

**Langzeitverhalten trocken
zwischenlagerter
Brennelemente während
der verlängerten
Zwischenlagerung**

Langzeitverhalten trocken zwischenlagerter Brennelemente während der verlängerten Zwischenlagerung

Abschlussbericht

Daniel Nahm
Jonathan Sappl
Matthias Küntzel
Christoph Bläsius
Florian Falk
Volker Hannstein
Felix Boldt
Tobias Stegmüller
Marc Péridis
Robert Kilger

September 2023

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1588 durchgeführt.

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

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

Deskriptoren

Brennstab, Hydrid-Reorientierung, Langzeitverhalten, Temperaturfeld, Zwischenlagerung

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht beschreibt aktuelle Forschungsarbeiten der GRS zur längerfristigen Zwischenlagerung sowie Weiterentwicklungen des Brennstab-Codes TESPA-ROD zur Analyse des Brennstabverhaltens unter Zwischenlagerbedingungen. Hierbei wurden die Erweiterung und Anpassung der Modellierungsmöglichkeiten der in RS1552 entwickelten Rechenverfahren, detaillierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen der Ergebnisse der GRS-Zwischenlagerrechenkette sowie die Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI) als Ziele verfolgt.

Die noch andauernde Suche nach einem geeigneten Endlager machen eine Verlängerung der trockenen Zwischenlagerung von hochradioaktiven Abfällen zunehmend wahrscheinlich /BEC 22/. Die ab Einlagerungsbeginn über 40 Jahre erteilten Aufbewahrungsgenehmigungen beginnen im Zeitraum 2034 bis 2047 auszulaufen. Als Folge daraus muss die Einhaltung der Schutzziele der Transport- und Lagerbehälter nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik erneut nachgewiesen werden. Mit Einhaltung des derzeitigen Zeitplans der Endlagerbereitstellung müssten neue Aufbewahrungsgenehmigungen für ungefähr 40 Jahre gelten /CHR 23/. Mit einer Verzögerung der Entscheidung über Endlagerstandort kann sich diese Zeit jedoch auf bis 80 Jahre verlängern /ENT 23/.

Dies erfordert eine Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Grundlagen zur Bewertung des Langzeitverhaltens sowie die Bereitstellung entsprechend angepassten Analyse- und Bewertungsmethoden, da für Hüllrohre bestrahlter Brennelemente eine erhöhte Sprödbruchempfindlichkeit bei mechanischen Belastungen bis zu nachfolgendem Hüllrohrversagen bei Handhabungsvorgängen bzw. Transporten nicht ausgeschlossen werden kann. Die Ergebnisse dieses Eigenforschungsvorhabens sind leisten einen wesentlichen Beitrag zu diesen Punkten.

So wurden unter anderem die GRS-Modellierungsmöglichkeiten der Temperaturfelder in Transport- und Lagerbehältern weiter ausgebaut. Im Detail wurden der Einfluss der Plenumsmodellierung und der Brennelementdetailierung genauer untersucht. Zusätzlich wurde ein generisches SWR-Behältermodell ähnlich dem CASTOR®-V52 entwickelt.

Hinsichtlich des Wasserstoffverhaltens in Brennstabhüllrohren wurde die im Vorgängervorhaben aufgestellte Datenbank der "terminalen Feststofflöslichkeit" (eng: terminal solid solubility (TSS)) ausgewertet und der Einfluss der Fitunsicherheiten auf die

Vorhersage des Hydridverhaltens mit TESP-ROD näher untersucht. Um detailliertere Simulationen des Wasserstoffverhaltens zu ermöglichen, wurde das TESP-ROD Hüllrohrmodell um radiale Zonen erweitert. Dies erlaubt die Auflösung der Hydridausscheidung innerhalb einer axialen Hüllrohrzone.

Zur verlässlicheren Vorhersage des Einflusses von Zirkoniumhydriden auf die Bruchspannung von einem Hüllrohr, wurde ein FEM-Modell zur Simulation von Ringkompressionstests erstellt. Anschließend wurden mit dem Modell Ringkompressionen unter verschiedenen Hydridorientierungen simuliert und mit experimentellen Daten verglichen.

Auf Basis von detaillierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen wurde die Verlässlichkeit der GRS-Rechenkette zur Zwischenlagerung bewertet. Für die COBRA-SFS Behältermodelle konnten so zahlreiche einflussreiche Modellierungsparameter identifiziert werden.

Um die GRS-Zwischenlagerrechenkette zugänglicher zu machen, wurde eine graphische Benutzeroberfläche geschaffen. Der aktuelle Funktionsumfang ermöglicht unter anderem die Manipulation von COBRA-SFS Eingabedaten. So können beispielsweise die Umgebungstemperatur, die Nachzerfallswärmeleitung oder das axiale Leistungsprofil einfach und ohne potenzielle Fehler auch von Personen ohne Expertenwissen abgeändert werden.

Abstract

This report describes current research activities of GRS about nuclear fuel storage as well as advancements of the fuel rod code TESPА-ROD for the analysis of fuel rod behaviour under storage conditions. Here, the extension and adaptation of the modelling capabilities developed in RS1552, detailed uncertainty and sensitivity analyses of the results of the GRS interim storage calculation chain as well as the development of a graphical user interface were pursued as objectives.

The ongoing search for a suitable final repository makes an extension of the storage of high-level radioactive waste likely /BEC 22/. The 40-year storage licenses currently issued will begin to expire in the period from 2034 to 2047. Consequently, safety of the transport and storage containers must be demonstrated again based on the most recent state of science and technology. If the current schedule of repository provision is met, new storage licenses would have to be valid for about 40 years /CHR 23/. With a delay of the decision on the repository site, however, this time can extend up to 80 years /ENT 23/.

This requires a further development of the scientific basis for the evaluation of the long-term behaviour as well as the adaptation of corresponding analysis and evaluation methods. Since cladding tubes of irradiated fuel assemblies experience increased brittle fracture sensitivity under mechanical loads, failure during handling processes or transports cannot be excluded. The results of this research project provide an essential contribution to the above-mentioned subject.

Among other things, the GRS modelling possibilities of the temperature field in transport and storage containers were expanded. In detail, the influence of the plenum modelling and the fuel element detailing were analysed more closely. In addition, a generic BWR cask model similar to the CASTOR®-V52 was developed.

Regarding the hydrogen behaviour in fuel rod cladding tubes, the database of "terminal solid solubility" (TSS) established in the previous project was evaluated and the influence of the derived fit uncertainties on the prediction of the hydride behaviour was investigated in more detail using TESPА-ROD. To allow more detailed simulations of the hydrogen behaviour, a radial dimension was added to the TESPА-ROD cladding model. This allows the resolution of hydride precipitation within an axial cladding tube zone.

For a more reliable prediction of the influence of zirconium hydrides on the fracture stress of a cladding tube, an FEM model for the simulation of ring compression tests was developed. The model was then used to simulate ring compressions under different hydride orientations and the results were compared with experimental data.

Based on detailed uncertainty and sensitivity analyses, the reliability of the GRS storage calculation chain was evaluated. Thus, numerous influential modelling parameters could be identified for the COBRA-SFS container models.

With the aim to make the GRS interim storage computational chain more accessible, a graphical user interface was created. The current range of functions allows, among other things, the manipulation of COBRA-SFS input data. For example, the ambient temperature, the decay heat or the axial power profile can be changed easily and without potential errors even by persons without expert knowledge.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
	Inhaltsverzeichnis	V
1	Einleitung	1
2	Zielstellung, Einzelziele und Arbeitsprogramm	3
3	Stand von Wissenschaft und Technik	5
3.1	Codes	6
3.1.1	MOTIVE.....	6
3.1.2	COBRA-SFS.....	6
3.1.3	TESPA-ROD.....	7
3.2	Methoden und Modelle	7
3.2.1	Hüllrohrmechanik.....	7
3.2.2	Temperaturfeldberechnungen in Transport- und Lagerbehältern	11
4	Arbeitspaket 1: Methoden- und Modellentwicklung	15
4.1	Einfluss der Plenumsmodellierung in COBRA-SFS auf die Behältertemperatur	15
4.2	Entwicklung eines generischen SWR-Behältermodells	19
4.3	Einfluss der Brennelementmodellierung in COBRA-SFS auf das Temperaturfeld	25
4.3.1	SWR-Brennelementmodellierung.....	25
4.3.2	DWR-Brennelementmodellierung	28
4.4	Konservative Modellierung des SWR-Behälters.....	30
4.5	Trocknungstransienten	37
4.6	Untersuchungen zur Wasserstofflöslichkeit in Zirkonium	42
4.7	Radiale Diffusion von Wasserstoff im Hüllrohr	47
4.7.1	Implementierung in den TESPA-ROD Code	47

4.7.2	Radiale Diffusion in TESPА-ROD anhand von Beispielen.....	48
4.8	Kampmann-Wagner-Modell	68
4.9	Bildanalyse	73
4.10	Untersuchungen zum Einfluss von Hydriden auf die mechanischen Eigenschaften des Hüllrohrs in Ringdrucktests	79
4.10.1	Anknüpfung an die Modellierung im Vorhaben RS1175.....	79
4.10.2	Rechnungen zum Hydrideinfluss	83
5	Arbeitspaket 2 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen	93
5.1	COBRA-SFS.....	93
5.1.1	Unsicherheitsanalyse der GRS-Behältermodelle	96
5.1.2	Sensitivitätsanalyse der generischen GRS-Behältermodelle.....	98
5.2	TESPA-ROD.....	104
6	Nationale und internationale Zusammenarbeit.....	113
7	Benchmarkaktivitäten.....	115
7.1	GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten in der verlängerten Zwischenlagerung.....	115
7.2	EPRI Thermal Modelling Benchmark	119
8	Arbeitspaket 3 Schnittstellen und Benutzeroberfläche	125
8.1	BUTTERBREZN	125
8.2	cobrasfsio	129
8.3	br3zl.....	132
8.4	Entwicklungsstand	134
9	Zusammenfassung	137
	Abbildungsverzeichnis.....	141
	Tabellenverzeichnis.....	148
	Literaturverzeichnis.....	149

1 Einleitung

Die noch andauernde Suche nach einem geeigneten Endlager machen eine Verlängerung der trockenen Zwischenlagerung von hochradioaktiven Abfällen zunehmend wahrscheinlich /BEC 22/. Die ab Einlagerungsbeginn über 40 Jahre erteilten Aufbewahrungsgenehmigungen beginnen im Zeitraum 2034 bis 2047 auszulaufen. Als Folge daraus muss die Einhaltung der Schutzziele der Transport- und Lagerbehälter nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik erneut nachgewiesen werden. Mit Einhaltung des derzeitigen Zeitplans der Endlagerbereitstellung müssten neue Aufbewahrungsgenehmigungen für ungefähr 40 Jahre gelten /CHR 23/. Mit einer Verzögerung der Entscheidung über Endlagerstandort kann sich diese Zeit jedoch auf bis 80 Jahre verlängern. Eine Behälteröffnung wird derzeit in Deutschland (bis zur Inbetriebnahme einer Endlagerkonditionierungsanlage) als unmöglich angenommen, weshalb die computergestützte Simulation des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung für die Behälterneuzulassungen essentiell ist /ENT 23/.

Ein potenzieller Degradationsmechanismus, während der Trockenlagerung ist die Versprödung der Hüllrohre durch Umorientierung und Wachstum von Zirkoniumhydriden. Im Laufe der längerfristigen Zwischenlagerung kann dies zum Verspröden bis hin zum Versagen der Brennstabhüllrohre führen, wodurch eine wesentliche radiologische Schutzbarriere verlorenght. Für eine Erneuerung der Aufbewahrungsgenehmigung ergeben sich daher Fragen hinsichtlich der Kritikalitätssicherheit sowie der Verhinderung der Freisetzung von radioaktivem Material sowohl während der Zwischenlagerung als auch mit Blick auf eine potenzielle Konditionierung der Abfälle in Vorbereitung auf die Endlagerung.

In dem Vorgängervorhaben RS1552 BREZL wurden wichtige Grundlagen zur Beschreibung des Hüllrohrverhaltens in der trockenen Zwischenlagerung über einen Zeitraum von mehreren Jahrzehnten geschaffen. Dies beinhaltete das Aufstellen einer Rechenkette zur Simulation des Brennstabverhaltens bestehend aus dem GRS Abbrandcode-Paket MOTIVE, dem externen Thermohydraulik-Code COBRA-SFS und dem GRS Brennstabcode TESP-ROD. In diesem Zuge wurde unter anderem ein generisches DWR-Behältermodell ähnlich einem CASTOR®-V/19 erstellt, wodurch detaillierte Temperaturdaten zur generischen Zwischenlagerszenarien zugänglich wurden. Zusätzlich wurde TESP-ROD um wichtige Modelle zur realistischeren Beschreibung des Brennstabverhaltens erweitert. Dies umfasste unter anderem ein Modell zur Beschreibung der axialen Wasserstoffdiffusion.

2 Zielstellung, Einzelziele und Arbeitsprogramm

Das hier beschriebene Vorhaben RS1588 BREZL-II baut dabei direkt auf den Arbeiten des früheren Eigenforschungsvorhabens RS1552 BREZL-I auf und baut die dort geschaffenen Kapazitäten weiter aus.

Dabei wurden folgende Ziele verfolgt:

1. Erweiterung und Anpassung der Modellierungsmöglichkeiten in den in RS1552 entwickelten Rechenverfahren.
 - Erweiterung des im RS1552 entwickelten Behältermodells auf weitere Brennelementtypen und Überarbeitung der Modellierung der oberen und unteren Plena.
 - Erweiterung des GRS-Behälterrepertoires um ein generisches SWR-Behältermodell.
 - Modellierung des Hüllrohrtemperaturfeldes während des Trocknungsprozesses.
 - Erweiterung der bestehenden TESPА-ROD Modelle zur Beschreibung des Hüllrohrverhaltens insbesondere auch durch Weiterentwicklung von Modellen zur Vorhersage des Wasserstoffverhaltens in Brennstabhüllrohren während der längerfristigen Zwischenlagerung.

1. Detaillierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen der Zwischen- und Endergebnisse der erstellten Rechenkette.
 - Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen des COBRA-SFS Behältermodells zur Bestimmung der Hüllrohrtemperaturen bezüglich Modellierungs- und Eingangsparameter.
 - Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen der TESPА-ROD Modellierungs- und Eingangsparameter.
 - Durchführung und Auswertung Monte-Carlo basierter Parameterstudien.
 - Auswertung des in RS1552 gestellten internationalen Rechenbenchmarks sowie Initiierung von weiterführenden Benchmark-Aktivitäten.

2. Entwicklung einer einheitlichen Ein- und Ausgabe sowie einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI) zur Verringerung der Fehleranfälligkeit beim Erstellen von Eingabedatensätzen, und zur Verbesserung der Anwenderfreundlichkeit, Erweiterung des Anwenderkreises der erstellten Rechenverfahren und Modelle durch Entwicklung einer Benutzeroberfläche.
 - Vereinheitlichung der Eingabedateien in einer grafischen Benutzeroberfläche.
 - Vereinheitlichte Auswertung und Visualisierung der COBRA-SFS und TESPA-ROD Ergebnisse.

3 Stand von Wissenschaft und Technik

Die in diesem Vorhaben verfolgten Ziele bauen auf den Ergebnissen der Vorgängervorhaben der GRS zur Zwischenlagerung RS1552 *Langzeitverhalten zwischengelagerter Brennelemente bei deutlich längerer Zwischenlagerung* auf. Zudem gibt es Verbindungen zu den Vorhaben RS1586A *Spannungsinduzierte Wasserstoffumlagerung in Brennstabhüllrohren während längerfristiger Zwischenlagerung - Experimente zur Bestimmung der Eigenspannungen sowie der Wasserstofflöslichkeit und -diffusion* und RS1557 *Brennstabverhalten im Betrieb und bei Störfällen (BSVBUS)*. Im Vorgängervorhaben RS1552 wurde eine Rechenkette zur Simulation des Brennstabverhaltens vom Betrieb bis zum Ende der Trockenlagerung aufgestellt (Abb. 3.1). Basierend auf brennelementspezifischen Daten, wie der Leistungshistorie, wird mittels des Abbrandcodes MOTIVE die Nachzerfallswärmeleistung der Brennelemente berechnet. COBRA-SFS ermöglicht es anschließend basierend auf diesen Werten in Kombination mit einem zuvor entwickeltem Behältermodell detaillierte Temperaturdaten in einem Zwischenlagerszenario zu berechnen. Die Temperatur geht dann als Parameter in die Simulation des Brennstabverhaltens mittels TESP-ROD ein. Der Hüllrohrzustand kann abschließend basierend auf Parametern wie dem Innendruck, der Dehnung oder dem Wasserstoffverhalten sicherheitstechnisch bewertet werden.

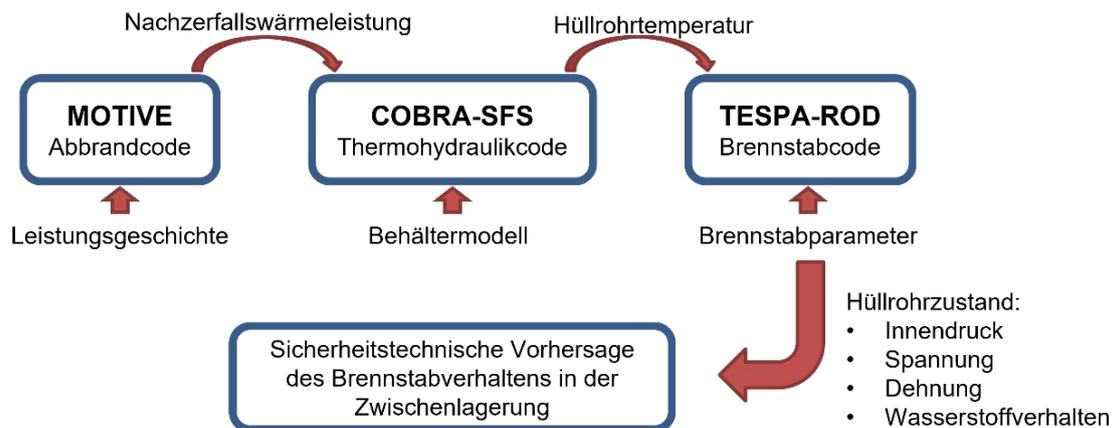


Abb. 3.1 GRS-Rechenkette zur Vorhersage des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung

3.1 Codes

Nachfolgend werden die in diesem Vorhaben verwendeten Simulationsprogramme MOTIVE, COBRA-SFS und TESPRA-ROD beschrieben.

