_o - D_{ax} \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_u \right)
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Die Bilanzvolumina können frei gewählt werden. Aufgrund der Zylinderkoordinaten bietet es sich an, die Bilanzoberflächen in axialer Richtung (Indices o, u) arithmetisch mittig zwischen die Gitterpunkte zu legen und in radialer Richtung (Indices l, r) das quadratische Mittel zu nehmen. Dementsprechend ergibt sich

$$z_o = \frac{z_O + z_P}{2} \tag{A.12}$$

$$z_u = \frac{z_P + z_U}{2} \tag{A.13}$$

$$r_l = \sqrt{\frac{r_L^2 + r_P^2}{2}} \tag{A.14}$$

$$r_r = \sqrt{\frac{r_P^2 + r_R^2}{2}} \tag{A.15}$$

Die Konzentrationen und Gradienten der Konzentrationen an Bilanzoberflächen sind geeignet zu bestimmen. Für die Konzentrationen – bedingt durch den konvektiven Anteil – wird das *Upwind-Differenzenverfahren* [22] angewandt. Für die Konzentration C_l beispielsweise gelte:

$$\begin{aligned}
 C_l &= C_L \text{ falls } u_e > 0, \\
 C_l &= C_P \text{ falls } u_e < 0,
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

Dem Verfahren liegt der Gedanke zugrunde, daß bei genügend starker Konvektion die Konzentration eines Punktes nur von den Zuständen stromaufwärts abhängt. Sinngemäß Gleiches gilt für die Konzentrationen an den anderen Bilanzgrenzoberflächen.

Das Kontrollvolumen in Bild A.1 auf Seite 71 (dies ist die gepunktete Fläche) wird im folgenden als Masche bezeichnet. Für die Maschen wie für das Diskretisierungsgitter gilt, daß die Indizierung von links nach rechts (Index I) und von unten nach oben (Index J) läuft.

Somit ergibt sich für die Koordinaten z_u, z_l :

$$z_u = z_{(J)}; \quad z_o = z_{(J+1)}; \quad r_l = r_{(I)}; \quad r_r = r_{(I+1)} \quad (\text{A.17})$$

Das Volumen einer Masche berechnet sich zu:

$$V_{(I,J)} = \varepsilon_{(I,J)} \cdot \pi \cdot (z_{(J+1)} - z_{(J)}) \cdot (r_{(I+1)}^2 - r_{(I)}^2) \quad (\text{A.18})$$

Für die Koordinatenmittelpunkte der Maschen gilt:

$$r_R = \sqrt{\frac{r_{rr}^2 + r_r^2}{2}}; \quad r_P = \sqrt{\frac{r_l^2 + r_r^2}{2}}; \quad r_L = \sqrt{\frac{r_{ll}^2 + r_l^2}{2}} \quad (\text{A.19})$$

$$z_O = \frac{z_{oo} + z_o}{2}; \quad z_P = \frac{z_o + z_u}{2}; \quad z_U = \frac{z_u + z_{uu}}{2} \quad (\text{A.20})$$

Konzentrationsverlauf über Volumen (P-r,r-R); Annahme linearer Verlauf:

$$C(V) = \tilde{K}_0 + \tilde{K}_1 \cdot V; \quad \frac{dC}{dV} = \tilde{K}_1 \quad (\text{A.21})$$

Berechnung der Koeffizienten $\tilde{K}_0, \tilde{K}_1$:

$$\begin{aligned} r = r_P & : C_P = \tilde{K}_0 \\ r = r_r & : C = C_r \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

sowie

$$V(r_r) = \pi(r_r^2 - r_P^2)(z_o - z_u) = K_P(r_r^2 - r_P^2) = \frac{V_P}{2} \quad (\text{A.23})$$

Eingesetzt folgt:

$$C(V_r) = C_r = C_P + \tilde{K}_1 \cdot K_P(r_r^2 - r_P^2) \quad (\text{A.24})$$

$$\Leftrightarrow \tilde{K}_1 = \frac{C_r - C_P}{K_P(r_r^2 - r_P^2)} = \frac{C_r - C_P}{K_P(r_r^2 - \frac{r_r^2 + r_l^2}{2})} = \frac{C_r - C_P}{K_P(\frac{r_r^2 - r_l^2}{2})} \quad (\text{A.25})$$

Somit ergibt sich für den Konzentrationsverlauf abhängig vom Volumen:

$$C(V) = C_P + \frac{C_r - C_P}{K_P(r_r^2 - r_l^2)} \cdot V \quad \text{für } V_P < V < V_r \quad (\text{A.26})$$

Damit ergibt sich die partielle Ableitung zu:

$$\frac{\partial C}{\partial V} = \frac{C_r - C_P}{K_P \left(\frac{r_r^2 - r_l^2}{2} \right)} \quad (\text{A.27})$$

Im betrachteten Bereich gilt für das Volumen:

$$V(r) = K_P(r^2 - r_P^2) \quad ; \quad \frac{\partial V}{\partial r} = 2 \cdot K_P \cdot r \quad (\text{A.28})$$

Für die gesuchte partielle Ableitung der Konzentration nach der radialen Ortskoordinate gilt:

$$\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial V} \cdot \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{C_r - C_P}{K_P \left(\frac{r_r^2 - r_l^2}{2} \right)} \cdot 2 \cdot K_P \cdot r \quad (\text{A.29})$$

An der Bilanzgrenze (P, r) gilt somit:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_{P,r} = \frac{4 \cdot (C_r - C_P)}{r_r^2 - r_l^2} \cdot r \quad (\text{A.30})$$

Analoges Vorgehen für den Bereich $(r-R)$:

$$C(V) = \hat{K}_0 + \hat{K}_1 \cdot V; \quad \frac{dC}{dV} = \hat{K}_1 \quad (\text{A.31})$$

$$r = r_r \iff V_r = 0 : C(V_r) = C_r \quad (\text{A.32})$$

Eingesetzt folgt:

$$C(V_r) = C_r + \hat{K}_1 \cdot V_R = C_R \iff \hat{K}_1 = \frac{C_R - C_r}{V_{r-R}} = \frac{C_R - C_r}{\frac{V_R}{2}} \quad (\text{A.33})$$