3.1.1 MOTIVE

MOTIVE ist ein von der GRS entwickeltes und gepflegtes Programm zur rechnerischen Bestimmung des Nuklidinventars und daraus abgeleiteter Größen, wie z. B. die Nachzerfallsleistung, Aktivität oder Strahlungsspektren /HAN 17/. MOTIVE koppelt auf modularer Weise externe Programme zur dreidimensionalen Neutronenfluss- und zur Nuklidinventarberechnung. Das Neutronenflussberechnungsprogramm ist dabei derzeit ein Monte-Carlo-Verfahren mit kontinuierlicher Energiedarstellung. Für die Flussberechnung sind aktuell die externen Programme KENO-VI aus dem SCALE-Paket /REA 17/ und OpenMC /ROM 15/ in das Paket modular integriert. Zur Nuklidinventarberechnung ist das Programm VENTINA angekoppelt, das von der GRS und dem Paul-Scherrer-Institut (PSI), Schweiz, gemeinsam entwickelt und gepflegt wird /AUR 15/. VENTINA ist ein flexibles Softwaremodul für die Lösung der nuklearen Abbrandgleichungen (*Bateman-Equations*).

3.1.2 COBRA-SFS

COBRA-SFS ist ein Finite-Differenzen Sub-Channel-Code aus der COBRA Familie, welcher auf die thermohydraulische Analyse von Transport- und Lagerbehältern für bestrahlte Brennelemente spezialisiert und validiert ist. Der Code wurde in den 1970er Jahren erstmals beschrieben und wird bis heute am PNNL weiterentwickelt. So wurde die aktuelle Version 6 im Jahr 2021 veröffentlicht. COBRA-SFS ist fester Bestandteil der GRS-Rechenkette zur Analyse des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung. Basierend auf den jeweils eigens entwickelten Behältermodellen für Brennelemente aus Druck- oder Siedewasserreaktoren ermöglicht es COBRA-SFS, detaillierte, bis auf den einzelnen Stab aufgelöste Temperaturdaten in sowohl Steady-State als auch in transienten Szenarien zu berechnen.

3.1.3 TESPА-ROD

TESPA-ROD ist ein von der GRS entwickeltes Simulationsprogramm zur Berechnung des thermomechanischen Verhaltens von Brennstäben. Ursprünglich wurde dieser Code zur Analyse von betrieblichen Transienten und Auslegungsstörfällen im Reaktor entwickelt. So findet TESPА-ROD unter anderem Anwendung bei den Technischen Überwachungsvereinen (TÜV NORD und TÜV SÜD) zur Analyse des Kernschadensumfangs sowie zur Beurteilung von Folgekernen. In den vorangegangenen Vorhaben wurde TESPА-ROD kontinuierlich weiterentwickelt, um auch Vorhersagen über das Brennstabverhalten während der trockenen Zwischenlagerung treffen zu können. So wurde im Vorhaben RS1552 ein Modell zur Hydridausscheidung und -orientierung entwickelt und implementiert /BOL 19a/, /STU 20/. Dieses Hydridmodell wurde in den Projekten RS1552 und RS1557 um ein Modell zur axialen Wasserstoffdiffusion erweitert.

Zur Vorhersage der Entwicklung des Innendruckes über die Zeit der Zwischenlagerung verfügt TESPА-ROD über ein Modell für die Heliumproduktion durch Alphazerfall und dessen Freisetzung aus der Brennstoffmatrix. Hierbei führt der nicht freigesetzte Anteil an Helium zu einem Anschwellen des Pellets, was bei einem möglichen Pellet-Hüllrohrkontakt zu einer zusätzlichen Erhöhung der Umfangsspannung führt.

Im Vergleich zu anderen Brennstabcodes wie BISON /WIL 12/, /KON 21/ oder FALCON, /PIO 21/, /KON 21/ bietet TESPА-ROD ein vergleichbares Leistungsspektrum bezüglich des transienten Brennstabverhaltens. Unterschiede bestehen in der Modellierung der Wasserstoffausscheidung: Diese wird in den Brennstabcodes BISON und FALCON durch temperaturabhängige kinetische Gleichungen hinsichtlich der lokalen Wasserstoffdiffusion derzeit noch realistischer dargestellt. Zusätzlich verfügen beide Codes über Modelle zur radialen Diffusion von Wasserstoff in Hüllrohren mit Liner /PAS 20/, /PIO 21/.

3.2 Methoden und Modelle

3.2.1 Hüllrohrmechanik

Entscheidenden Einfluss auf die Duktilität des Hüllrohrmaterials hat das Verhalten des während des Reaktorbetriebes eingelagerten Wasserstoffs in der Zirkoniumlegierung. Während des Reaktoreinsatzes bildet sich am äußeren Hüllrohr eine Oxidschicht und Wasserstoff diffundiert in das Hüllrohr. Die Dicke der Oxidschicht und die Konzentration des Wasserstoffs im Zirkonium hängen u. a. von der Abbrandhistorie und dem Material

ab (z. B. Zircaloy-4 oder Optimized-ZIRLO). Während der Nasslagerung der bestrahlten Brennelemente liegt der Wasserstoff in Form von Zirkoniumhydride mit einer umfangsgerichteten Ausrichtung vor. Im Verlauf des Trocknungsprozesses und insbesondere durch die dadurch auftretenden wesentlich höheren Temperaturen wird abhängig von der Dauer und Höhe der Hüllrohrtemperatur der Wasserstoff wieder gelöst. Bei der anschließenden Abkühlung richten sich die gebildeten Zirkoniumhydride wieder entlang des Druckgradienten aus. Da im Behälter der Hüllrohrinnendruck wesentlich höher ist als der Behälterdruck, richten sich die Hydride in radialer Richtung aus. Dieser Vorgang wird i. a. als Hydrid-Reorientierung oder -Umorientierung beschrieben (Abb. 3.2). Radial ausgerichtete Hydride begünstigen die Rissbildung und führen zu einer Versprödung des Materials. Was die Ausrichtung, Länge und Häufigkeit der Hydride betrifft, gibt es diverse nationale und internationale Forschungsvorhaben mit unterschiedlichen Schwerpunkten und Aussagen. Jedoch sind nur wenige Untersuchungen zum Trocknungsprozess und dessen Einfluss auf das Wasserstoffverhalten durchgeführt worden. Es gibt in der veröffentlichten Literatur keine exemplarischen oder typischen dreidimensionalen Temperaturfelder oder Zeitskalen für Trocknungsprozesse von deutschen DWR-Brennelementen, insbesondere nicht für die in Deutschland verwendeten hohen Abbrände und MOX-Brennstoffe.

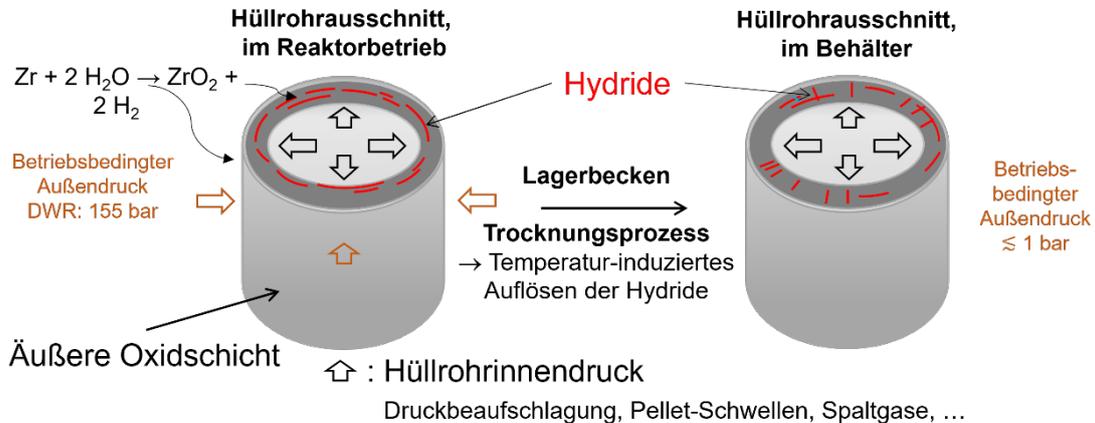


Abb. 3.2 Schematische Darstellung der Hydrid-Reorientierung

In dem Laufe der längerfristigen Zwischenlagerung kann die Hydrid-Reorientierung zum Versagen der Brennstabhüllrohre führen, wodurch eine wesentliche radiologische Schutzbarriere verloren geht. Für eine Erneuerung der Aufbewahrungsgenehmigung ergeben sich daher Fragen hinsichtlich der Kritikalitätssicherheit sowie der Verhinderung der Freisetzung von radioaktivem Material sowohl während der Zwischenlagerung als auch mit Blick auf eine potenzielle Konditionierung der Abfälle in Vorbereitung auf die Endlagerung.

Im Allgemeinen liegt der Wasserstoff in den Zirkonium-Legierungen gelöst oder ausgefällt als Hydrid vor. Das derzeit in TESP-ROD implementierte Modell zur Simulation von Hydridausscheidungen im Hüllrohr während der Zwischenlagerung basiert auf den Auswertungen einer Versuchsreihe des Argonne National Laboratory (ANL) [IVA 18]. Die implementierten Korrelationen beinhalten überwiegend feste temperatur- und materialunabhängige Faktoren, wodurch potenzielle kinetische Effekte oder der Einfluss der Diffusion auf die Ausscheidung der Hydride nicht abgebildet werden können (Abb. 3.3). Dadurch wird die Hydridausscheidung maßgeblich über die Löslichkeitsgrenzen TSSd (*Terminal Solid Solubility for dissolution*) und TSSp (*Terminal Solid Solubility for precipitation*) beeinflusst. Mit dem aktuellen Modell lässt sich die Menge an ausgeschiedenem Wasserstoff in gelöster und in ausgeschiedener Form vorhersagen. In TESP-ROD ist das Kriterium zur Hydrid-Reorientierung bisher empirisch von Temperatur- und Spannungsverläufen in Experimenten abgeleitet worden. Die Umfangsspannung im Hüllrohr, bei der ein Übergang von tangentialen (umfangsgerichteten) zu radialen Hydriden beginnt, liegt bei 90 MPa und ist bei 110 MPa abgeschlossen. Ein umfassendes mechanistisches Modell, das diese Grenze für Brennstäbe bestätigt, existiert aktuell jedoch nicht.

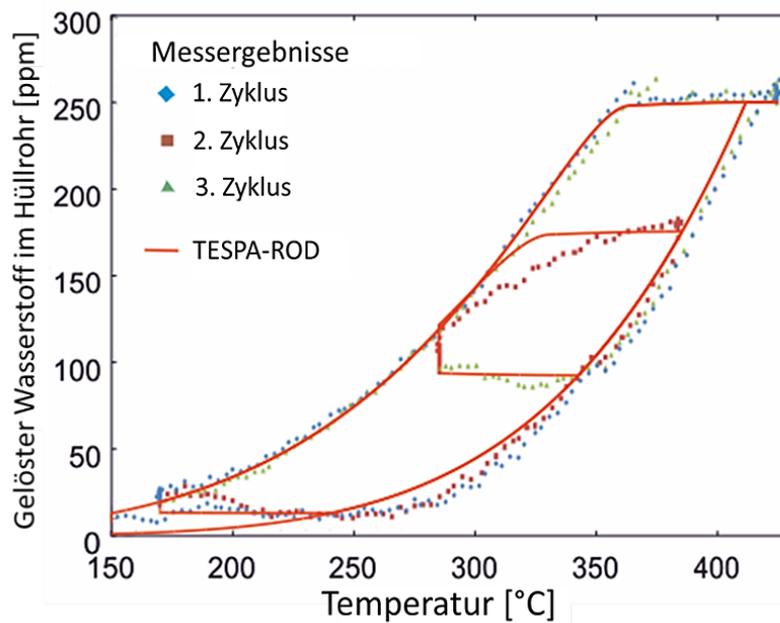


Abb. 3.3 Lösungsverhalten des Wasserstoffs im Hüllrohr in Abhängigkeit der Temperatur

Vergleich zwischen TESP-ROD Rechnungen mit experimentellen Untersuchungen des Argonne National Laboratory (ANL) Die Punkte stellen die Messergebnisse der jeweiligen Zyklen dar. Die roten Linien repräsentieren die Ergebnisse aus TESP-ROD.

Des Weiteren wurden im Vorhaben RS1557 „Brennstabverhalten im Betrieb und bei Störfällen“ ein Mehrzonenmodell für TESP-ROD entwickelt. Dieses Modell unterteilt den Brennstab in mehrere axiale Zonen und ermöglicht lokale Betrachtungen des Brennstabzustands. Ebenfalls wurde ein axiales Diffusionsmodell in TESP-ROD implementiert, das den Transport von Wasserstoff in axialer Richtung vorhersagt.

Ein weiteres, umfangreiches Hydridmodell wurde in der Literatur während der Laufzeit dieses Vorhabens veröffentlicht [PAS 20]. Das *Hydride Nucleation-Growth-Dissolution* (HNGD) Modell berücksichtigt sowohl kinetische als auch diffusionsgetriebene Effekte in der Hydridausscheidung und Auflösung. Während der Ausscheidung unterscheidet das HNGD-Modell zwischen dem schnellen Prozess der Keimbildung und dem langsameren Prozess des Hydridwachstums. Zusätzlich werden kinetische Effekte in der Auflösung von Hydriden berücksichtigt, wodurch dieser Prozess nicht instantan, sondern verzögert stattfindet. Das HNGD-Modell findet bereits Anwendung in den Brennstabcodes BISON und FALCON.

Wie durch umfangreiche Literaturrecherche im Vorgängervorhaben RS1588 gezeigt wurde, sind die TSSd und TSSp Kurven mit großen Unsicherheiten behaftet, wodurch genaue Simulationen erschwert werden. Weiterhin wird zwischen TSSd und TSSp im Allgemeinen eine Hysterese angenommen. In der Literatur werden zwei mögliche Gründe für diese Hysterese diskutiert. Eine mögliche Erklärung ist ein Unterschied zwischen der Auflösungs- und der Ausscheidungsenergie der Hydride [KON 21], [PUL 12]. Andererseits könnte es sich bei der Hysterese auch lediglich um ein kinetisches Artefakt handeln, welches durch zu hohe Abkühlraten im Experiment hervorgerufen wird [KAU 18]. Weitere Experimente besonders bei niedrigen Abkühlraten ($1^{\circ}\text{C}/\text{h}$ und weniger) sind nötig, um diese Fragen endgültig zu beantworten. Die Auswirkung von niedrigen Abkühlraten auf das Hydridverhalten wird aktuell in einem Verbundprojekt von GRS und KIT im Rahmen des Vorhabens RS1586A *SPIZWURZ* untersucht. Erste Ergebnisse werden hier Anfang 2024 erwartet.

Ein weiterer wichtiger Faktor für eine zuverlässige Vorhersage des Hydridverhaltens und insbesondere der Hydridorientierung ist eine verlässliche Simulation der Umfangsspannung des Hüllrohrs. Vor kurzem veröffentlichte Berichte des *Electric Power Research Institute* (EPRI) legen die Vermutung nahe, dass die Haftung zwischen Pellet und Hüllrohr die Umfangsspannung während der Zwischenlagerung stark beeinflussen kann [EPRI 21]. Diese Einschätzung wird auch von anderen Autoren unterstützt [KON 21]. Besonders bei Abbränden über $45\text{ GWd}/\text{tSM}$ entstehen an der Grenzfläche zwischen

Hüllrohr und Brennstoffpellet durch Oxidationsprozesse Mischschichten aus $(U, Zr)O_2$. Diese Schichten erzeugen eine stabile Verbindung beider Komponenten, wodurch ein Auftrennen nur durch signifikante Kraftereinwirkung möglich ist. Bisher gehen die meisten Brennstabcodes, auch TESP-ROD, bei der Berechnung der Umfangsspannung vom Modell einer Druck beaufschlagten leeren Röhre aus. Dies führt zu einer direkten und zumeist alleinigen Abhängigkeit der Hüllrohrspannung vom Gasinnendruck. Finite-Element-Methoden (FEM)-Simulationen der Brennstabcodes BISON und Falcon prognostizieren, dass die Bindung des Hüllrohrs an das näherungsweise unverformbare Pellet eine signifikante Reduzierung der Umfangsspannung zu Folge haben kann [WIL 18]. Dieser Effekt war besonders deutlich für hohe Hüllrohrtemperaturen von über 350 °C, wie sie bei der Trocknung von Brennelementen im Behälter auftreten können. Hier wurde eine Reduzierung der Umfangsspannung um einen Faktor zwei und mehr simuliert. Besonders Hüllrohre welche solchen hohen Temperaturen ausgesetzt waren, werden derzeit als besonders kritisch für die eine Hydridreorientierung in eine radiale Ausrichtung angesehen [KAU 18]. Erste Versuche in der SCIP-IV Subtask 1.1 deuten jedoch daraufhin, dass die Bindung zwischen Pellet und Hüllrohr bei hohen Stabinnendrücken und Temperaturen nicht stabil ist, und daher nur geringen Einfluss hat [ROB 23]. Dieser Widerspruch zeigt, dass weitere Forschung nötig ist, um den Spannungszustand eines Hüllrohres in der Zwischenlagerung unter Einfluss der Pellet-Hüllrohr-Bindung beschreiben zu können. Dies hat auch direkte Auswirkung auf die Aussagekraft der derzeit angewendeten theoretischen Modelle zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Pellet und Hüllrohr.

3.2.2 Temperaturfeldberechnungen in Transport- und Lagerbehältern

Die Hüllrohrtemperatur ist ein maßgeblicher Faktor, welcher in der trockenen Zwischenlagerung nahezu alle potenziellen Degradationsmechanismen eines Brennstabes beeinflusst. Eine möglichst genaue Kenntnis über das Temperaturfeld in einem Transport- und Lagerbehälter ist daher essenziell für belastbare Vorhersagen des Brennstabverhaltens.

Aufgrund der hohen Radioaktivität der eingelagerten, bestrahlten Brennelemente ist eine Behälteröffnung zur direkten Temperaturmessung aufwendig. In Deutschland wurde eine solche Anstrengung bisher nicht unternommen. Verfügbare Temperaturdaten zu den in Deutschland hauptsächlich verwendeten Behältern der Typen CASTOR® V/19 und CASTOR® V/52 beschränken sich auf Messungen der Oberflächentemperatur. Um in den temperaturabhängigen Simulationen des mechanischen Brennstabverhaltens

unnötige Konservativitäten zu vermeiden sind theoretische Temperaturfeldsimulationen unerlässlich.

Deshalb wurde im Vorgängervorhaben RS1552 ein generisches Behältermodell für DWR-Brennelementen (ähnlich dem CASTOR® V/19) entwickelt /PÉR 19a/. Im direkten Vergleich mit Behältermodellen anderer Thermohydraulik-Codes zeigte das Modell gute Übereinstimmung /PÉR 19b/ (Abb. 3.4). Des Weiteren wurde basierend auf dem Visualisierungsprogramm ParaView /AHR 05/ eine Möglichkeit geschaffen, um die Ergebnisse der COBRA-SFS Berechnungen dreidimensional und zeitlich aufgelöst darzustellen.

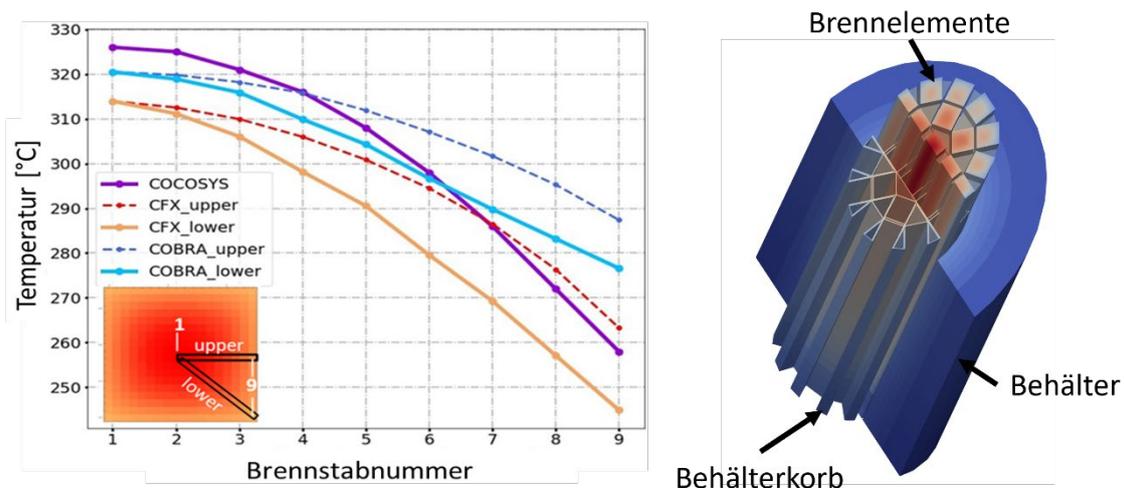


Abb. 3.4 Links: Vergleich der berechneten Hüllrohrtemperaturen. Rechts: Visualisierung der COBRA-SFS Ergebnisse mit ParaView

Links: Vergleich der berechneten Hüllrohrtemperaturen zwischen den Berechnungsprogrammen COCOSYS, Ansys CFX und COBRA-SFS. Rechts: Visualisierung der COBRA-SFS Ergebnisse mit ParaView. Betrachtet wurde jeweils ein generisches CASTOR-V19 Modell mit 39 kW Gesamtbehälterleistung. Die Validierung generischer Behältermodelle gestaltet sich, aufgrund mangelnder freiverfügbarer Temperaturdaten aus realen Beladungsszenarien, im Allgemeinen schwierig.

Eine wichtige Ausnahme stellt hier das vom *Electric Power Research Institute* (EPRI) durchgeführte Projekt *High Burn-up Demonstration Project* (HBU DEMO). Für dieses Projekt wurde in den USA ein TN 23B Behälter mit bestrahlten Brennelementen beladen und so modifiziert, dass eine direkte Temperaturmessung an mehreren Stellen im Behälterinnen ermöglicht wurde. Parallel wurde ein Blind-Benchmark zur Vorhersage der Messwerte gestellt. Bei der Auswertung der ersten Ergebnisse konnte eine signifikante Differenz zwischen den errechneten und gemessenen Werten festgestellt werden /CSO 18/ (Abb. 3.5).

	1	2	3	4	
5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16
17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28
29	30	31	32		

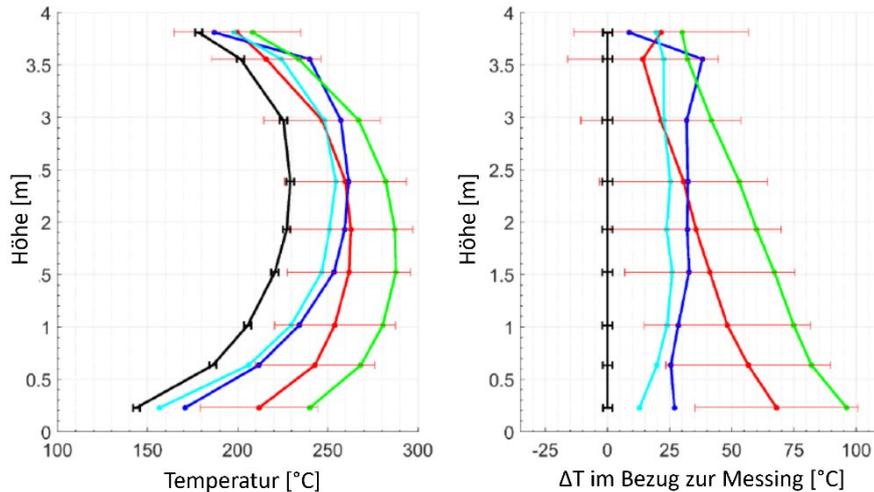
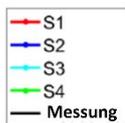


Abb. 3.5 Auswertung des Blind-Benchmarks zur Nachrechnung experimentell bestimmter Temperaturen eines beladenen TN-32 Behälters

Vergleich der gemessenen Werte (schwarze Kurve) mit vier eingereichten Lösungen. Die Differenz ΔT in Bezug zur Messung (linke Grafik) betrug bis nahezu 100 °C.

Die Unterschiede in den Rechenergebnissen in Abhängigkeit von den verschiedenen Modellannahmen sind hier deutlich erkennbar. Es treten Variationen bis über 30 °C auf, was an der entsprechenden axialen Stelle ganz unten im Behälter etwa 30 % des Temperaturwerts des adiabatischen Profils entspricht. Die Diskussionen zeigten, dass mehrere Ursachen zur Erklärung dieser Differenz beitragen. Zum einen waren das hohe Konservativitäten bei der Berechnung der Nachzerfallswärmeleistung, was zu einer generellen Erhöhung der errechneten Temperaturen führte. Zum anderen wurde festgestellt, dass der Korb in dem instrumentierten Behälter nicht zentral positioniert, sondern zu einer Seite leicht verschoben war. Dies führte zu unterschiedlichen Wärmeleitwiderständen zwischen dem Korb und der Behälterinnenwand, die in der symmetrischen Modellierung nicht berücksichtigt wurde.

Eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der zu Grunde liegenden Modellierungsannahmen zur Berechnung von Hüllrohrtemperaturen wird in internationalen Gremien, wie z. B. dem EPRI-ESCP oder auch von einer Arbeitsgruppe an dem spanischen Institut CIEMAT für einzelne Behältermodelle diskutiert. Auf Grund der unterschiedlichen Behältertypen und Berechnungsprogramme können nicht alle Resultate internationaler Diskussionen für die Modellierung eines CASTOR-ähnlichen Behälters wie er in Deutschland verwendet wird, direkt übernommen werden. Eine gezielte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse, muss für jedes Berechnungsmodell durchgeführt werden.

Für eine Berechnung der Temperaturfelder im Behälter ist die Nachzerfallswärmeleistung des bestrahlten Brennstoffs die maßgebende Größe. Im Vorhaben RS1552 wurden die Normen DIN 25463-1:1990 mit deren vereinfachter Formel, DIN 25463-1:2014 (DWR-UO₂) und DIN 25463-2:2014 (DWR-MOX), sowie die US-amerikanische Norm ANSI/ANS-5.1-2005 mit *Best Estimate* Berechnungen verglichen. Konservative Abschätzungen mit dem Ziel des Nachweises, dass die maximale Hüllrohrtemperatur unterhalb einer definierten Grenztemperatur liegt (z. B. 370 °C bei der Beladung des Behälters), sind für eine geeignete Beschreibung des Materialverhaltens während der verlängerten Zwischenlagerung nicht zielführend. Materialspezifische Hoch- und Niedrigtemperatureffekte werden so systematisch über- bzw. unterschätzt.

Die Nachzerfallswärmeleistung variiert als Funktion der Abkühlzeit und kann theoretisch aus nuklearen Daten bestimmt werden, basierend auf Berechnungen des Inventars, also den aus der Betriebsphase resultierenden Radionukliden (hauptsächlich Spaltprodukte und Aktinoide), und deren radioaktiven Zerfallseigenschaften. Im Jahr 2018 wurde auf Initiative der schwedischen Brennstoff- und Entsorgungsfirma Svensk Kärnbränslehantering (SKB) ein Blind-Benchmark vorgeschlagen /BEN 18/. Mit dem Ziel, die Rechengenauigkeit von Simulationscodes zur Berechnung der Nachzerfallswärmeleistung näher zu untersuchen, wurden detaillierte kalorimetrische Messungen an bestrahlten Brennstäben mit bekannter Abbrandhistorie durchgeführt. Erste Ergebnisse der internationalen Benchmark-Teilnehmer wurden Anfang des Jahres 2019 diskutiert, wobei systematische sowie größere Abweichungen von 10 % zwischen Berechnung und Messung festgestellt wurden. Die Gründe für diese Abweichungen sind aktuell Gegenstand laufender Diskussionen und nicht abschließend geklärt.

4 Arbeitspaket 1: Methoden- und Modellentwicklung

4.1 Einfluss der Plenumsmodellierung in COBRA-SFS auf die Behältertemperatur

Hinsichtlich der Modellierung von Transport- und Lagerbehältern mit COBRA-SFS versteht man unter dem Plenum den Bereich ober- und unterhalb des Tragkorbes. Im Fall der CASTOR®-Behälter befindet sich oberhalb des Tragkorbs das Doppeldeckeldichtsystem mit Druckschalter und unterhalb der Behälterboden. Beide Bereiche setzen sich aus mehreren Schichten unterschiedlicher Materialien zusammen. Hinsichtlich der gesamten Behälteroberfläche nehmen der Behälterdeckel und -boden eines CASTOR®-Behälters knapp 17 % ein und leisten damit einen signifikanten Anteil zur gesamten Wärmeabfuhr an die Umgebung. Um den Einfluss der Plena auf die generischen Modelle in COBRA-SFS zu untersuchen, wurden fünf Ansätze mit unterschiedlicher Detaillierung des Deckel- und Bodenbereiches entwickelt und deren Einfluss auf das Temperaturfeld des generischen GRS DWR-Behältermodells evaluiert (siehe Abb. 4.1). Für diese Studie wurde eine symmetrische Beladung des DWR-Behälters mit insgesamt 39 kW Nachzerfallsleistung angenommen. Eine genauere Beschreibung des Behältermodells ist im Abschlussbericht des Vorgängervorhabens RS1152 zu finden /STU 20/.

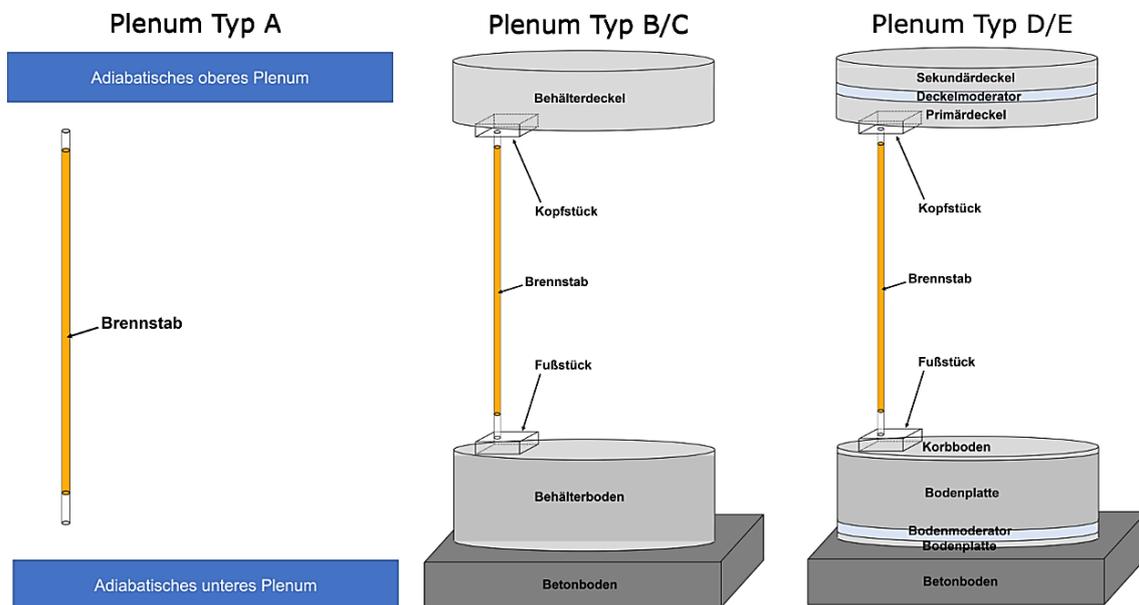


Abb. 4.1 Schematische Darstellung der verschiedenen, an dem generischen GRS DWR-Behältermodell variierten Plenumsmodellansätze

Plenum Typ A erfüllt die Mindestanforderung von COBRA-SFS zur Beschreibung thermischer Grenzbedingungen eines Transport- und Lagerbehältermodells. Es werden hier ober- und unterhalb der Brennelemente adiabatische Randbedingungen angenommen. Zur Approximation der Naturkonvektion wird aus der unteren adiabatischen Zone ein konstanter Heliumstrom mit einer initialen Temperatur von 62 °C modelliert. Dieser Gasstrom „verlässt“ das Modell durch die obere adiabatische Zone und wird anschließend an die untere Zone rückgeführt. Die Plenumstypen B und C sind näher an der Realität und nehmen Kredit von der in COBRA-SFS implementierten Option, den oberen und unteren Behälterbereich explizit zu beschreiben. Diese Option ermöglicht die Beschreibung zwei neuer Mechanismen:

1. Realistischere Simulation der Heliumnaturkonvektion durch ein fiktives Heliumvolumen ober- und unterhalb der homogenen Brennstabzone. Helium, das durch die Unterkanäle der Brennstäbe aus den heißen zentralen Behälterbereichen aufsteigt, wird hier gemischt. Anschließend kann das Gas über kältere Kanäle, normalerweise nahe des Behältermantels, wieder in Richtung Behälterboden absinken.
2. Wärme kann über zusätzliche Festkörper-Rechenknoten (*solid-nodes*) in axialer Richtung durch den Behälterdeckel und -boden abtransportiert und anschließend über Wärmeleitung und Konvektion mit der Umgebung ausgetauscht werden. Dadurch erhöht sich die effektive Oberfläche, über welche das Behältermodell mit der Umgebung Wärme austauschen kann.

Für die Plenumstypen B und C wird der Behälterdeckel und -boden jeweils nur mit einer einzigen Zone modelliert. Über den Behälterboden wird Wärme nur durch Festkörperwärmeeleitung mit der Umgebung ausgetauscht. Hier wird eine Grenztemperatur von 60 °C angenommen. Über den Behälterdeckel wird zusätzlich die Wärmeabfuhr über Konvektion berücksichtigt, die Grenztemperatur beträgt hier 25 °C.

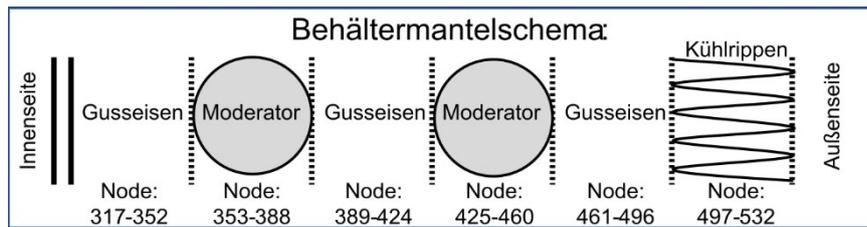


Abb. 4.2 Schematische Darstellung der Modellierung des Behältermantels

Schematische Darstellung der Modellierung des Behältermantels im generischen DWR-Behältermodell der GRS (oben). Abbildung der Mantel- und Deckelstruktur eines CASTOR®-V19 Transport- und Lagerbehälter (unten) /GNS 22/

Wie in Abb. 4.2 (unten) dargestellt hat der Behältermantel in axialer Richtung direkten Kontakt zu den Deckelstrukturen. Dies ermöglicht Festkörperwärmeleitung aus dem Behältermantel in Richtung des Behälterbodens und -deckels. Dies kann die Temperatur des Behältermantels signifikant beeinflussen. COBRA-SFS ermöglicht es, diese Effekte abzubilden und Festkörper-Rechenknoten des Behältermantels mit den Knoten aus den Plenumsstrukturen zu kontaktieren. Um die diesen Effekt genauer zu untersuchen, wurden für das Plenumsmodell Typ C die Mantelknoten 317-424 (Abb. 4.2 (oben)) in direkten Kontakt mit den oberen und unteren Plenumsstrukturen gesetzt. Für die Plenumstypen D und E wurden die Deckel- und Bodenstrukturen detaillierter aufgelöst. Das obere Plenum berücksichtigt jetzt das Doppeldeckelsystem der CASTOR®-Behälter. In beiden Plena werden zusätzlich Schichten aus Polyethylen zur radioaktiven Abschirmung angenommen. Für Plenumstyp D wird angenommen, dass zusätzlich zu den Festkörper-Rechenknoten des Mantels alle Knoten des Tragkorbs direkten Kontakt zum unteren Plenum haben. Plenumstyp E geht wie Typ C nur von einem Kontakt der Knoten 317-424 aus. Eine Auswahl der Ergebnisse der hier beschriebenen

Einzeleffektanalyse zum Einfluss der Plenumsdetaillierung auf das Temperaturfeld ist in Abb. 4.3 und Abb. 4.4 abgebildet.