Somit ergibt sich für den Konzentrationsverlauf abhängig vom Volumen:

$$C(V) = C_r + \frac{C_R - C_r}{K_R(r_R^2 - r_r^2)} \cdot V \quad (\text{A.34})$$

$$= C_r + \frac{C_R - C_r}{K_R \left(\frac{r_{rr}^2 + r_l^2}{2} - r_r^2 \right)} \cdot V \quad (\text{A.35})$$

$$= C_r + \frac{C_R - C_r}{K_R \left(\frac{r_{rr}^2 + r_l^2}{2} \right)} \cdot V \quad (\text{A.36})$$

Damit folgt:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial V}\right)_{R,l} = \frac{C_R - C_r}{K_R \left(\frac{r_{rr}^2 - r_r^2}{2}\right)} \quad (\text{A.37})$$

Im betrachteten Bereich gilt für das Volumen:

$$V(r) = K_R(r^2 - r_r^2) \quad ; \quad \frac{\partial V}{\partial r} = 2 \cdot K_R \cdot r \quad (\text{A.38})$$

An der Bilanzgrenze (r, R) gilt somit:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{R,l} = \frac{4 \cdot (C_R - C_r)}{r_{rr}^2 - r_r^2} \cdot r \quad (\text{A.39})$$

Elimination von C_r (RB: Teilchenfluß an Grenze r_r muß gleich sein):

$$D_P \cdot A_r \cdot \varepsilon_P \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{P,r} \stackrel{!}{=} D_R \cdot A_r \cdot \varepsilon_R \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{R,l} \quad (\text{A.40})$$

$$D_P \varepsilon_P \frac{4(C_r - C_P)}{r_r^2 - r_l^2} r_r = D_R \varepsilon_R \frac{4(C_R - C_r)}{r_{rr}^2 - r_r^2} r_r \quad (\text{A.41})$$

Erweiterung mit $(\pi \cdot \Delta z)^{-1}$, wobei vereinfachend gilt:

$$V_P = \pi \Delta z (r_r^2 - r_l^2) \varepsilon_P; V_R = \pi \Delta z (r_{rr}^2 - r_r^2) \varepsilon_R \quad (\text{A.42})$$

$$D_P \varepsilon_P^2 \frac{C_r - C_P}{V_P} = D_R \varepsilon_R^2 \frac{C_R - C_r}{V_R} \quad (\text{A.43})$$

$$D_P \varepsilon_P^2 V_R (C_r - C_P) = D_R \varepsilon_R^2 V_P (C_R - C_r) \quad (\text{A.44})$$

$$(D_P \varepsilon_P^2 V_R + D_R \varepsilon_R^2 V_P) C_r = D_R \varepsilon_R^2 V_P C_R + D_P \varepsilon_P^2 V_R C_P \quad (\text{A.45})$$

$$C_r = \frac{D_R \varepsilon_R^2 V_P C_R + D_P \varepsilon_P^2 V_R C_P}{D_P \varepsilon_P^2 V_R + D_R \varepsilon_R^2 V_P} \quad (\text{A.46})$$

Mit dieser Gleichung lässt sich für die rechte Hälfte einer Masche der Gradient formulieren:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{P,r} = \frac{4\left(\frac{D_R \varepsilon_R^2 V_P C_R + D_P \varepsilon_P^2 V_R C_P}{D_P \varepsilon_P^2 V_R + D_R \varepsilon_R^2 V_P} - C_P\right)}{r_r^2 - r_l^2} \cdot r \quad (\text{A.47})$$

$$= \frac{4(D_R \varepsilon_R^2 V_P C_R - D_R \varepsilon_R^2 C_P)}{(D_P \varepsilon_P^2 V_R + D_R \varepsilon_R^2 V_P)(r_r^2 - r_l^2)} \cdot r \quad (\text{A.48})$$

$$= \frac{4D_R \varepsilon_R^2 V_P (C_R - C_P) \pi \Delta z \varepsilon_P}{V_P (D_P \varepsilon_P^2 V_R + D_R \varepsilon_R^2 V_P)} \cdot r \quad (\text{A.49})$$

$$= \frac{4D_R \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_P} (C_R - C_P) \pi \Delta z \varepsilon_P}{D_P \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_R} V_R + D_R \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_P} V_P} \cdot r \quad (\text{A.50})$$

Somit ergibt sich für den Gradienten:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{P,r} = (C_R - C_P) \frac{4D_R \varepsilon_R \pi \Delta z}{D_R V_P \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_P} + D_P V_R \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_R}} \cdot r \quad (\text{A.51})$$

Analoges Vorgehen für linke Maschenhälfte führt zu:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{P,l} = (C_P - C_L) \frac{4D_L \varepsilon_L \pi \Delta z}{D_L V_P \frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_P} + D_P V_L \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_L}} \cdot r \quad (\text{A.52})$$

Konzentrationsverlauf über Volumen in z-Richtung. Annahme: linearer Verlauf Bereich (P - o - O)

Für den Bereich (P - o):

$$C(V) = \tilde{K}_0 + \tilde{K}_1 \cdot V \Rightarrow C = C_P \text{ bei } z = z_P \text{ bzw. } V_P = 0 \quad (\text{A.53})$$

$$\Rightarrow C(V) = C_P + \tilde{K}_1 \cdot V \quad (\text{A.54})$$

$$V(z) = \varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2) (z - z_P) \quad (\text{A.55})$$

$$V(z = z_o) = \varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2) (z_o - z_P) = \varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2) \frac{(z_o - z_u)}{2} \quad (\text{A.56})$$

$$\tilde{K}_1 = \frac{2(C_o - C_P)}{\varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2)(z_o - z_u)} = \frac{2(C_o - C_P)}{V_P} \quad (\text{A.57})$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial V}\right)_{P,o} = \frac{2(C_o - C_P)}{V_P}; \quad \frac{\partial V}{\partial z} = \varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2) \quad (\text{A.58})$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_{P,o} = \left(\frac{\partial C}{\partial V}\right)\left(\frac{\partial V}{\partial z}\right) = \frac{2(C_o - C_P)}{V_P} \varepsilon_P \pi (r_r^2 - r_l^2) \quad (\text{A.59})$$

$$= (C_o - C_P) \frac{2}{z_o - z_u} \quad (\text{A.60})$$

Bereich (o - O), analoges Vorgehen:

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial C}{\partial V}\right)_{O,o} = (C_O - C_o) \frac{2}{z_{oo} - z_o} \quad (\text{A.61})$$

RB: Teilchenstrom an Bilanzgrenzen gleich

$$D_P \cdot A_o \cdot \varepsilon_P \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_{P,o} \stackrel{!}{=} D_O \cdot A_o \cdot \varepsilon_O \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{O,o} \quad (\text{A.62})$$

$$D_P \varepsilon_P (C_o - C_P) \frac{2}{z_o - z_u} = D_O \varepsilon_O (C_O - C_o) \frac{2}{z_{oo} - z_o} \quad (\text{A.63})$$

$$D_P \varepsilon_P (C_o - C_P)(z_{oo} - z_o) = D_O \varepsilon_O (C_O - C_o)(z_o - z_u) \quad (\text{A.64})$$

$$C_o = \frac{D_O \varepsilon_O (z_o - z_u) C_O + D_P \varepsilon_P (z_{oo} - z_o) C_P}{D_O \varepsilon_O (z_o - z_u) + D_P \varepsilon_P (z_{oo} - z_o)} \quad (\text{A.65})$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_{P,o} = \frac{2(C_O - C_P) D_O \varepsilon_O (z_o - z_u)}{(z_o - z_u)(D_O \varepsilon_O (z_o - z_u) + D_P \varepsilon_P (z_{oo} - z_u))} \quad (\text{A.66})$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_{P,o} = (C_O - C_P) \frac{2 D_O \varepsilon_O}{D_O \varepsilon_O (z_o - z_u) + D_P \varepsilon_P (z_{oo} - z_u)} \quad (\text{A.67})$$

Analoges Vorgehen für untere Maschenhälfte:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial z}\right)_{P,u} = (C_P - C_U) \frac{2 D_U \varepsilon_U}{D_U \varepsilon_U (z_o - z_u) + D_P \varepsilon_P (z_u - z_{uu})} \quad (\text{A.68})$$

Ermittlung des konvektiven Anteils in radialer Richtung; Formulierung für allgemeine Masche:

$$\int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) dV$$

$$= 2 \cdot \pi \cdot (z_o - z_u) \cdot \left(D_{rad} \cdot r_r \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_r - D_{rad} \cdot r_l \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_l \right) \quad (\text{A.69})$$

$$= 2\pi(z_o - z_u)\varepsilon_P \left[D_P r_r (C_R - C_P) \frac{4D_R \varepsilon_R \pi \Delta z}{D_R V_P \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_P} + D_P V_R \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_R}} r_r \right.$$

$$\left. - D_P r_l (C_P - C_L) \frac{4D_L \varepsilon_L \pi \Delta z}{D_L V_P \frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_P} + D_P V_L \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_L}} r_l \right] \quad (\text{A.70})$$

$$= 2\pi(z_o - z_u)\varepsilon_P \left[D_P r_r^2 (C_R - C_P) \right.$$

$$\frac{4D_R \varepsilon_R \pi (z_o - z_u)}{D_R \pi (z_o - z_u) (r_r^2 - r_l^2) \varepsilon_P \frac{\varepsilon_R}{\varepsilon_P} + D_P \pi (z_o - z_u) (r_{rr}^2 - r_r^2) \varepsilon_R \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_R}}$$

$$\left. - D_P r_l^2 (C_P - C_L) \right] \quad (\text{A.71})$$

$$- D_P r_l^2 (C_P - C_L)$$

$$\frac{4D_L \varepsilon_L \pi \Delta z}{D_L \pi (z_o - z_u) (r_r^2 - r_l^2) \varepsilon_P \frac{\varepsilon_L}{\varepsilon_P} + D_P \pi (z_o - z_u) (r_l^2 - r_{ll}^2) \varepsilon_L \frac{\varepsilon_P}{\varepsilon_L}} \left. \right]$$

$$= (C_R - C_P) \frac{8D_R \varepsilon_R D_P \varepsilon_P \pi r_r^2 (z_o - z_u)}{D_R \varepsilon_R (r_r^2 - r_l^2) + D_P \varepsilon_P (r_{rr}^2 - r_r^2)}$$

$$- (C_P - C_L) \frac{8D_L \varepsilon_L D_P \varepsilon_P \pi r_l^2 (z_o - z_u)}{D_L \varepsilon_L (r_r^2 - r_l^2) + D_P \varepsilon_P (r_l^2 - r_{ll}^2)} \quad (\text{A.72})$$

Ausgedrückt über Indices (I, J):

$$\begin{aligned}
 &= (C_{(I+1,J)} - C_{(I,J)}) \\
 &\quad \frac{8D_{(I+1,J)}\varepsilon_{(I+1,J)}D_{(I,J)}\varepsilon_{(I,J)}\pi r_{(I+1,J)}^2(z_{(I,J+1)} - z_{(I,J)})}{\underbrace{D_{(I+1,J)}\varepsilon_{(I+1,J)}(r_{(I+1,J)}^2 - r_{(I-1,J)}^2) + D_{(I,J)}\varepsilon_{(I,J)}(r_{(I+2,J)}^2 - r_{(I+1,J)}^2)}_{FR_{(I,J)}}} \\
 &- (C_{(I,J)} - C_{(I-1,J)}) \\
 &\quad \frac{8D_{(I-1,J)}\varepsilon_{(I-1,J)}D_{(I,J)}\varepsilon_{(I,J)}\pi r_{(I-1,J)}^2(z_{(I,J+1)} - z_{(I,J)})}{\underbrace{D_{(I-1,J)}\varepsilon_{(I-1,J)}(r_{(I+1,J)}^2 - r_{(I-1,J)}^2) + D_{(I,J)}\varepsilon_{(I,J)}(r_{(I-1,J)}^2 - r_{(I-3,J)}^2)}_{FL_{(I,J)}}}
 \end{aligned} \tag{A.73}$$