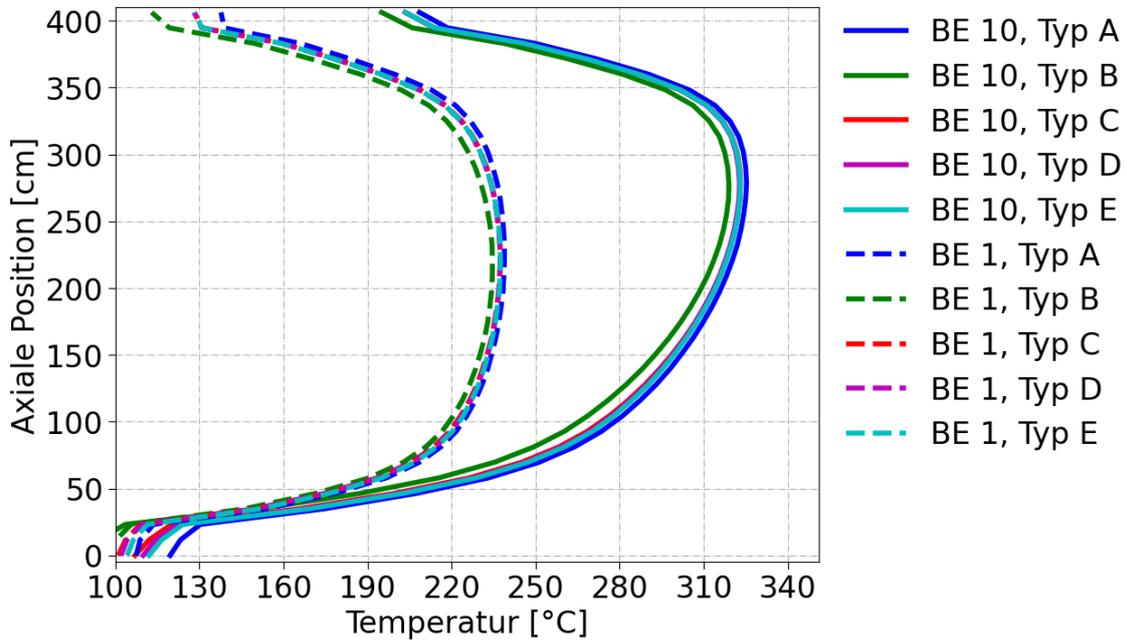


Abb. 4.3 Axiale Hüllrohrtemperaturen der Brennelemente 10 und 1 im generischen CASTOR®-V/19 Modell für fünf verschiedene Plenumstypen

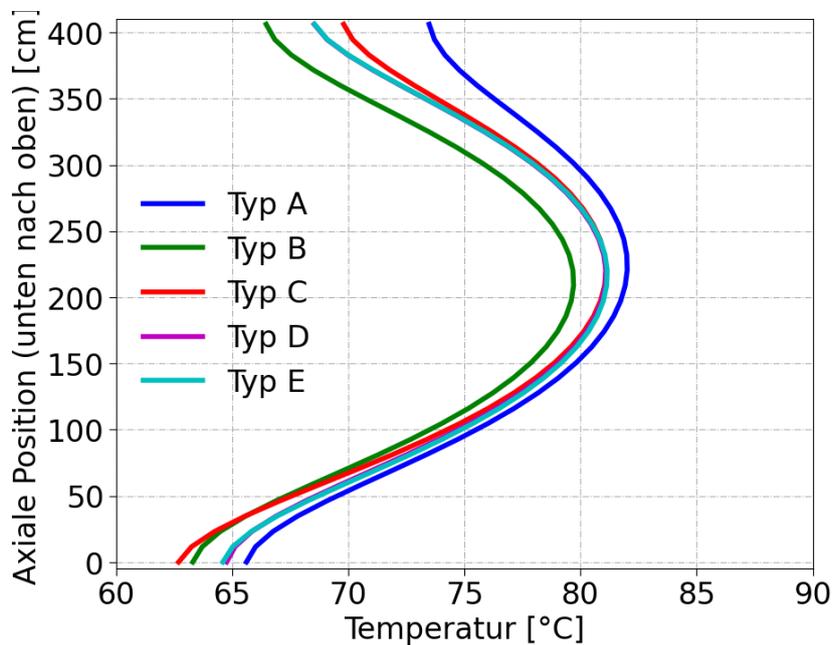


Abb. 4.4 Axiale Behälteroberflächentemperatur im generischen CASTOR®-V/19 Modell für fünf verschiedene Plenumstypen

Der Einfluss des Plenums auf die Hüllrohrtemperatur ist relativ zur maximalen Temperatur gesehen gering (Abb. 4.3). Die Maximaltemperatur ist mit 325 °C für den Plenumstyp A am höchsten und für Plenumstyp B mit 319 °C am niedrigsten, also bei einer Differenz von lediglich 6 °C. Die Typen C, D, E zeigen nahezu identische Hüllrohrtemperaturen. Auch der axiale Verlauf der Hüllrohrtemperaturen ändert sich nur geringfügig zwischen den verschiedenen Plenumsvarianten. Lediglich in direkter Nähe zum oberen und unteren Plenum zeigen sich deutlichere Temperaturabweichungen. Relativ zur maximalen Temperatur ist der Einfluss der Plenumsmodellierung auf die Temperatur der Behältermantels deutlich größer. Erneut zeigen sich die höchsten Maximaltemperaturen für den Typ A (82 °C) und die niedrigsten Temperaturen für den Typ B (79,7 °C).

Der größte Temperaturunterschied von mehr als 7 °C zeigt sich im direkten Anschluss an das obere Plenum. Interessanterweise zeigt sich für das obere Plenum ein stärkerer Einfluss der Kontaktierung der Mantelknoten, wohingegen dieser Einfluss im unteren Plenum nahezu vernachlässigbar ist (Vergleiche Typ B und C). Der Grund hierfür könnte in der Grenztemperatur der Plena liegen, im unteren Plenum ist diese mit 60 °C nahe der Temperatur der Behälteroberfläche. Im oberen Plenum ist die Grenztemperatur mit 25 °C jedoch deutlich geringer und die Wärmeausfuhr effizienter. Für die detaillierteren Abbildung der Plena (Typen D und E) ergeben sich Temperaturen zwischen der adiabatischen Näherung (Typ A) und der einfachsten möglichen Plenumsmodellierung (Typ B). Interessanterweise zeigt sich auch hier nur ein geringer Einfluss der zum unteren Plenum kontaktierten Behälterknoten auf die Temperaturverteilung.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Plenumsdetaillierung einen größeren Einfluss auf die Behälteroberflächentemperatur zeigt. Während der Kontakt von Mantelknoten vornehmlich die Temperaturen nahe dem oberen Plenum ändert, beeinflusst die Auflösung der Deckel und Bodenstrukturen die Temperaturverteilung im gesamten Behälter. Der Plenumstyp E wurde in das DWR- und SWR-Behältermodell der GRS übernommen.

4.2 Entwicklung eines generischen SWR-Behältermodells

Zur Erweiterung der GRS-Rechenkette zur verlängerten Zwischenlagerung wurde ein generisches Modell eines Transport- und Lagerbehälters für SWR-Brennelemente, angelehnt an einen CASTOR® V/52, entwickelt. Der CASTOR® V/52 ist der in Deutschland am häufigsten genutzte Behälter für die Zwischenlagerung von bestrahlten SWR-Brennelementen. Das im Rahmen dieses Projektes für COBRA-SFS entwickelte

generische Modell besteht aus 1026 Knoten und 36 axialen Zonen. Die Behälterbeladung kann entweder mit modernen 10x10 Brennelementen ähnlich dem ATRIUM10 Design oder mit 9x9-1 Brennelementen simuliert werden. Eine schematische Darstellung eines horizontalen Ausschnittes aus dem Behältermodellquerschnitt ist in Abbildung Abb. 4.5 dargestellt. Basierend auf der Publikation von Leber et. al. /LEB 09/ wird angenommen, dass der Tragkorb aus drei Hauptkomponenten besteht. Für die Tragkorbwände werden zwei verschiedene Materialtypen, hier bezeichnet als Typ 1 und Typ 2, angenommen. Während Typ 1 als lasttragende Strukturen rein aus rostfreiem Stahl angenommen wird, ist Typ 2 als zur verbesserten Wärmeleitfähigkeit als Komposit-Struktur modelliert. Typ 2 besteht im Kern aus einem Material mit hoher Wärmeleitfähigkeit, hier ähnlich zu gängigen Aluminiumlegierungen, und einer Ummantelung aus rostfreiem Stahl.

Zur weiteren Verbesserung der Wärmeabfuhr wird die Kontaktfläche zwischen der inneren Tragkorbstruktur und des Tragkorbmantels durch Tragkorbschienen erhöht. Für die Tragkorbschienen wird ein dritter Materialtyp angenommen. Der Tragkorbmantel wird durch 36 radiale Knoten als separate Struktur aufgelöst. Während zwischen den Knoten der Tragkorbschienen und des Tragkorbmantel kein Gasspalt modelliert ist, wird ein endlicher, Helium gefüllter Spalt zwischen Tragkorbmantel und Behälterkörper angenommen. Dieser Tragkorbspalt beträgt im *best estimate* Modell 2 mm. Der Behälterkörper wird in fünf radialen Schichten modelliert. Diese bestehen abwechselnd rein aus Gusseisen oder, um den Einfluss der Moderatorstäbe zu berücksichtigen, aus einer Mischung von Gusseisen und Polyethylen. Innerhalb des Tragkorbes werden am äußeren Rand offene Heliumkanäle zur passiven Naturkonvektion des Gases berücksichtigt. Zusätzlich sind im Tragkorb 52 Brennelementschächte modelliert, welche mit jeweils einem SWR-Brennelement bestückt werden können. Innerhalb jedes Brennelements ermöglicht es COBRA-SFS, jeden Brennstab einzeln aufgelöst zu simulieren.

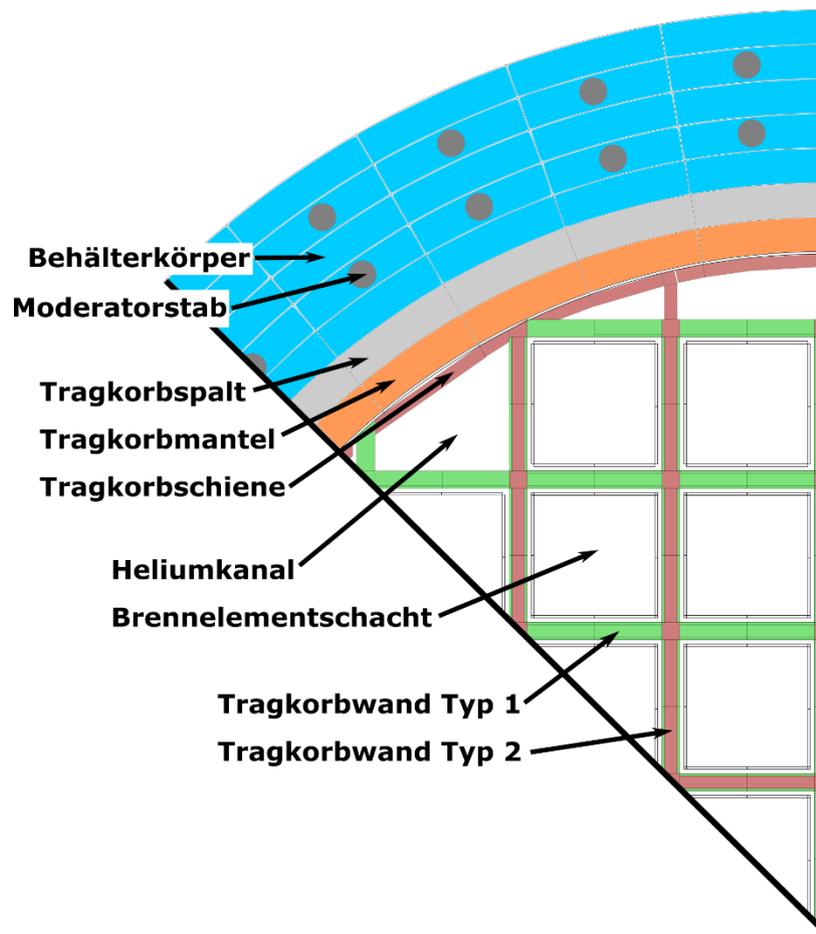


Abb. 4.5 Schematische Darstellung eines horizontalen Ausschnitts aus dem generischen COBRA-SFS CASTOR® V/52 Behältermodell

Wichtige Behälterkomponenten sind mittels Pfeil gekennzeichnet und beschrieben. Aufgrund der Rotationssymmetrie des Behälters beschreibt der dargestellte Ausschnitt den Behälter vollständig.

Eine schematische Darstellung eines generischen 10×10 SWR-Brennelements mit Wasserkanal sowie der entsprechende, im COBRA-SFS Modell angewandte Modellierungsansatz sind in Abb. 4.6 dargestellt. Zusätzlich zu den Brennstäben wird der für SWR-Brennelemente typische umgebende Brennelementkasten mit je acht Festkörper-Rechenknoten modelliert. Zwischen Brennelementkasten und Tragkorbwand wird jeweils ein Abstand von 3,4 mm angenommen. Da COBRA-SFS von einem periodischen Gitter innerhalb der Brennstabzone ausgeht, lassen sich offene (ungeflutete) Wasserkanäle, welche sich über mehrere Stabpositionen erstrecken, nicht abbilden. Der offene Wasserkanal erlaubt in der Zwischenlagerung jedoch verstärkte Heliumkonvektion nahe des Brennelementzentrums. Dort befinden sich üblicherweise die heißesten Brennstäbe. Um diesen zusätzlichen Wärmetransport zumindest teilweise zu berücksichtigen,

wurden die Brennstäbe im Bereich des Wasserkanals durch „Dummysstäbe“ ohne Nachzerfallsleistung und mit zehnfach reduziertem Durchmesser ersetzt.

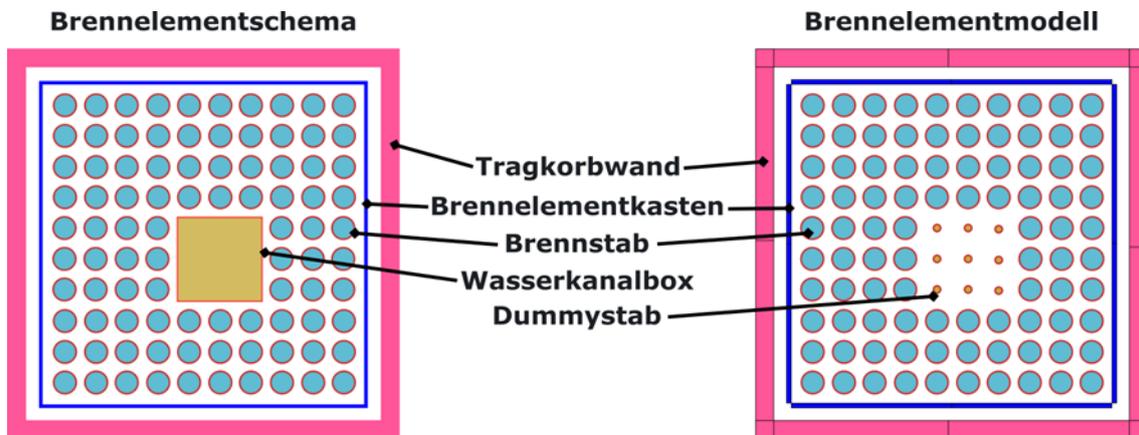


Abb. 4.6 Schematische Darstellung eines horizontalen Ausschnitts aus einem generischen 10x10 SWR-Brennelement (links)

Schematische Darstellung des im CASTOR® V/52 10x10 SWR-Brennelementmodell verwendeten BE (rechts). Die wichtigsten Komponenten sind jeweils gekennzeichnet.

Für das oben vorgestellte Brennelement wurde mit MOTIVE /HAN 17/ eine fünfjährige Bestrahlung bis zu einem Abbrand von 55 GWd/tSM simuliert. Die sich daraus ergebende, brennelementgemittelte Nachzerfallsleistung sowie das axiale Leistungsprofil sind in Abbildung Abb. 4.7 dargestellt. Basierend auf diesen Daten wurde ein generisches Beladungsszenario für das CASTOR®-V/52 Modell entwickelt. Geht man konservativ von der maximal zugelassenen Behälterbeladung mit einer thermischen Leistung von 40 kW aus, so ergibt sich für jedes Brennelement eine Nachzerfallsleistung von 769 kW.

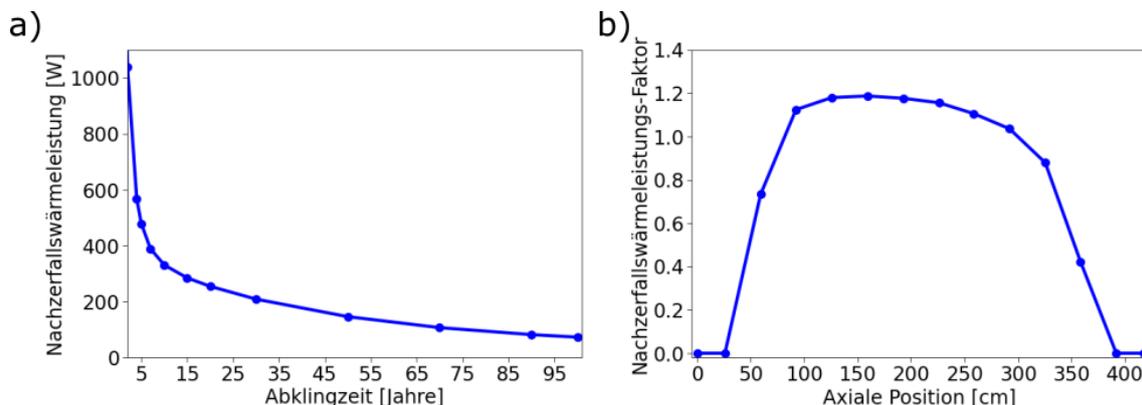


Abb. 4.7 Nachzerfallsleistung (a) und axiales Leistungsprofil (b)) eines generischen 10x10 SWR-Brennelement mit einem Abbrand von 55 GWd/tSM

Laut Abb. 4.7 a) entspricht dies einem Einlagerungszeitpunkt der Brennelemente mit ungefähr 4.5 Jahren Abklingzeit. Vereinfachend wird desweiteren für jedes Brennelement dasselbe, in Abb. 4.7 b) dargestellte, axiale Leistungsprofil angenommen. Für diese Annahmen ergibt sich mit dem oben beschriebenen generischen CASTOR® V/52 Behältermodell die in Abb. 4.8 und in Abb. 4.9 dargestellten Temperaturverteilungen.