Durch Vergleich der Indices ist leicht ersichtlich, daß

$$\Rightarrow FL_{(I,J)} = FR_{(I-1,J)} \tag{A.74}$$

Somit ergibt sich der Diffusionsanteil in radialer Richtung zu:

$$\begin{aligned}
 &\int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{rad} \cdot r \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) dV = \\
 &\quad FL_{(I,J)}C_{(I-1,J)} - (FR_{(I,J)} + FL_{(I,J)})C_{(I,J)} + FR_{(I,J)}C_{(I+1,J)}
 \end{aligned} \tag{A.75}$$

Ermittlung des Diffusionsanteils in axialer Richtung:

$$\int_V \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) dV = \pi \cdot (r_r^2 - r_l^2) \cdot \varepsilon_P \left(D_{ax} \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_o - D_{ax} \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_u \right) \tag{A.76}$$

$$\begin{aligned}
 &= \pi(r_r^2 - r_l^2)D_P\varepsilon_P \left[\begin{aligned} & (C_O - C_P) \frac{2D_O\varepsilon_O}{D_O\varepsilon_O(z_o - z_u) + D_P\varepsilon_P(z_{oo} - z_o)} \\ & (C_P - C_U) \frac{2D_U\varepsilon_U}{D_U\varepsilon_U(z_o - z_u) + D_P\varepsilon_P(z_u - z_{uu})} \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{A.77}$$

Ausgedrückt über Indices (I, J):

$$\begin{aligned}
 &= (C_{(I,J+1)} - C_{(I,J)}) \\
 &\quad \frac{2\pi D_{(I,J)} \varepsilon_{(I,J)} D_{(I,J+1)} \varepsilon_{(I,J+1)} (r_{(I+1,J)}^2 - r_{(I,J)}^2)}{\underbrace{D_{(I,J+1)} \varepsilon_{(I,J+1)} (z_{(I,J+1)} - z_{(I,J)}) + D_{(I,J)} \varepsilon_{(I,J)} (z_{(I,J+2)} - z_{(I,J+1)})}_{FO_{(I,J)}}} \\
 &- (C_{(I,J)} - C_{(I,J-1)}) \\
 &\quad \frac{2\pi D_{(I,J)} \varepsilon_{(I,J)} D_{(I,J-1)} \varepsilon_{(I,J-1)} (r_{(I+1,J)}^2 - r_{(I,J)}^2)}{\underbrace{D_{(I,J-1)} \varepsilon_{(I,J-1)} (z_{(I,J+1)} - z_{(I,J)}) + D_{(I,J)} \varepsilon_{(I,J)} (z_{(I,J)} - z_{(I,J-1)})}_{FU_{(I,J)}}}
 \end{aligned} \tag{A.78}$$

Zur Beachtung:

$$FO_{(I,J)} = FU_{(I,J+1)}; \quad \text{da } r_{(I+1,J)}^2 - r_{(I,J)}^2 = r_{(I+1,J+1)}^2 - r_{(I,J+1)}^2$$

Damit ergibt sich der Diffusionsanteil in axialer Richtung zu:

$$\begin{aligned}
 &\int_V \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax} \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) dV \\
 &\quad = FO_{(I,J)} C_{(I,J+1)} - (FO_{(I,J)} + FU_{(I,J)}) C_{(I,J)} + FU_{(I,J)} C_{(I,J-1)}
 \end{aligned} \tag{A.79}$$

Ermittlung des konvektiven Anteils in radialer Richtung:

$$\int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(C \cdot u \cdot r \right) dV = 2 \cdot \pi \cdot \varepsilon_P \cdot (z_o - z_u) \cdot (C_r \cdot u_r \cdot r_r - C_l \cdot u_l \cdot r_l) \tag{A.80}$$

$$\text{mit } \dot{V}_{(r)} = u_{(r)} 2\pi r \cdot \Delta z \cdot \varepsilon \tag{A.81}$$

$$= C_r \dot{V}_r - C_l \dot{V}_l \tag{A.82}$$

Anwendung des „Upwind-scheme“:

$$= C_P \max(\dot{V}_r, 0) + C_R \max(-\dot{V}_r, 0) - C_P \max(-\dot{V}_l, 0) - C_L \max(\dot{V}_l, 0) \tag{A.83}$$

Ausgedrückt über Indices (I, J) :

$$\begin{aligned}
 &= C_{(I,J)} \max(VRCK_{(I+1,J)}, 0) \\
 &+ C_{(I+1,J)} \max(-VRCK_{(I+1,J)}, 0) \\
 &- C_{(I,J)} \max(-VRCK_{(I,J)}, 0) \\
 &- C_{(I-1,J)} \max(VRCK_{(I,J)}, 0)
 \end{aligned} \tag{A.84}$$

Damit ergibt sich der konvektive Anteil in radialer Richtung zu:

$$\begin{aligned}
 \int_V \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (C \cdot u \cdot r) dV = \\
 - C_{(I-1,J)} \max(VRCK_{(I,J)}, 0) \\
 + C_{(I,J)} [\max(VRCK_{(I+1,J)}, 0) - \max(-VRCK_{(I,J)}, 0)] \\
 + C_{(I+1,J)} \max(-VRCK_{(I+1,J)}, 0)
 \end{aligned} \tag{A.85}$$

Ermittlung des konvektiven Anteils in axialer Richtung:

$$\int_V (C \cdot v) dV = \pi \cdot \varepsilon_P \cdot (r_r^2 - r_l^2) \cdot (C_o \cdot v_o - C_u \cdot v_u) \tag{A.86}$$

$$\begin{aligned}
 \text{mit } \dot{V}_{(z)} &= v_{(z)} \pi (r_r^2 - r_l^2) \cdot \varepsilon \\
 &= C_o \dot{V}_o - C_u \dot{V}_u
 \end{aligned} \tag{A.87}$$