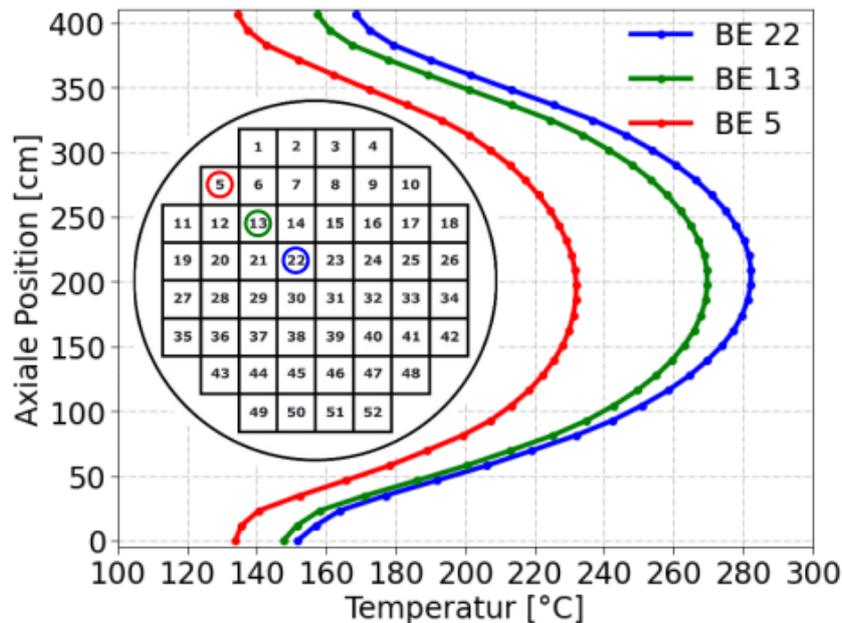


Abb. 4.8 Axiale Temperaturprofile aus drei Brennelementen an den gekennzeichneten Positionen aus dem generischen CASTOR® V/52 Modell (homogene Beladung 40 kW)

Aufgrund der Behältersymmetrie und der homogenen Beladung beschreiben die ausgewählten Brennelemente 22, 13 und 5 das Temperaturfeld im Tragkorb umfassend. Die maximale Hüllrohrtemperatur im gesamten Behältermodell beträgt 282°C und wird im Brennelement 22 knapp oberhalb der Behältermitte erreicht. Die Hüllrohrtemperaturen fallen dann zum Behälterboden und -Deckel jeweils rasch auf 152°C bzw. 168°C ab. Hervorzuheben ist hier, dass für den Behälterdeckel höhere Temperaturen vorhergesagt werden als für den Boden. Dies ist bemerkenswert, da zum einen die modellierte Wärmeabfuhr an die Umgebung über den Behälterboden geringer ist als über den Deckel und zum anderen aufgrund des axialen Leistungsprofil in der unteren Hälfte des Behälters mehr Wärme generiert wird. Eine mögliche Erklärung für dieses Temperaturprofil ist der Wärmetransport durch Konvektion von der unteren Behälterhälfte in die obere. In den weiter außen gelegenen Brennelementen stellen sich aufgrund des geringeren

Wärmestaus niedrigere maximale Hüllrohrtemperaturen von 270 °C (BE 13) bzw. 232 °C (BE 5) ein.

Jedes Brennelement zeigt zusätzlich ein ausgeprägtes Temperaturprofil in radialer Richtung, wobei der Verlauf jeweils von der axialen Position im Brennelement abhängt (Abb. 4.9).

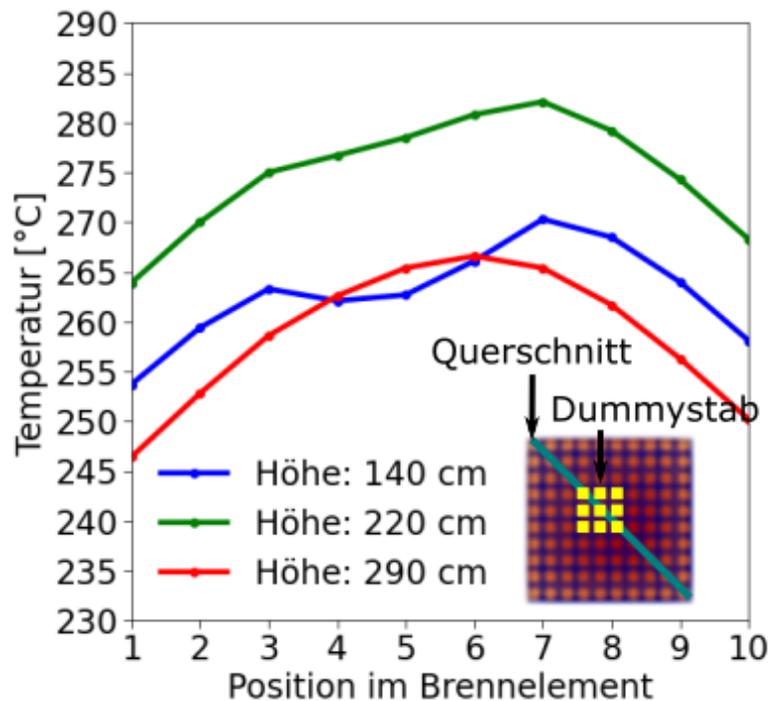


Abb. 4.9 Radiale Temperaturprofile aus dem Brennelement 22 an drei verschiedenen axialen Positionen im generischen CASTOR® V/52 Modell (homogene Be-
ladung 40 kW)

Die Position des Querschnittes durch das Brennelement sowie Positionen der Dummystäbe sind schematisch unten rechts im Bildeinsatz dargestellt.

An der heißesten Position bei 220 cm zeigt sich ein Temperaturgradient von knapp 20 °C, wobei sich der heißeste Stab direkt im Anschluss an den Wasserkanal befindet. Der Einfluss der Dummystäbe, für welche keine Wärmeleistung angenommen wird, zeigt sich auf der Höhe von 220 cm durch eine geringe Asymmetrie im Temperaturprofil sowie einem Abflachen der Kurve für die Brennstabpositionen 4, 5, und 6. Unterhalb der Behältermitte bei 140 cm ist ein kühlender Effekt der Dummystäbe (des Wasserkanals) zu erkennen und es bildet sich bei der Brennstabposition 4 ein lokales Minimum. Das Gegenteil ist oberhalb der Behältermitte zu erkennen. In dieser Position verschiebt sich das Temperaturmaximum von den aktiven Brennstäben weg und in Richtung des

Dummystabs an Position 6. Da dieser Stab keine eigene Wärmeleistung mitbringt wird er lediglich durch Wärmestrahlung, Wärmeleitung und Konvektion erhitzt. Da die Wärmestrahlung und -Leitung an allen Positionen im Brennelement ungefähr denselben Einfluss hat zeigt der Unterschied in den radialen Temperaturprofilen, dass in diesem Modellierungsansatz die Konvektion durch den Wasserkanal die Temperaturverteilung in den Brennelementen signifikant beeinflusst.

4.3 Einfluss der Brennelementmodellierung in COBRA-SFS auf das Temperaturfeld

Die Brennelemente sind in einem COBRA-SFS Eingabedatensatz an verschiedenen Stellen teilweise tief verankert. Ein Austausch von Brennelementen ist daher nicht einfach möglich, sondern erfordert signifikante Änderungen am Modell und erheblichen Zeitaufwand. Um den Einfluss verschiedener Brennelementtypen auf das Temperaturfeld einzuschätzen, wurden für die generischen DWR- und SWR-Behältermodelle je ein weiterer, für die deutsche Zwischenlagerung relevanter, Brennelementtyp ausgewählt und in die Modelle implementiert. Für das generische CASTOR® V/19 Modell wurden zusätzlich zu den vorhandenen 18x18 DWR-Brennelementen 16x16 DWR-Brennelemente modelliert. Das generische CASTOR® V/52 Modell wurde zusätzlich zu den 10x10 SWR-Brennelementen um 9x9 SWR-Brennelementen erweitert.

4.3.1 SWR-Brennelementmodellierung

Für das CASTOR® V/52 Modell wurden folgende Ansätze verfolgt:

- Typ 1: Möglichst realistische Modellierung eines 10x10 Brennelements ähnlich dem Atrium 10 Design
- Typ 2: Konservative Darstellung eines 10x10 Brennelements
- Typ 3: Konservative Modellierung eines 9x9-1 Brennelements

Ein schematischer Querschnitt der jeweiligen Ansätze ist in Abb. 4.10 dargestellt. Typ 1 entspricht dem oben (Kapitel 4.2) vorgestellten Modellierungsansatz. Typ 2 soll den Einfluss der vergrößerten Heliumkanäle im Bereich des Wasserkanals näher beleuchten. Typ 3 entspricht einem generischen 9x9-1 Brennelement. Dies soll aufzeigen wie sich eine geringere Anzahl an Brennstäben und ein größerer Abstand der Stäbe zueinander auf das Temperaturfeld auswirkt.

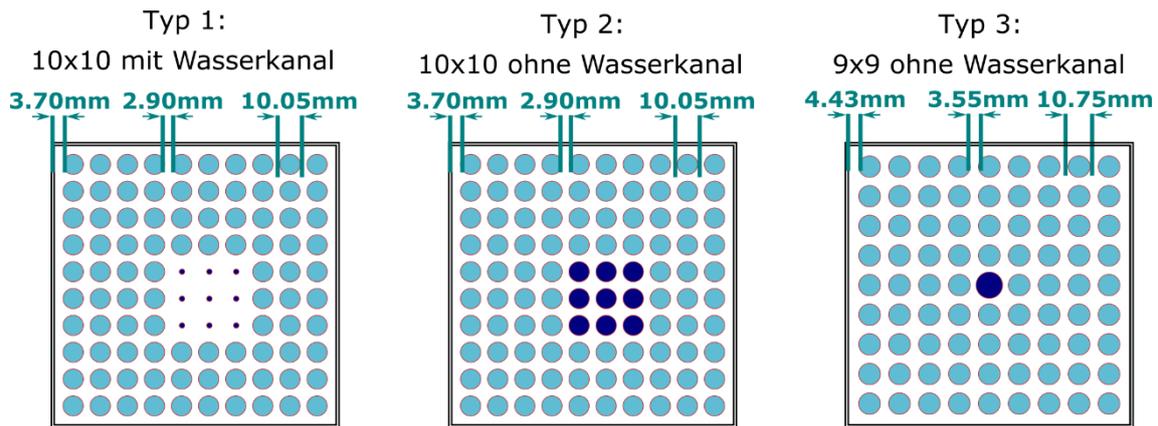


Abb. 4.10 Schematische Darstellung der drei variierten SWR-Brennelementtypen.
Die in dunkelblau Positionen haben jeweils keine Nachzerfallsleistung

Betrachtet man erneut eine homogene Behälterbeladung mit 40 kW, so ergibt sich für das heißeste Brennelement an Position 22 das in Abb. 4.11 dargestellte Temperaturprofil. Vereinfachend wird hier für alle Brennelemente das in Abb. 4.7 gezeigte axiale Leistungsprofil angewendet. Hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur zeigt sich zwischen den Modellierungsansätzen nur ein moderater Temperaturunterschied. Für Typ 1 ergeben sich 282 °C, für Typ 2 286 °C und für Typ 3 291 °C. Im direkten Vergleich der Temperaturprofile Typ 1 und Typ 2 zeigt sich erneut der Einfluss des Wasserkanals, durch welches sich das Temperaturmaximum zu einer höheren axialen Position verschiebt. Anhand der reduzierten maximalen Hüllrohrtemperatur in Brennelement Typ 1 zeigt sich der insgesamt kühlende Effekt des Wasserkanals auf die umgebenden Brennstäbe. In diesem Vergleich zeigt der Brennelementtyp 3 die höchste Hüllrohrtemperatur von 291 °C. Die höhere Temperatur kann hier auf die geringere Anzahl an Brennstäben im 9x9 Gitter und die damit einhergehende reduzierte absolute Brennstaboberfläche zurückgeführt werden. Durch die geringere Oberfläche wird der Wärmeaustausch mit der Umgebung erschwert und die Temperatur der Stäbe steigt an. In diesem Vergleich der drei Brennelementtypen ist daher die 9x9-1 Konfiguration (Typ 3), hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur, die konservativste Variante.

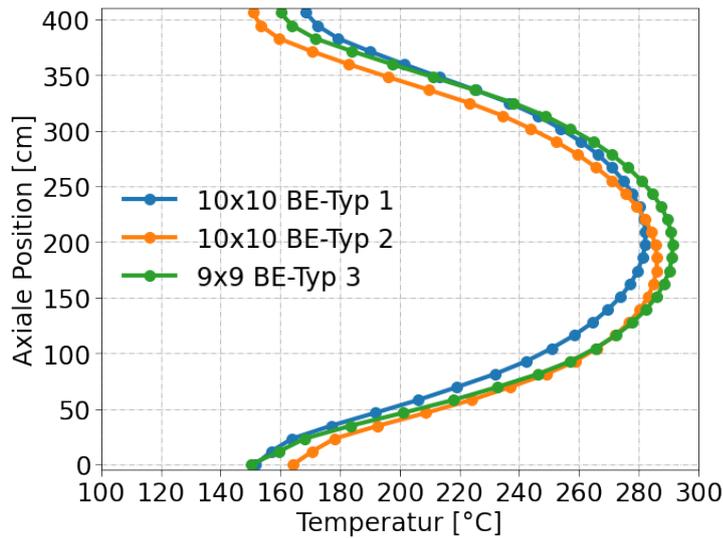


Abb. 4.11 Axiale Temperaturprofile des jeweils heißesten Brennstabs für drei verschiedene Brennelementtypen

Der Einfluss der Modellierung des Wasserkanals zeigt sich auch in der von COBRA-SFS simulierte Heliumflussgeschwindigkeit. Während sich für den BE-Typ 1 ein starker Heliumfluss von bis zu 1,3 m/s im Zwischenraum der Dummystäbe einstellt, ist das Flussprofil für den BE-Typ 2 deutlich flacher und der maximal erreichte Wert ist mit 0,022 m/s deutlich geringer. Dieser drastische Unterschied deutet auf einen stark reduzierten hydraulischen Widerstand für die größeren Heliumkanäle im Bereich des Wasserkanals hin. Der ausgeprägte Heliumfluss erlaubt verstärkten Wärmetransport aus der Behältermitte in Richtung des oberen Plenums. Dadurch verringert sich die maximale Hüllrohrtemperatur und das axiale Temperaturprofil verschiebt sich zu höheren axialen Positionen.

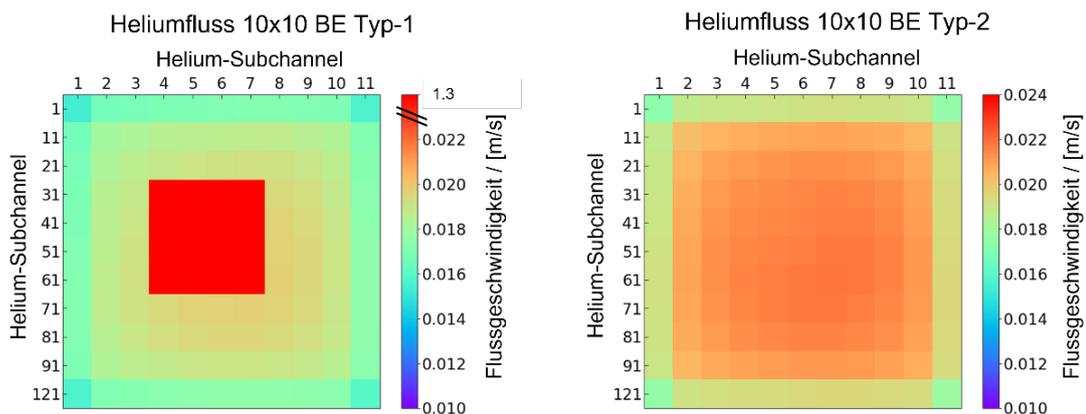


Abb. 4.12 Falschfarbendarstellung der Heliumflussgeschwindigkeit in den Unterkanälen der Brennelementtypen 1 und 2

4.3.2 DWR-Brennelementmodellierung

Eine ähnliche Untersuchung des Einflusses der Brennelemente auf das Temperaturfeld wurde mit dem generischen DWR-Behältermodell durchgeführt. Während das in RS1552 entwickelte Modell nur über 18x18 Brennelemente verfügte, wurde das Modell in diesem Vorhaben zusätzlich um 16x16 Brennelemente erweitert. Beide Brennelementmodelle sind schematisch in Abbildung Abb. 4.13 dargestellt.

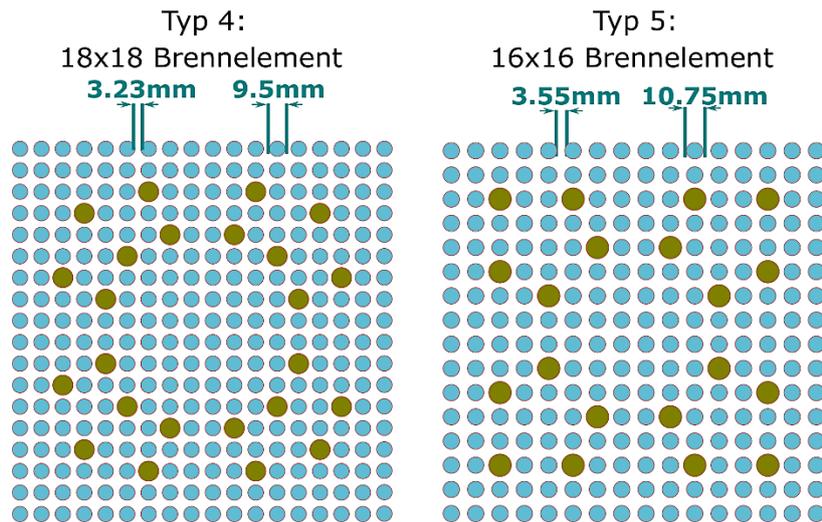


Abb. 4.13 Schematische Darstellung der zwei DWR-Brennelementtypen

Blau hervorgehobene Positionen stellen Brennstäbe und die gelb gekennzeichneten Positionen Steuerstabführungsrohre dar.