Anwendung des „Upwind-scheme“:

$$= C_P \max(\dot{V}_o, 0) + C_O \max(-\dot{V}_o, 0) - C_P \max(-\dot{V}_u, 0) - C_U \max(\dot{V}_u, 0) \tag{A.88}$$

Ausgedrückt über Indices (I, J) :

$$\begin{aligned}
 &= C_{(I,J)} \max(VZCK_{(I,J+1)}, 0) \\
 &+ C_{(I,J+1)} \max(-VZCK_{(I,J+1)}, 0) \\
 &- C_{(I,J)} \max(-VZCK_{(I,J)}, 0) \\
 &- C_{(I,J-1)} \max(VZCK_{(I,J)}, 0)
 \end{aligned} \tag{A.89}$$

Damit ergibt sich der konvektive Anteil in axialer Richtung zu:

$$\begin{aligned}
 \int_V (C \cdot v) dV = & \\
 & - C_{(I,J-1)} \max(VZCK_{(I,J)}, 0) \\
 & + C_{(I,J)} [\max(VZCK_{(I,J+1)}, 0) - \max(-VZCK_{(I,J)}, 0)] \\
 & + C_{(I,J+1)} \max(-VZCK_{(I,J+1)}, 0)
 \end{aligned} \tag{A.90}$$

Somit ergibt sich letztendlich die für eine Masche diskretisierte Transportgleichung zu:

$$\begin{aligned}
 & \frac{C_{(I,J)} - C_{(I,J)\text{alt}}}{\Delta t} \cdot V_{(I,J)} = \dot{Q}_{(I,J)} V_{(I,J)} + \\
 & + C_{(I-1,J)} \overbrace{\left[\max(VRCK_{(I,J)}, 0) + FL_{(I,J)} \right]}^{FLCK_{(I,J)}} \\
 & + C_{(I+1,J)} \overbrace{\left[-\max(-VRCK_{(I+1,J)}, 0) + FR_{(I,J)} \right]}^{FRCK_{(I,J)}} \\
 & + C_{(I,J+1)} \overbrace{\left[-\max(-VZCK_{(I,J+1)}, 0) + FO_{(I,J)} \right]}^{FOCK_{(I,J)}} \\
 & + C_{(I,J-1)} \overbrace{\left[\max(VZCK_{(I,J)}, 0) + FO_{(I,J)} \right]}^{FUCK_{(I,J)}} \\
 & + C_{(I,J)} \overbrace{\left[-\max(VRCK_{(I+1,J)}, 0) + \max(-VRCK_{(I,J)}, 0) \right.}^{FPDTCK_{(I,J)} \doteq F0DTCK_{(I,J)}} \\
 & \quad - \max(VZCK_{(I,J+1)}, 0) + \max(-VZCK_{(I,J)}, 0) \\
 & \quad FR_{(I,J)} - FL_{(I,J)} - FO_{(I,J)} - FU_{(I,J)} \\
 & \quad \left. - \lambda V_{(I,J)} \right]
 \end{aligned} \tag{A.91}$$

Anhang B

Daten

Größe	Symbol	Einheit	Umrechnung in alte Einheiten
Aktivität	A	Bq	$1 \text{ Bq} = \frac{1}{\text{s}} = 2.7 \cdot 10^{-11} \text{ Ci}$ $1 \text{ Ci} = 3.7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$
Äquivalentdosis	D	Sv	$1 \text{ Sv} = 100 \text{ rem}$
Druck	p	Pa	$1 \text{ Pa} = 1 \frac{\text{N}}{\text{m}^2} = 10^{-5} \text{ bar} = 7.5 \cdot 10^{-3} \text{ Torr}$ $1 \text{ Pa} = 0.102 \frac{\text{kp}}{\text{m}^2} = 0.987 \cdot 10^{-5} \text{ atm}$
Energie	E	J	$1 \text{ J} = 6.242 \cdot 10^{18} \text{ eV} = 2.39 \cdot 10^{-4} \text{ kcal}$ $1 \text{ eV} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

Konstante	Symbol	Einheit	Wert
Avogadro	N_A	$\frac{1}{\text{mol}}$	$6.022045 \cdot 10^{23}$
Boltzmann	k	$\frac{\text{J}}{\text{K}}$	$1.38062 \cdot 10^{-23}$
Elementarladung	e	C	$1.6021 \cdot 10^{-19}$
Gaskonstante, allg.	R_0	$\frac{\text{J}}{\text{K mol}}$	8.3144
Planck	h	J s	$6.626176 \cdot 10^{-34}$
	$\hbar$	J s	$1.054589 \cdot 10^{-34}$

Tabelle B.1: Häufig benötigte Größen, Einheiten und Konstanten

Binäres System	$D_0 \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$	Binäres System	$D_0 \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$
He - Cs	$0.431 \cdot 10^{-4}$	Ar - Cs	$0.094 \cdot 10^{-4}$
He - Sr	$0.565 \cdot 10^{-4}$	Ar - Sr	$0.123 \cdot 10^{-4}$
He - Ag	$0.850 \cdot 10^{-4}$	Ar - Ag	$0.165 \cdot 10^{-4}$
He - Ba	$0.521 \cdot 10^{-4}$	Ar - Ba	$0.109 \cdot 10^{-4}$
He - Zn	$0.953 \cdot 10^{-4}$	Ar - Zn	$0.210 \cdot 10^{-4}$
He - I	$0.525 \cdot 10^{-4}$	Ar - I	$0.107 \cdot 10^{-4}$
He - T ₂	$0.525 \cdot 10^{-4}$	Ar - T ₂	$0.107 \cdot 10^{-4}$
He - HT	$1.188 \cdot 10^{-4}$	Ar - HT	$0.480 \cdot 10^{-4}$
He - DT	$1.124 \cdot 10^{-4}$	Ar - DT	$0.433 \cdot 10^{-4}$
He - HD	$1.292 \cdot 10^{-4}$	Ar - HD	$0.552 \cdot 10^{-4}$
He - D ₂	$1.196 \cdot 10^{-4}$	Ar - D ₂	$0.483 \cdot 10^{-4}$
He - D ₂ O	$0.659 \cdot 10^{-4}$	Ar - D ₂ O	$0.183 \cdot 10^{-4}$
He - T ₂ O	$0.653 \cdot 10^{-4}$	Ar - T ₂ O	$0.178 \cdot 10^{-4}$
He - Y	$0.656 \cdot 10^{-4}$	Ar - Y	$0.137 \cdot 10^{-4}$
He - Sc	$0.752 \cdot 10^{-4}$	Ar - Sc	$0.172 \cdot 10^{-4}$