Unter der Annahme einer homogenen Beladung mit einer gesamten Zerfallsleistung von 39kW ergeben sich für die beiden Brennelementmodelle die in Abb. 4.14 dargestellten Temperaturverteilungen. In diesem Vergleich zeigt sich ein gegensätzliches Bild als beim Vergleich der SWR-Brennelemente. Im Falle der DWR-Brennelemente ergeben sich im 18x18 Brennelementmodell für die zentralen Brennstäbe deutlich höhere Temperaturen als im 16x16 Brennelementmodell. Interessanterweise sind die Temperaturen der äußeren Brennstäbe bei beiden Modellen nahezu identisch. Aufgrund der niedrigeren absoluten Brennstaboberfläche wurden auch in diesem Vergleich höhere Temperaturen für den Brennelementtyp 5 (16x16) erwartet. Um dieses Phänomen näher zu untersuchen, wurden für die beiden Modelle jeweils Simulationen unter Vernachlässigung der konvektiven Wärmeausfuhr und unter Vernachlässigung der radiativen Wärmeausfuhr durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.15 dargestellt. Hier zeigt sich, dass der Temperaturunterschied unter Vernachlässigung der Wärmestrahlung deutlich weniger ausgeprägt ist. In diesem Szenario liegen die Temperaturen im 16x16 Brennelement

tendenziell sogar leicht über denen des 18x18 Brennelement. Im Gegensatz dazu wird der Unterschied unter Vernachlässigung des konvektiven Wärmeaustausches sogar deutlich vergrößert.

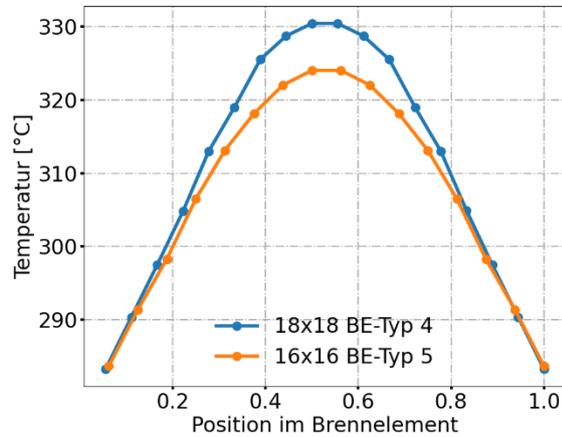


Abb. 4.14 Radiales Temperaturprofil des zentralen Brennelements im DWR-Behältermodell für die Brennelementtypen 4 (DWR-18x18) und Typ 5 (DWR-16x16)

Der Wärmeaustausch über Wärmestrahlung wird in COBRA-SFS vor allem über die sogenannten *view-factors* bestimmt. Diese geben an, welcher Strahlungsanteil von einer Oberfläche auf eine benachbarte Fläche trifft. Während die Berechnung dieser Faktoren in einfachen Geometrien wie den offenen Heliumkanälen im Tragkorb relativ einfach ist, ist diese für die dichten Brennstabgitter in den Brennelementen deutlich komplexer. Für COBRA-SFS werden die View-Faktoren daher über das externe Werkzeug RADGEN berechnet. Im Laufe der BREZL-Vorhaben zeigten sich Unstimmigkeiten in der Berechnung der View-Faktoren mittels RADGEN. Diese wurden vor allem durch Unterschiede der Rechenergebnisse zwischen verschiedenen RADGEN-Versionen sowie zwischen verschiedenen Möglichkeiten der Berechnung mit derselben RADGEN-Version deutlich. Um die hier aufgezeigten Unterschiede genauer zu bewerten, sollte die Berechnung der View-Faktoren in COBRA-SFS in künftigen Eigenforschungsvorhaben genauer untersucht werden.

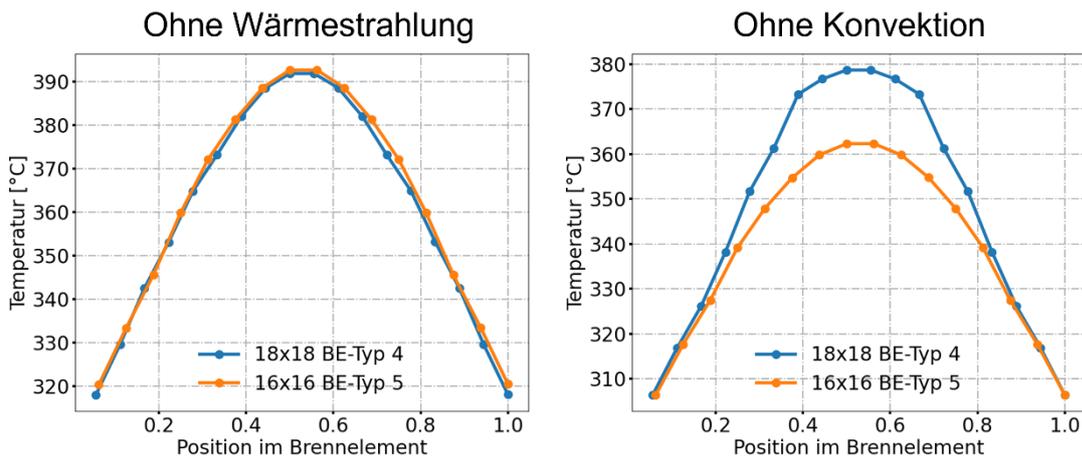


Abb. 4.15 Radiales Temperaturprofil des zentralen Brennelements im DWR-Behältermodell für die Brennelementtypen 4 und Typ 5

Radiales Temperaturprofil des zentralen Brennelements im DWR-Behältermodell für die Brennelementtypen 4 (DWR-18x18) und Typ 5 (DWR-16x16) jeweils unter Vernachlässigung der Wärmestrahlung und der Konvektion.

4.4 Konservative Modellierung des SWR-Behälters

Aufgrund unzureichender frei verfügbarer Informationen zum CASTOR® V/52 kann das oben beschriebene Modell nur als generisches Modell angesehen werden. Da keine Temperaturmessdaten zu diesem Behältertyp verfügbar sind, gestaltet sich eine Verifizierung oder Validierung des Modells schwierig. Ein Vergleich, der von der GRS entwickelten Modelle mit den Behältermodellen anderer Institutionen, erlaubt es jedoch die Aussagekraft der Temperaturfeldberechnungen zu bewerten. Im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhabens wurden daher informelle Gespräche mit Experten anderer Institutionen durchgeführt, welche sich mit der thermischen Modellierung von Transport- und Lagerbehältern beschäftigen. In einer Expertenrunde wurde das generische CASTOR® V/52 Modell der GRS diskutiert und Temperaturfeldberechnungen fiktiver Szenarien mit den Ergebnissen der anderen Institutionen verglichen. In der Besprechung wurden fünf potenziell einflussreiche Parameter identifiziert, in welchem das *best-estimate* GRS-Modell gegenüber einer konservativen Modellierung signifikant nicht-konservative Annahmen trifft. Diese Parameter sind in Tab. 4.1 zusammengefasst. Zur Einordnung des Vergleichs muss erwähnt werden, dass zum Beispiel für Auslegungsrechnungen eines Transport- und Lagerbehälters stets konservative Modellierungsansätze verfolgt werden. Um den Einfluss dieser Parameter auf das GRS SWR-Modell abzuschätzen,

wurden diese zunächst einzeln variiert und die sich daraus ergebenden Temperaturen anschließend jeweils mit dem *best-estimate* Modell verglichen.

Tab. 4.1 Vergleich potenziell einflussreiche Unterschiede in einem *best-estimate* und einem konservativen Modellierungsansatz für das generische CASTOR® V/52 Modell der GRS

Parameter	<i>best-estimate</i>	konservativ
Tragkorbspalt	2 mm	4 mm
Brennelementtyp	10x10 (ähnlich Atrium 10)	9x9-1
Befüllgas	Helium (rein)	Helium / Wasser Gemisch (4 m%)
Umgebungs-temperatur	25 °C	30 °C
Material Tragkorb-wand Typ 2	Stahl/Aluminium Hybridstruktur	Stahl/Kupfer Hybridstruktur

Der Einfluss des Tragkorbspaltes auf das GRS SWR-Behältermodell wurde anhand vier verschiedener Szenarien untersucht. Diese sind in Abbildung Abb. 4.16 schematisch dargestellt.

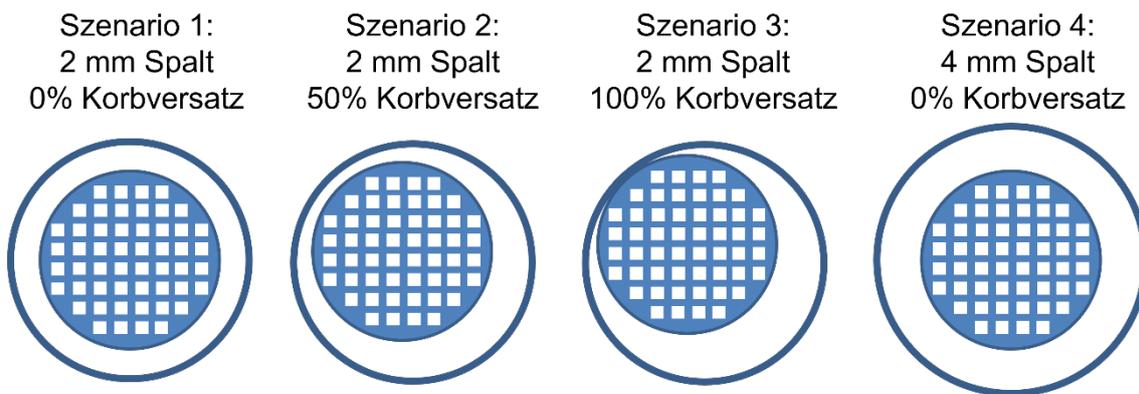


Abb. 4.16 Schematische Darstellung vier verschiedener SWR-Behälterszenarien mit unterschiedlicher Tragkorbposition

Szenario 1 entspricht hierbei der Tragkorbposition im *best-estimate* Modell mit einem symmetrischen Tragkorbspalt von 2 mm. Während der Beladung eines Behälters ist es jedoch auch denkbar, dass es zu einer Verschiebung des Tragkorbes kommt und dieser nicht mehr zentriert im Behälterschacht sitzt. Die Auswirkungen einer solchen Verschiebung des Tragkorbes soll in den Szenarien 2 und 3 untersucht werden. In diesen Szenarien ist der mittlere Tragkorbspalt weiterhin 2 mm jedoch wird zusätzlich eine

Verschiebung von 50 bzw. 100 % angenommen. Im Fall von Szenario 3 liegt der Tragkorbmantel direkt an der Behälterwand an. Vereinfacht wird in der Modellierung in diesem Fall von einem direkt Festkörperwärmeübergang zwischen den zwei in Kontakt stehenden Knoten ausgegangen. Im vierten Szenario wird konservativ davon ausgegangen, dass der Tragkorbspalt symmetrisch 4 mm in allen Richtungen beträgt. Die Auswirkungen dieser vier Szenarien, jeweils auf den heißesten Stab im Modell, sind in Abbildung Abb. 4.17 dargestellt. Die Verschiebung des Tragkorbes zeigt nur geringen Einfluss auf die Hüllrohrtemperaturen des heißesten Stabes. Im Falle eines direkten Kontaktes des Tragkorbes mit dem Behältermantel sinkt die maximale Hüllrohrtemperatur lediglich von 282 °C auf 279 °C. Eine mögliche Erklärung für den geringen Einfluss ist, dass zwar durch den Versatz des Tragkorbes der thermische Widerstand am Kontaktpunkt drastisch herabgesetzt wird, gleichzeitig wird dieser aber auf der entgegengesetzten Seite stark erhöht. Dadurch bleibt die Wärmeabfuhr des Tragkorbes auf den Behältermantel im Mittel nahezu unverändert und die Temperatur im Inneren sinkt nur leicht. Szenario 4 zeigt den Effekt, wenn der absolute thermische Widerstand erhöht wird. Hier steigt die maximale Hüllrohrtemperatur signifikant um knapp 20 °C K auf 301 °C. Die Vergrößerung des Gasspalt verschlechtert die Wärmeausfuhr im inneren des Behälters, was eine Temperaturerhöhung im gesamten Tragkorb zur Folge hat.

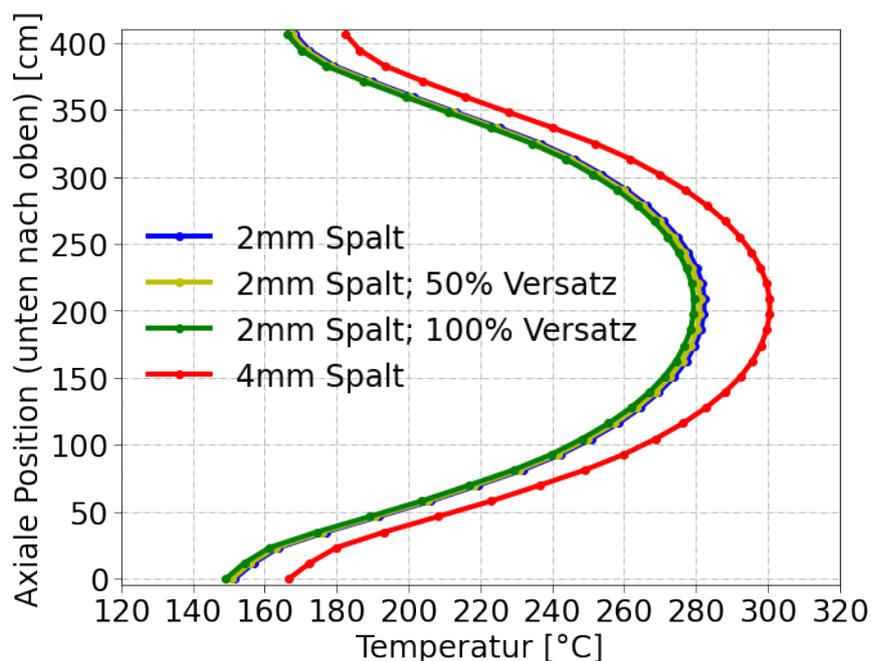


Abb. 4.17 Axiale Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für vier verschiedene Tragkorbpositionen

Der gegensätzliche Effekt zeigt sich im Temperaturverhalten der Behälteroberfläche (siehe Abb. 4.18). Hier zeigt sich, dass die Oberflächentemperatur nahezu unabhängig von der absoluten Größe des Tragkorbspaltes ist. Für einen Spalt von 2 mm ergeben sich 84,3 °C und für 4 mm 83,8 °C. Dies ist nachvollziehbar, da die gesamte abzuführende Wärmemenge in beiden Szenarien sich nicht ändert. Es ändert sich lediglich die Effizienz, mit der die Wärme zur Behälteroberfläche abgeführt wird, wodurch die Temperatur im Inneren ansteigt, auf der Oberfläche jedoch gleichbleibt. Der geringe Temperaturunterschied in beiden Szenarien lässt sich über eine geringfügige Verlagerung der Wärmeströme in Szenario 4 hin zum Behälterdeckel und Behälterboden begründen. Im Falle einer asymmetrischen Tragkorbposition kommt es jedoch zu einer Asymmetrie der Wärmeströme im Behälter. Die Wärmeausfuhr über die Bereiche mit geringerem Spaltabstand wird begünstigt, während diese über Bereiche mit größeren Abständen ungünstiger wird. Dies führt dazu, dass im Bereich des geringen Spaltabstandes, mehr Wärme vom Tragkorb auf dem Behältermantel übertragen wird und der Behältermantel an diesem Punkt stärker erwärmt wird. In diesem Beispiel zeigt sich ein nahezu linearer Anstieg der Oberflächentemperatur von 84,3 °C (0 % Versatz) über 86,2 °C (50 % Versatz) auf 88,4 °C (100 % Versatz). Insgesamt ist der Temperaturanstieg auf der Behälteroberfläche jedoch moderat im Bereich von 4 °C.