Tabelle B.2: Normierungskonstanten für binäre Diffusionskoeffizienten [2]

Incoloy 800				
Element	$\vartheta_0 \left[\frac{1}{s} \right]$	$Q_0 \left[\frac{J}{mol} \right]$	$Q_S \left[\frac{J}{mol} \right]$	$1 - \beta$
Cs	10^{11}	$235 \cdot 10^3$	$80 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-5}$
Rb	10^{11}	$235 \cdot 10^3$	$83.4 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-5}$
Sr	10^{11}	$235 \cdot 10^3$	$157.4 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-6}$
Ba	10^{11}	$235 \cdot 10^3$	$205.5 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-6}$
Ag	10^{11}	$200 \cdot 10^3$	$280.5 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-5}$
I	$10^{10} \dots 10^{12}$	$180 \cdot 10^3$	0	0

Inconel 617				
Element	$\vartheta_0 \left[\frac{1}{s} \right]$	$Q_0 \left[\frac{J}{mol} \right]$	$Q_S \left[\frac{J}{mol} \right]$	$1 - \beta$
Cs	10^{11}	$250 \cdot 10^3$	$80 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-6}$
Rb	10^{11}	$250 \cdot 10^3$	$83.4 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-6}$
Sr	10^{11}	$250 \cdot 10^3$	$157.4 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-7}$
Ba	10^{11}	$250 \cdot 10^3$	$205.5 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-7}$
Ag	10^{11}	$215 \cdot 10^3$	$280.5 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^{-6}$
I	$10^{10} \dots 10^{12}$	$180 \cdot 10^3$	0	0

Tabelle B.3: Frequenzfaktoren, Aktivierungsenergien und Penetrationskoeffizienten für Sorptionsvorgänge an Metalloberflächen [21]

A3-3 Matrixgraphit				H-451 Strukturgraphit
	Referenz	Sicherheitszuschlag		Referenz
Cäsium		< 1350°C	> 1350°C	
A_H	21.94	24.24	25.6	22.85
B_H	-44093	-44093	-46297	-39359
A_F	97.81	100.0	107.8	162.9
B_F	-248213	-248210	-260610	-374150
D_F	-1.3689	-1.3689	-1.4824	-2.56
E_F	3683	3683	3867	6120
C_t $[\frac{1}{m^3}]$	$1.17 \cdot 10^{24}$	$1.17 \cdot 10^{24}$	$1.17 \cdot 10^{24}$	$5.73 \cdot 10^{23}$

Strontium		< 1700°C	> 1700°C	
A_H	23.75	24.44	25.97	19.5
B_H	-60509	-60509	-63537	-48772
A_F	125.9	126.6	135.2	89.7
B_F	-338940	-338940	-355910	-266280
D_F	-1.913	-1.913	-2.045	-1.32
E_F	5214	5214	5475	4090
C_t $[\frac{1}{m^3}]$	$1.56 \cdot 10^{23}$	$1.56 \cdot 10^{23}$	$1.56 \cdot 10^{23}$	$1.25 \cdot 10^{23}$

Jod				
A_F	9.4			9.39
B_F	-22221			-22222
D_F	0.041			0.041
E_F	284			284

Tabelle B.4: Referenzdaten zur Sorptionskoeffizientenberechnung [21]

Anmerkung: Die tabellierten Werte sind auf das SI-Einheitensytem umgerechnet; Vielfache der Grundgrößen werden nicht verwendet. Die Daten können ohne Umrechnung in den SPTRAN/KUGEL Eingabedatensatz eingesetzt werden. Für die Umrechnung der in [21] tabellierten Werte in das SI-System gilt:

$$\begin{aligned} A_F &= \tilde{A}_F - D_F \cdot \ln(N_A \cdot \rho_{gr}) \\ B_F &= \tilde{B}_F - E_F \cdot \ln(N_A \cdot \rho_{gr}) \\ N_A &= 6.022 \cdot 10^{20} \frac{1}{mmol} \end{aligned}$$

Cäsium in	$D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q \left[\frac{J}{mol} \right]$	$D'_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q' \left[\frac{J}{mol} \right]$
UO ₂	$5.6 \cdot 10^{-8}$	$209 \cdot 10^3$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	$362 \cdot 10^3$
(Th, U)O ₂	$3.7 \cdot 10^{-9}$	$199 \cdot 10^3$	—	—
SiC ^a	$1.8 \cdot 10^{-11}$	$176 \cdot 10^3$	—	—
SiC ^b	$6.7 \cdot 10^{-14}$	$106 \cdot 10^3$	$2.4 \cdot 10^{-2}$	$482 \cdot 10^3$
LTI	$6.3 \cdot 10^{-8}$	$222 \cdot 10^3$	—	—
HTI	$1.8 \cdot 10^{-1}$	$493 \cdot 10^3$	—	—
A3–3 Graphit	$2.0 \cdot 10^{-4}$	$181 \cdot 10^3$	—	—
Strukturgraphit	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$149 \cdot 10^3$	—	—