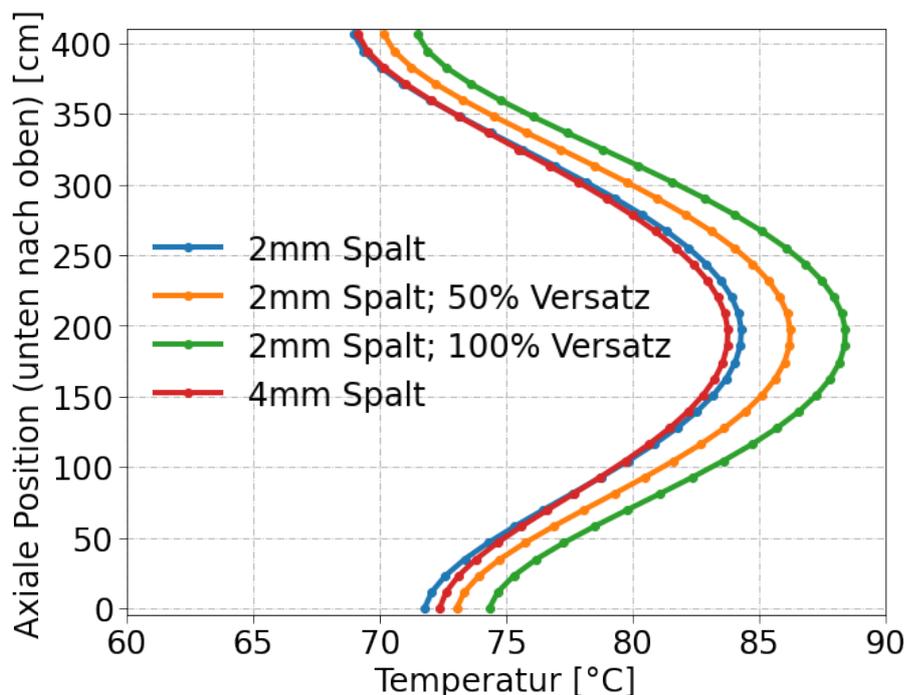


Abb. 4.18 Axiale Temperaturprofile der Behälteroberfläche an der heißesten Position für vier verschiedene Tragkorbpositionen

Weitere potenziell einflussreiche Parameter sind die Umgebungstemperatur des Behälters sowie die thermische Leitfähigkeit des Heliumgases in der Behälterkavität. Beide Parameter unterliegen einer gewissen Unsicherheit. Die Umgebungstemperatur eines Transport- und Lagerbehälters wird in der Realität wesentlich durch die Auslastung des Zwischenlagers, der Position des Behälters im Lager und den Wetterbedingungen am Standort bestimmt. Diese Informationen sind normalerweise nicht direkt frei verfügbar. Die Wärmeleitfähigkeit des Heliums wird vor allem durch die nach der Behältertrocknung im Behälter verbleibende Restfeuchtigkeit bestimmt. Das dabei entstehende Gemisch aus Wasserdampf und Helium weist deutlich reduzierte Wärmeleitfähigkeit auf. In diesem Beispiel wird von 4 % Wasser im Behälter ausgegangen. Dadurch wird basierend auf der Sutherland-Gleichung eine Reduzierung der Heliumwärmeleitfähigkeit von 5 % abgeschätzt /HÖH 72/. Der Einfluss beider Parameter auf die maximale Hüllrohrtemperatur ist in Abbildung Abb. 4.19 dargestellt. Daraus wird ersichtlich, dass COBRA-SFS für das hier vorgestellte SWR-Behältermodell einen vernachlässigbaren Einfluss der Heliumleitfähigkeit voraussagt. Für die Umgebungstemperatur ist der Einfluss ausgeprägter, und die maximale Hüllrohrtemperatur steigt von 282 °C auf 286 °C.

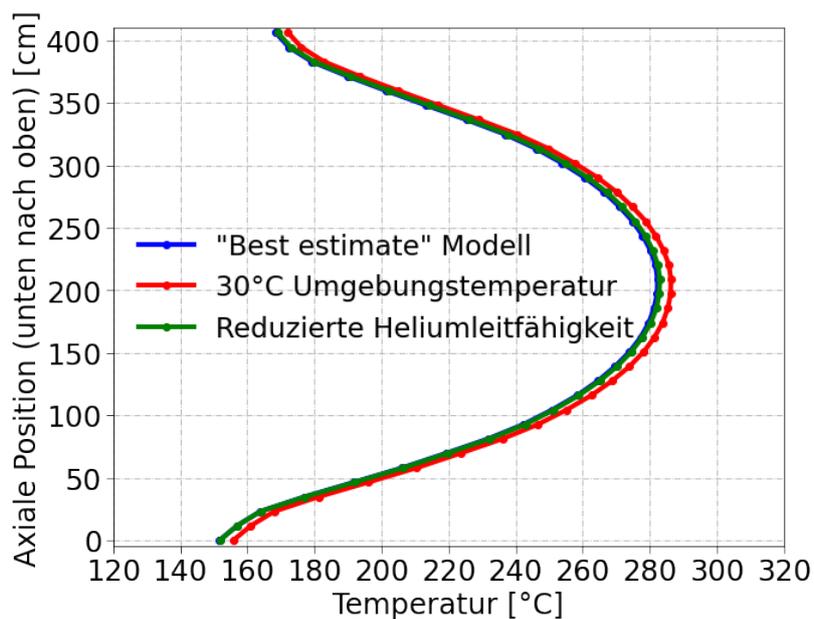


Abb. 4.19 Axiale Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für das *best-estimate* Modell

Ein Modell mit erhöhter Umgebungstemperatur und ein Modell mit reduzierter Heliumwärmeleitfähigkeit

Basierend auf den in Tabelle Tab. 4.1 aufgelisteten Parametern wurde ein konservatives SWR-Behältermodell entwickelt. Dieses geht von einer homogenen Behälterbeladung mit 52 9x9 SWR-Brennelementen, einem Tragkorbspalt von 4 mm, einem Wassergehalt in der Behälterkavität von 4 m% und einer Umgebungstemperatur von 30 °C aus. Aufgrund fehlender Informationen über die Wärmeleitfähigkeit einer Stahl/Kupfer Hybridstruktur wird auch im konservativen Modell weiterhin von Stahl/Aluminium Hybridstrukturen ausgegangen. Ob dieses Vorgehen konservativ ist, hängt vom realen, aber unbekanntem, Stahl/Kupfer Verhältnis im CASTOR® V/52 ab. Allerdings liegt die Wärmeleitfähigkeit von Kupferlegierungen meist weit über der gängiger Aluminiumlegierungen, daher kann die Annahme von Aluminiumstrukturen im Tragkorb mit großer Wahrscheinlichkeit als konservativ angesehen werden. Im direkten Vergleich zeigt sich der Einfluss der konservativen Modellierung auf die maximale Hüllrohrtemperatur durch einen Temperaturanstieg von ungefähr 30 °C auf 314 °C. Zusätzlich sagt COBRA-SFS nur einen geringen Temperaturunterschied von 2 °C zwischen dem konservativen Modell mit 9x9 und 10x10 SWR-Brennelementen vorher. Vergleicht man diese Ergebnisse mit den oben diskutierten Einzeleinflüssen, so ist davon auszugehen, dass für die erhöhte maximale Hüllrohrtemperatur in den konservativen Modellierungsansätzen allen voran der größere Spaltabstand, sowie zu einem kleineren Teil die Annahme einer Beladung mit 9x9 SWR-Brennelementen, verantwortlich ist. Der Einfluss der konservativen Modellierung auf die Oberflächentemperatur ist in Abb. 4.18 dargestellt. Für beide Modellierungsansätze zeigt sich im Vergleich zum *best-estimate* Modell ein Temperaturanstieg von maximal 4 K (10x10-BE) bzw. 5 K (9x9-BE). Bezieht man erneut die Einzeleffektuntersuchungen mit ein, so ist dieser Temperaturanstieg hauptsächlich auf die Erhöhung der Umgebungstemperatur von 25 °C auf 30 °C zurückzuführen.

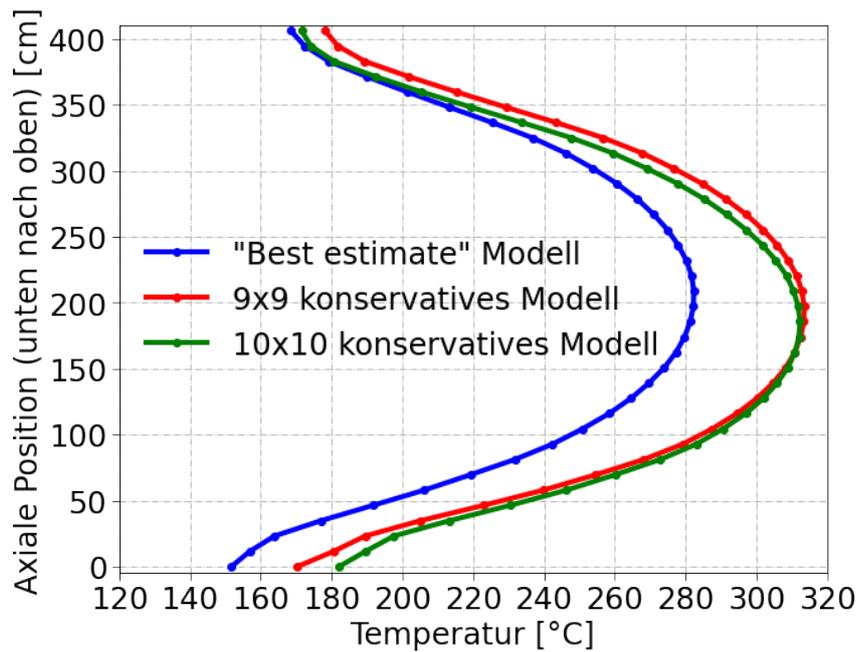


Abb. 4.20 Vergleich der axialen Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für das *best estimate* Modell und die konservativen Modelle mit 9x9 und 10x10 SWR-Brennelementen

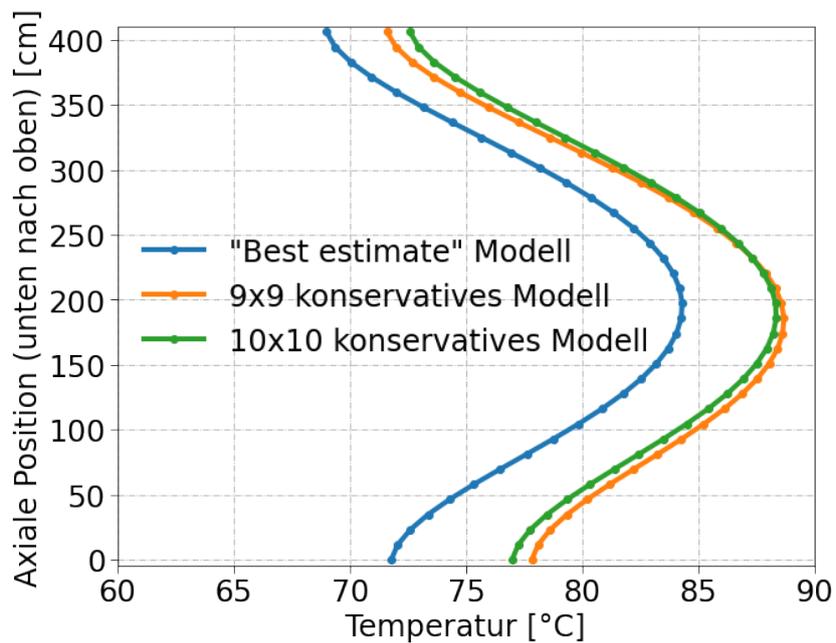


Abb. 4.21 Axiale Temperaturprofile der Behälteroberfläche an der heißesten Position für das *best-estimate* Modell und die konservativen Modelle mit 9x9 und 10x10 SWR-Brennelementen

4.5 Trocknungstransienten

Um die Trockenlagerung bestrahlter Brennelemente zu ermöglichen, müssen diese zunächst aus dem Abklingbecken in die Transport- und Lagerbehälter überführt werden. Während dieses Vorgangs ist es essenziell, im Behälter verbleibendes Wasser durch einen Trocknungsprozess zu entfernen, um potenziell schädliche Prozesse wie die Wasserstoffbildung durch Radiolyse zu verhindern. Im Allgemeinen wird im Behälter dazu zunächst über mehrere Stunden ein Unterdruck angelegt. Anschließend wird der Behälter mit Helium gespült. Befindet sich im Abgasstrom des Behälters noch zu viel Feuchtigkeit, wird der Behälter erneut unter Unterdruck gesetzt und der Prozess wiederholt. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden zwei verschiedene Trocknungstransienten und zwei Behältermodelle verglichen. Zur Simulation der Trocknungsprozesse mit COBRA-SFS wurde der transiente Modus verwendet. Hierzu wurde zunächst eine stationäre Rechnung bei 40 °C Umgebungstemperatur und unter Vernachlässigung der Nachzerfallsleistung durchgeführt. Diese Rechnung fungierte als Ausgangspunkt und soll die quasistationären Bedingungen in der Zwangskühlung repräsentieren. Basierend auf diesen Startbedingungen wurden anschließend zwei verschiedene generische Trocknungstransienten berechnet. Für die hier durchgeführten Rechnungen stellen die mit „Vakuum“ gekennzeichneten Bedingungen jeweils den Behälter unter Unterdruck dar. In COBRA-SFS wird dies durch die Vernachlässigung des konvektiven Wärmetransport angenähert. Dies soll den Kollaps der Naturkonvektion durch den reduzierten Druck abbilden. Die physikalischen Parameter, wie zum Beispiel die Wärmeleitfähigkeit, des Füllgas werden hierfür nicht geändert, da sich diese für ideale Gase in einem großen Druckbereich nur wenig ändern.

Die Bedingungen der Transienten sind jeweils in Tab. 4.1 zusammengefasst. Die erste Transiente stellt einen einfachen zweistufigen Prozess dar in welchem zuerst für 81 h Unterdruck am Behälter angelegt wird und der Behälter anschließend mit Helium befüllt wird.

Tab. 4.1 Tabellarische Beschreibung der untersuchten Trocknungsprozesse

Beschreibung der Trocknungsprozesse			
Einfacher Trocknungsprozess			
Stufe	Zeit	Gaszusammensetzung	Bedingung
1	81 h	Helium 100%	Vakuum
2	22 h	Helium 100%	Normaldruck
Mehrstufiger Trocknungsprozess			
Stufe	Zeit	Gaszusammensetzung	Bedingung
1	16 h	H ₂ O 100% (gasförmig)	Vakuum
2	30 h	H ₂ O/He 25%/75%	Vakuum
3	4 h	H ₂ O/He 10%/90%	Normaldruck
4	4 h	H ₂ O/He 10%/90%	Vakuum
5	4 h	H ₂ O/He 10%/90%	Normaldruck
6	4 h	H ₂ O/He 10%/90%	Vakuum
7	8 h	H ₂ O/He 5%/95%	Normaldruck

Die zweite Transiente stellt einen generischen mehrstufigen Prozess dar, in welchem mehrfach zwischen Unterdruck und Heliumspülung zyklert wird. Zusätzlich soll die Gaszusammensetzung realistischer dargestellt werden. Es wird zunächst von einer reinen Wasserdampfatmosfera ausgegangen. Diese weist im Vergleich zu Helium eine deutlich reduzierte Wärmeleitfähigkeit auf. Dadurch soll abgebildet werden, dass zu Beginn der Trocknung große Mengen Wasser verdampfen und so Wasserdampf den Großteil des Restgases im Behälter unter „Vakuum“-Bedingungen ausmacht. Anschließend wird der Heliumanteil stufenweise erhöht. Dies soll zum einen die langsame Zugabe von Helium während der Trocknung simulieren und zum anderen die abnehmende Feuchtigkeit im Behälter berücksichtigen. Ein solcher mehrstufiger Prozess könnte zum Beispiel angewendet werden, wenn nach einer einzelnen Vakuumtransiente die Restfeuchte im Behälter nicht unter das regulatorische Limit gefallen ist.

Das Simulationsergebnis für die maximale Hüllrohrtemperatur im generischen DWR-Behältermodell für die einfache Trocknungstransiente ist in Abb. 4.22 dargestellt. In den ersten 30 h ist ein schneller Anstieg der Hüllrohrtemperatur zu erkennen und bereits nach 20 h ist die maximale Hüllrohrtemperatur im heliumgefüllten stationären Modell

überschritten. Für die folgenden 50 h steigt die Hüllrohrtemperatur deutlich langsamer und nähert sich der maximalen Hüllrohrtemperatur im stationären Modell unter Vakuumbedingungen an. Die höchste Temperatur von 369.8 °C wird nach 81 h erreicht und liegt damit knapp unter dem deutschen technischen Limit für die Hüllrohrtemperatur. Mit dem Wechsel auf Normaldruck und der Berücksichtigung des konvektiven Wärmetransfers sinkt die Brennstabtemperatur innerhalb von 10 h rasch auf 330°C ab und nähert sich der Temperatur im stationären *best-estimate* Modell an.

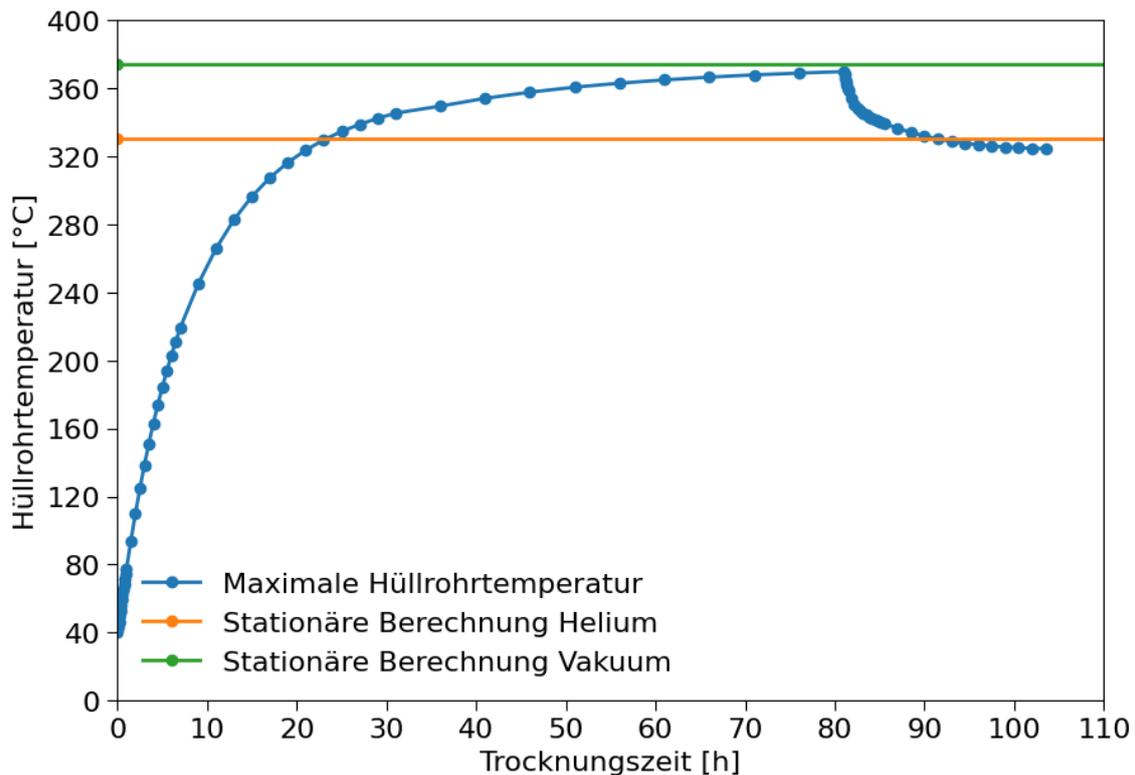


Abb. 4.22 Maximale Hüllrohrtemperatur für die einfache Trocknungstransiente in einem DWR-Behälter Szenario

Aus dem Temperaturverlauf in dieser Trocknungstransiente lässt sich eine starke Abhängigkeit der Hüllrohrtemperatur vom konvektiven Wärmetransfer vermuten. Dieser Zusammenhang wurde in Kapitel im Rahmen der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen genauer untersucht.