Strontium in	$D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q \left[\frac{J}{mol} \right]$	$D'_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q' \left[\frac{J}{mol} \right]$
UO ₂	$2.2 \cdot 10^{-3}$	$488 \cdot 10^3$	—	—
(Th, U)O ₂ ^a	$2.3 \cdot 10^{-5}$	$409 \cdot 10^3$	—	—
(Th, U)O ₂ ^b	$6.6 \cdot 10^{-2}$	$488 \cdot 10^3$	—	—
SiC ^a	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$205 \cdot 10^3$	—	—
SiC ^b	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$205 \cdot 10^3$	$2.4 \cdot 10^{-2}$	$482 \cdot 10^3$
LTI	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$197 \cdot 10^3$	—	—
HTI	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$197 \cdot 10^3$	—	—
A3–3 Graphit	$9.1 \cdot 10^{-3}$	$301 \cdot 10^3$	—	—
Strukturgraphit	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$268 \cdot 10^3$	—	—

Silber in	$D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q \left[\frac{J}{mol} \right]$	$D'_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$Q' \left[\frac{J}{mol} \right]$
UO ₂	$6.9 \cdot 10^{-9}$	$165 \cdot 10^3$	—	—
(Th, U)O ₂	$4.5 \cdot 10^{-10}$	$165 \cdot 10^3$	—	—
SiC	$3.6 \cdot 10^{-9}$	$215 \cdot 10^3$	—	—
LTI	$5.3 \cdot 10^{-9}$	$154 \cdot 10^3$	—	—
HTI	$1.0 \cdot 10^{-8}$	$164 \cdot 10^3$	—	—
A3–3 Graphit	$1.6 \cdot 10^0$	$258 \cdot 10^3$	—	—

Fortsetzung der Tabelle auf der nächsten Seite

Fortsetzung der Tabelle von Seite 89

Jod in	D_0 $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Q $\left[\frac{J}{mol}\right]$	D'_0 $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Q' $\left[\frac{J}{mol}\right]$
UO ₂ ^a	$1.3 \cdot 10^{-12}$	$126 \cdot 10^3$	—	—
UO ₂ ^b	$8.8 \cdot 10^{-15}$	$54 \cdot 10^3$	$6.0 \cdot 10^{-1}$	$480 \cdot 10^3$
(Th, U)O ₂ ^a	$2.3 \cdot 10^{-5}$	$409 \cdot 10^3$	—	—
(Th, U)O ₂ ^b	$6.6 \cdot 10^{-2}$	$488 \cdot 10^3$	—	—
A3–3 Graphit ^c	$6.0 \cdot 10^{-6}$	0	—	—
A3–3 Graphit ^d	$2.5 \cdot 10^{-11}$	71	—	—
Strukturgraphit	$6.0 \cdot 10^{-6}$	0	—	—

Krypton in	D_0 $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Q $\left[\frac{J}{mol}\right]$	D'_0 $\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Q' $\left[\frac{J}{mol}\right]$
LTI	$2.9 \cdot 10^{-8}$	$291 \cdot 10^3$	$2.0 \cdot 10^5$	$923 \cdot 10^3$

^a Normalbetrieb, ^b Störfall, ^c Korngrenze (Poren), ^d Graphitkorn

Tabelle B.5: Frequenzfaktoren und Aktivierungsenergien für einige radiologisch relevante Spaltprodukte [21]

Anhang C

Verzeichnis der verwendeten Symbole

Kleinbuchstaben

h	$\frac{m}{s}$	Stoffübergangskoeffizient
r	m	Radius
t	s	Zeit
u	$\frac{m}{s}$	Geschwindigkeit
v	$\frac{m}{s}$	Geschwindigkeit
x	m	Ortskoordinate
z	m	Ortskoordinate in axialer Richtung
α		Haftkoeffizient
α		Sorptionskoeffizient
β		Adsorptionskoeffizient
ε		Leervolumenanteil
λ	$\frac{1}{s}$	Zerfallskonstante

σ		Bedeckungsgrad
ϑ	$\frac{1}{s}$	Desorptionskonstante

Großbuchstaben

A	m^2	Oberfläche
C	$\frac{1}{m^3}$	Konzentration
D_{eff}	$\frac{m^2}{s}$	effektiver Diffusionskoeffizient
D_0	$\frac{m^2}{s}$	Frequenzfaktor
M	$\frac{kg}{mol}$	Molmasse
Q	$\frac{J}{mol}$	Aktivierungsenergie
$\dot{Q}'''$	$\frac{1}{m^3s}$	volumenbezogener Quellterm
R	$\frac{J}{molK}$	allgemeine Gaskonstante
T	K	Temperatur
V	m^3	Volumen
$\dot{V}$	$\frac{m^3}{s}$	Volumenstrom
Y		Yield

Indices

<i>eff</i>	effektiv
------------	----------

<i>l</i>	links
<i>o</i>	oben
<i>r</i>	rechts
<i>u</i>	unten
$\perp$	senkrecht

Abkürzungen

AGR	Advanced Gas-cooled Reactor
AVR	Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor
BE	Brennelement
CP	Coated Particle
HEU	High Enriched Uranium
HGM	Horizontale Graphitmasche
HMM	Horizontale Metallmasche
HTR	Hochtemperaturreaktor
LEU	Low Enriched Uranium
LWR	Leichtwasserreaktor
MEDUL	Mehrfachdurchlauf
MIT	Massachusetts Institute of Technology
NW	Netzwerk
OTTO	Once Through Then Out
PyC	Pyrokohlenstoff
SiC	Siliziumkarbid
VGM	Vertikale Graphitmasche

VMM	Vertikale Metallmasche
VSR	Vertikale Stromröhre

Bibliographie

- [1] H.-J. Allelein. *Spaltproduktverhalten - speziell Cs^{137} - in HTR-TRISO-Brennstoffteilchen*. Dissertation, KFA Jülich, Jül-1695, ISSN 0366-0885, Dezember 1980
- [2] Th.-A. Batalas. *Theoretische Untersuchung zur Diffusion von binären Gasgemischen im Hinblick auf den HTR*. Diplomarbeit, KFA Jülich
- [3] R. Berger-Rossa. *Rückhaltung und Umverteilung von Spaltprodukten im Core und im Primärkreislauf von Hochtemperaturreaktoren bei hypothetischen Störfallereignissen*. Dissertation, KFA Jülich, Jül-2188, ISSN 0366-0885, März 1988
- [4] H. Brauer. *Stoffaustausch einschließlich chemischer Reaktionen*. Verlag Sauerländer, Aarau und Frankfurt a.M., 1971
- [5] V. Dannert, W. Scherer. *Ein Modellvorschlag für den Spaltprodukttransport in Graphit*. KFA Jülich, Interner Bericht, KFA-IRE-IB-13/88, September 1988
- [6] V. Dannert. *Mehrphasendiffusion von Spaltprodukten im Graphit*. KFA Jülich, Jül-2277, ISSN 0366-0885, Mai 1989
- [7] K.-D. Ehrhardt. *PLATO. Ein Programm zur Berechnung der Spaltproduktablagierung*, KFA Jülich, Jül-Spez-135, ISSN 0343-7639, Dezember 1981
- [8] H. Gaus, W. Henkel, E. Hoinkis, D. Stritzke. *Untersuchungen zum Cs-Transport in Graphit*. HMI-B 315, Berlin, 1979
- [9] H. Gerwin. *Das zweidimensionale Reaktordynamikprogramm TINTE. Teil 1: Grundlagen und Lösungsverfahren*, KFA Jülich, Jül-2167, ISSN 0366-0885, November 1987
- [10] H. Gerwin. *Das zweidimensionale Reaktordynamikprogramm TINTE. Teil 2: Anwendungsbeispiele*, KFA Jülich, Jül-2266, ISSN 0366-0885, Februar 1989
- [11] *HHT-Projekt. Ergebnisse der Entwicklung und Planung des Hochtemperaturreaktors mit Heliumturbine von 1969 bis 1982*, HHT 43, BBC AG Brown Boveri,

- Brown, Boweri & Cie AG, Bonnard & Gardel S.A., Eidg. Institut für Reaktorforschung, Gebrüder Sulzer AG, Hochtemperatur Reaktorbau GmbH, Kernforschungsanlage Jülich GmbH, NUKEM GmbH und HOBEG GmbH, Schweizerische Aluminium AG, März 1983
- [12] *Hochtemperaturreaktor-Modul-Kraftwerksanlage*. Kurzbeschreibung, Siemens Interatom, November 1988
- [13] R. Imhof. *Untersuchungen zum Strömungssimulationsprogramm „KISMET“*. Studienarbeit, RWTH Aachen, Januar 1990
- [14] K. F. Knoche. *Technische Thermodynamik*. Vieweg, Braunschweig, 1978
- [15] L. Kranz. *Spaltproduktfreisetzung im HTR: Theorie, programmtechnische Umsetzung und Überprüfung an Experimenten*. Dissertation, in Vorbereitung
- [16] K. Kugeler, R. Schulten. *Hochtemperaturreaktortechnik*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1989
- [17] K. Kugeler, P.-W. Phlippen. *Energietechnik*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1990
- [18] J. Kwasny, K. Hilpert, H. Nickel. *Cäsium-Sorptionsuntersuchungen an graphitischen Reaktorwerkstoffen*. Forschungszentrum Jülich, Jül-2353, ISSN 0366-0885, April 1990
- [19] H. Ley. *Spaltprodukttransport in Kugelbrennelementen für Hochtemperaturreaktoren im Rechenmodell „SPTRAN“*. Studienarbeit, RWTH Aachen, April 1989
- [20] H. Ley. *Simulation des Spaltprodukttransportes in Kugelbrennelementen durch Modifikation des SPTRAN-Rechenprogrammes und Verifikation durch Vergleich mit den Ausheizexperimenten nach Schenck*. Diplomarbeit, RWTH Aachen, August 1989
- [21] R. Moormann, K. Verfondern. *Methodik umfassender probabilistischer Sicherheitsanalysen für zukünftige HTR-Anlagenkonzepte*. Ein Statusbericht. Band 3: Spaltproduktfreisetzung, KFA Jülich, Jül-Spez-388/Bd.3, ISSN 0343-7639, Mai 1987
- [22] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980
- [23] H. Ragoß, W. Heit, H. Nabielek, W. Schenk. *Die unteren Grenzen der Spaltproduktfreisetzung beim HTR-Modul*. Jahrestagung Kerntechnik '90, Tagungsbericht, ISSN 0720-9207

- [24] W. Schenk, D. Pitzer, H. Nabielek. *Spaltproduktfreisetzungsvorlauf von Kugelbrennelementen bei Störfalltemperaturen*. KFA Jülich, Jül-2091, ISSN 0366-0885, Oktober 1986
- [25] W. Schenk, H. Nabielek. *Kugelbrennelemente mit TRISO-Partikeln bei Störfalltemperaturen*. (Zahlenwerk zum Bericht Jül-2091 und neue Ergebnisse von 1986 bis Oktober 1988), KFA Jülich, Jül-Spez-487, ISSN 0343-7639, Januar 1989
- [26] R. Schulten, K. Kugeler, P.-W. Phlippen. *Zur technischen Gestaltung von passiv sicheren Hochtemperaturreaktoren*. Forschungszentrum Jülich, Jül-2352, ISSN 0366-0885, April 1990
- [27] J.E. Staudt. *Design Study of an MGR Direct Brayton-Cycle Power plant*. Ph.D. thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1987
- [28] E. Teuchert, H. Gerwin, K. A. Haas, H.J. Rütten. *V.S.O.P. Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation*. KFA Jülich, Jül-1649, ISSN 0366-0885, März 1980
- [29] P. Zoller. *Das Transportverhalten der Spaltprodukte Cäsium und Strontium in beschichteten Brennstoffteilchen für Hochtemperaturreaktoren unter Strahlungsbedingungen*. KFA Jülich, Jül-1324, ISSN 0366-0885, Juli 1976

Jül-2515

August 1991

ISSN 0366-0885