Abb. 4.23 zeigt die Simulation der einfachen Trocknungstransiente für das SWR-Behältermodell jeweils für den *best-estimate* und den konservativen Modellierungsansatz. Für beide Modelle zeigt sich, im Vergleich zum DWR-Modell, ein deutlich langsamerer Temperaturanstieg. So erreicht das *best-estimate* Modell unter transienten

Vakuumbedingungen die Temperatur der stationären Berechnung unter Heliumbedingungen erst nach 81 h Stunden.

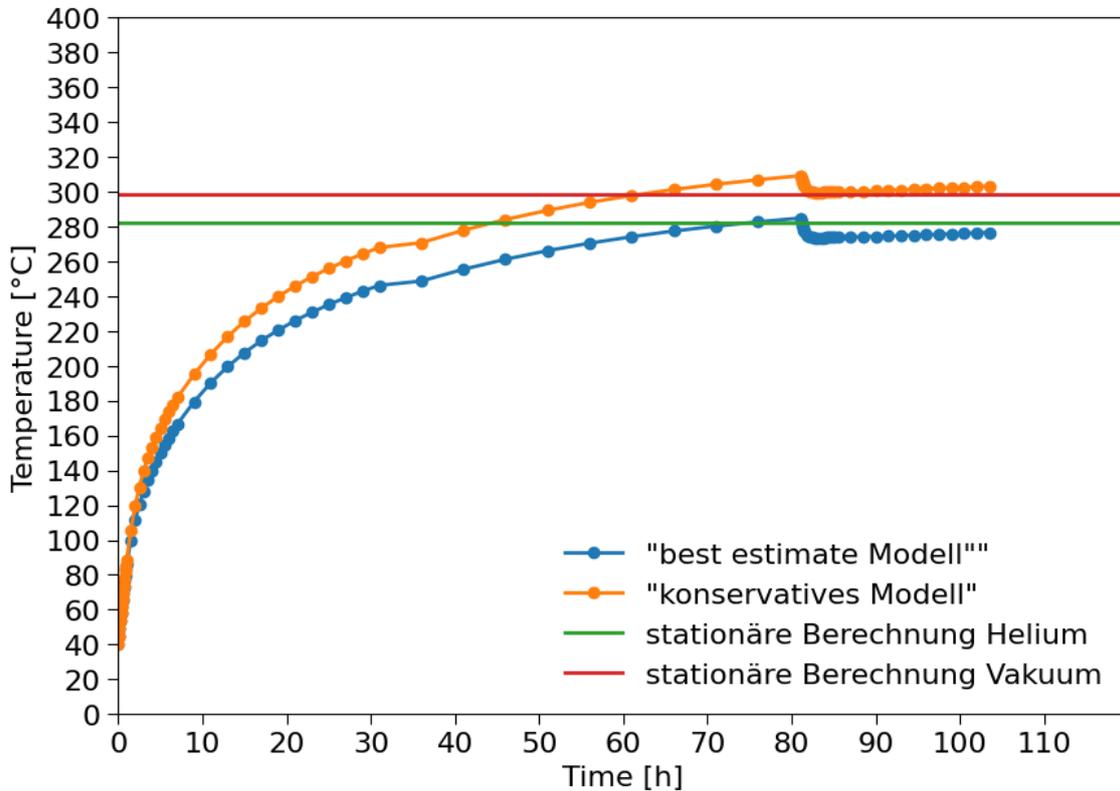


Abb. 4.23 Maximale Hüllrohrtemperatur für die einfache Trocknungstransiente in einem SWR-Behälter Szenario

Die Simulation wurde jeweils mit dem *best estimate* und dem konservativen Modellierungsansatz durchgeführt.

Die Hüllrohrtemperatur von 299 °C, welche durch die stationäre Simulation unter Vakuumbedingungen vorhergesagt wird in dieser Simulation durch das *best estimate* Modell nicht erreicht. Es ergibt sich nach 81 h lediglich eine maximale Hüllrohrtemperatur von 285 °C. Längere Simulationen haben gezeigt, dass eine Hüllrohrtemperatur von 299 °C erst nach über 120 h Trocknung erreicht werden würde. Für den konservativen Modellierungsansatz zeigt sich ein sehr ähnlicher Temperaturverlauf mit einem schnelleren Temperaturanstieg in den ersten Stunden der Trocknung. Letztlich ergibt sich so nach 81 h mit 309 °C eine knapp 25 °C höhere maximale Hüllrohrtemperatur. Insgesamt zeigt sich für die generischen SWR-Modelle ein deutlich geringerer Einfluss des konvektiven Wärmetransports auf die Hüllrohrtemperatur als für das DWR-Modell.

Der mehrstufige Trocknungsprozess wurde am Beispiel des generischen DWR-Behältermodells simuliert. Im Vergleich zur einfachen Transiente, zeigt sich hier zu Beginn ein deutlich steilerer Anstieg der Hüllrohrtemperatur. Dies kann auf den Einfluss der Behälteratmosphäre zurückgeführt werden, welche für die mehrstufige Transiente zu Beginn als 100 % Wasserdampf angenommen wird. Die Beimischung von Helium führt sofort zu einer Abkühlung der Brennstäbe und anschließend zu einem langsameren Anstieg der Brennstabtemperatur. Hier zeigt sich deutlich, dass COBRA-SFS einen signifikanten Einfluss der Behälteratmosphäre auf den Trocknungsprozess vorhersagt. Über die Details der Behältertrochnung gibt es in der freien Literatur nur wenig Informationen, weshalb die zeitliche Entwicklung der Restgaszusammensetzung im Rahmen dieses Vorhabens nur abgeschätzt werden konnte. Für genauere Simulationsergebnisse werde Detailinformationen benötigt.

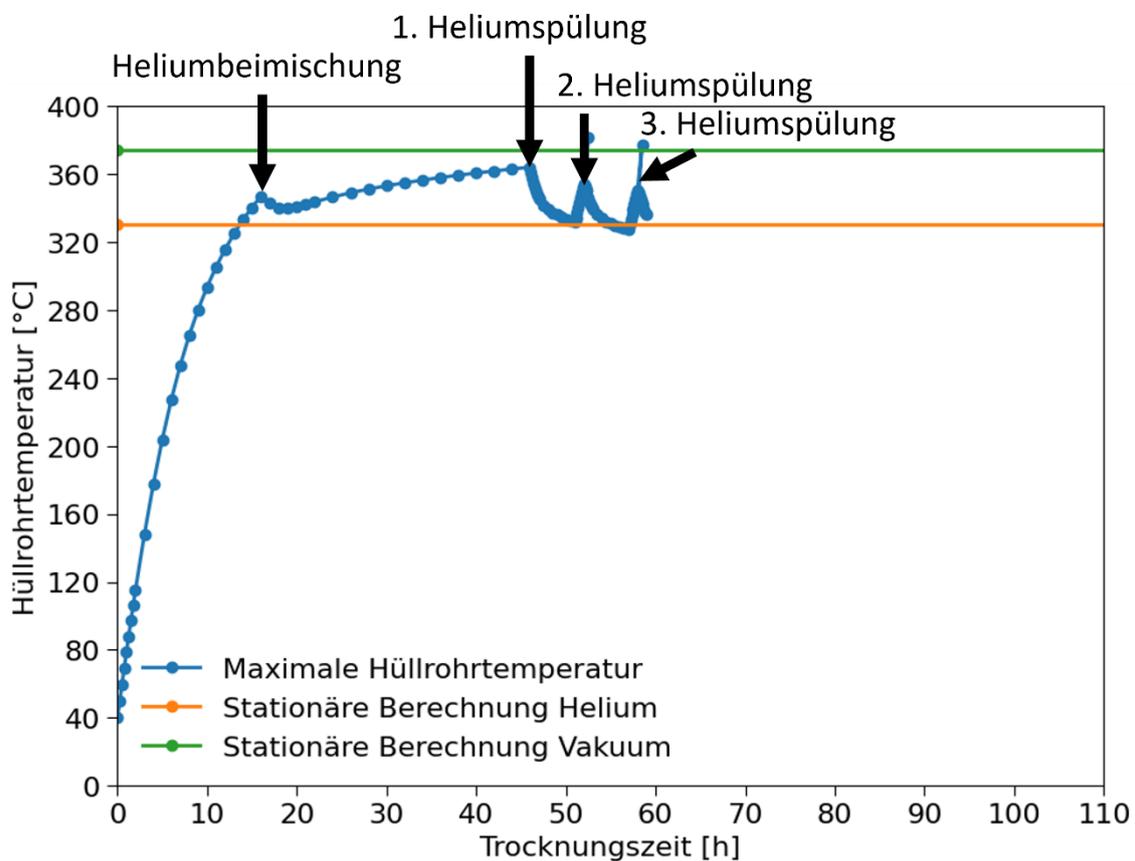


Abb. 4.24 Maximale Hüllrohrtemperatur für die mehrstufige Trocknungstransiente in einem DWR-Behälter Szenario

Insgesamt steigt die Brennstabtemperatur während der ersten Vakuumphase auf 363 °C. Die erste vollständige Heliumspülung führt zu einer raschen Abkühlung um 30 °C auf 330 °C. Die folgenden Iterationen führen zu immer geringeren Temperatur-

schwankungen, wodurch sich die Temperatur im Mittel der *best estimate* Hüllrohrtemperatur unter stationären Bedingungen annähert. Bei diesen Untersuchungen zeigte sich jedoch auch das die COBRA-SFS Simulationen für mehrstufige Transienten mit wechselnden Bedingungen zunehmen instabil werden. In Abb. 4.24 zeigt sich dies durch die Temperaturabweichungen zu Beginn jeder Heliumspülung. An diesen Punkten konnte von COBRA-SFS keine konvergierende Lösung erreicht werden. Für den SWR-Behälter waren diese Probleme noch ausgeprägter, wodurch die Simulation von zyklierenden Trocknungsprozessen auf Basis des aktuellen Modells nicht möglich war. Aus diesen Gründen müssen die hier präsentierten Ergebnisse mit Vorsicht betrachtet werden. Insgesamt zeigt sich durch diese Untersuchungen, dass sich einfache Trocknungsprozesse mit COBRA-SFS problemlos simulieren lassen. In mehrstufigen Prozessen werden die Simulationen jedoch zunehmend instabil. Zusätzlich sagt COBRA-SFS einen starken Einfluss der Behälteratmosphäre auf die maximale Hüllrohrtemperatur im Behälter vorher.

4.6 Untersuchungen zur Wasserstofflöslichkeit in Zirkonium

Die Wasserstofflöslichkeit in Zr-Legierungen wird über das Konzept der "terminalen Feststofflöslichkeit" (eng: *terminal solid solubility*, TSS) beschrieben. Hierbei wird zwischen Auflösung (*dissolution*, TSSd) und Ausscheidung (*precipitation*, TSSp) unterschieden. Die zugehörigen Löslichkeitskurven wurden in zahlreichen Publikationen experimentell über verschiedene Messverfahren bestimmt. Hierzu wurden meist Zr-Hüllrohrproben mit Wasserstoff beladen und unterschiedlichen thermischen Transienten ausgesetzt. Aus diesen Daten kann ein Zusammenhang zwischen Wasserstofflöslichkeit und Temperatur erstellt und über ein Arrhenius-Gesetz beschrieben werden kann. Im Vorgängervorhaben RS1552 BREZL-I wurde eine Datenbank dieser Literaturwerte erstellt und ausgewertet /STU 20/. Diese beruht auf den in Tab. 4.2 aufgeführten Publikationen.

Insgesamt besteht die Datenbank aus:

- mehr als 650 Datenpunkten
- 48 Versuchsreihen
- 12 Forschungsprojekten
- 7 Materialien, bestrahlt und unbestrahlt
- 5 verschiedenen Methoden

Zusätzlich zu den Messdaten wurden die Unsicherheiten der Messpunkte ebenfalls in die Datenbank aufgenommen. Hierbei wurde versucht, so wenig konservativ wie möglich vorzugehen und Fehler realistisch einzuschätzen. Die Unsicherheiten sind in den Publikationen sehr unterschiedlich dokumentiert und teilweise in absoluten oder relativen Werten angegeben. In einigen Fällen wurden auch die Autoren der Publikationen kontaktiert, um weitere Details zur Abschätzung der Messfehler zu erhalten. In Abbildung Abb. 4.25 sind die TSS Werte der Datenbank über die Temperatur aufgetragen. Die Datenpunkte sind entsprechend den Veröffentlichungen, unabhängig von den Messverfahren oder Materialien, farblich gekennzeichnet. Die Daten wurden mittels orthogonaler Regression an einen Arrhenius Gleichung gefittet. Die sich dabei ergebenden Unsicherheiten der Fits sind im Bereich von 1.96 -sigma als transparenter Bereich um die Kurven herum abgebildet.

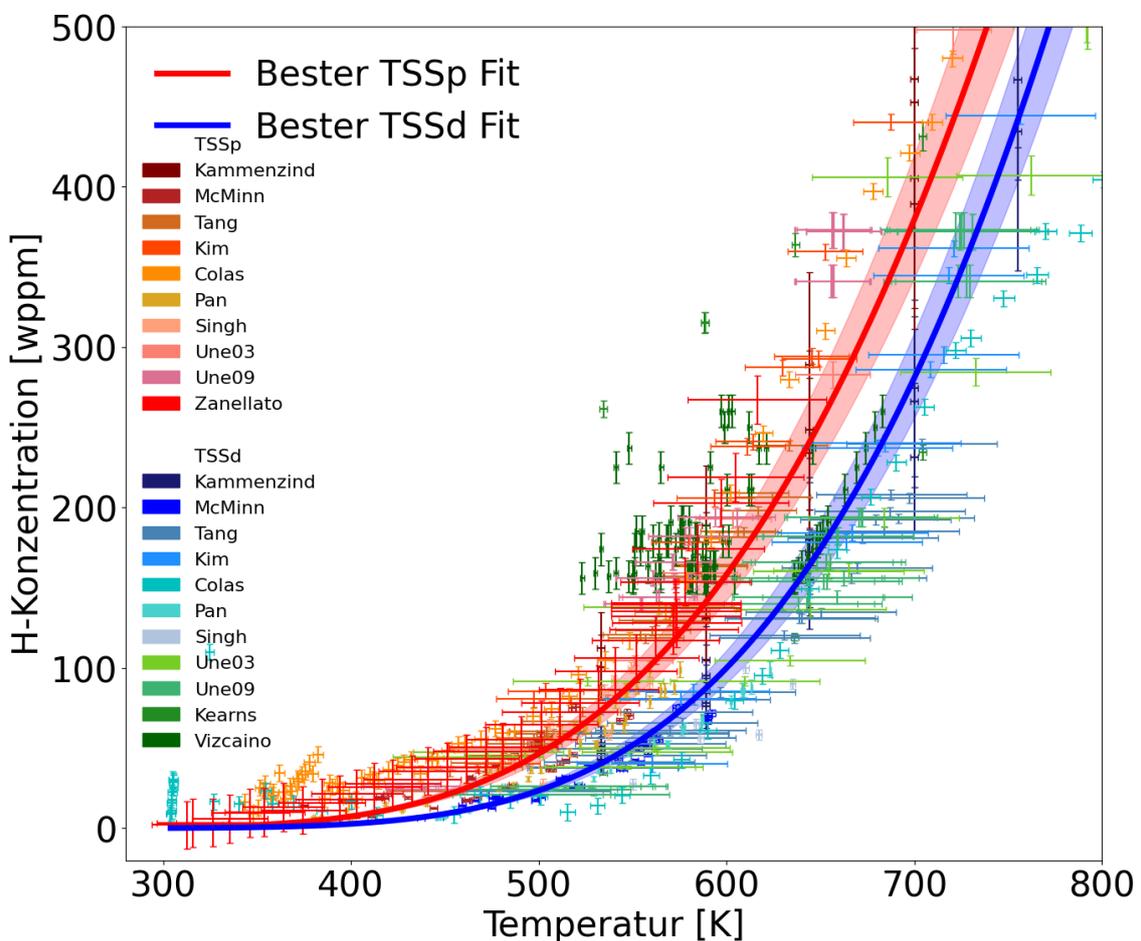


Abb. 4.25 Darstellung aller TSS Daten aus der GRS Datenbank mit Messfehlern. Eine Arrhenius-Gleichung wurde mittels orthogonaler Regression an die Daten gefittet

Es zeigt sich, dass einige der Messdaten signifikanten Unsicherheiten unterliegen und TSSd und TSSp Datenpunkte teilweise nicht klar voneinander zu trennen sind. Im Mittel sind die gefitteten TSS-Kurven jedoch mit einer Unsicherheit von 1.96-sigma klar zu unterscheiden.

Interessanterweise zeigt sich ein anderes Bild, wenn die Daten zum Beispiel nach dem Hüllrohrmaterial klassifiziert werden. Dies ist am Beispiel von Zircaloy-4 in Abb. 4.26 dargestellt. Hier sind die gefitteten Kurven der TSSd und TSSp innerhalb der $1.96\text{ }\sigma$ -Unsicherheit nicht mehr klar unterscheidbar.

Tab. 4.2 Auflistung der in der TSS-Datenbank enthaltenen Publikationen

Autor	Jahr	Material	Methode	TSS
Kearns	1967	Zr, Zry2, Try4	Diffusion	D
Kammenzind	1996	Zry-4	Diffusion	D
Pan	1996	Zr-2,5Nb	DEM	D&P
McMinn	2000	Zry-2, Zry-4	DSC	D&P
Vizcaino	2002	Zry-4	DSC	D&P
Une	2003	Zry-2, HeighFeZry	DSC	D&P
Singh	2004	Zry-2, Zr-2,5Nb	DEM	D&P
Une	2009	Zry-2	DSC	D&P
Tang	2009	M5, N18, Zry-4	DSC	D&P
Colas	2012	Zry-2	In-situ XRD	D&P
Kim	2014	Zry-4	DSC	D&P
Blackmur	2015	Zry-4	In-situ XRD	D&P

DEM: Dynamic Elastic Modulus; DSC: Differential Scanning Calorimetry; XRD: X-Ray Diffraction

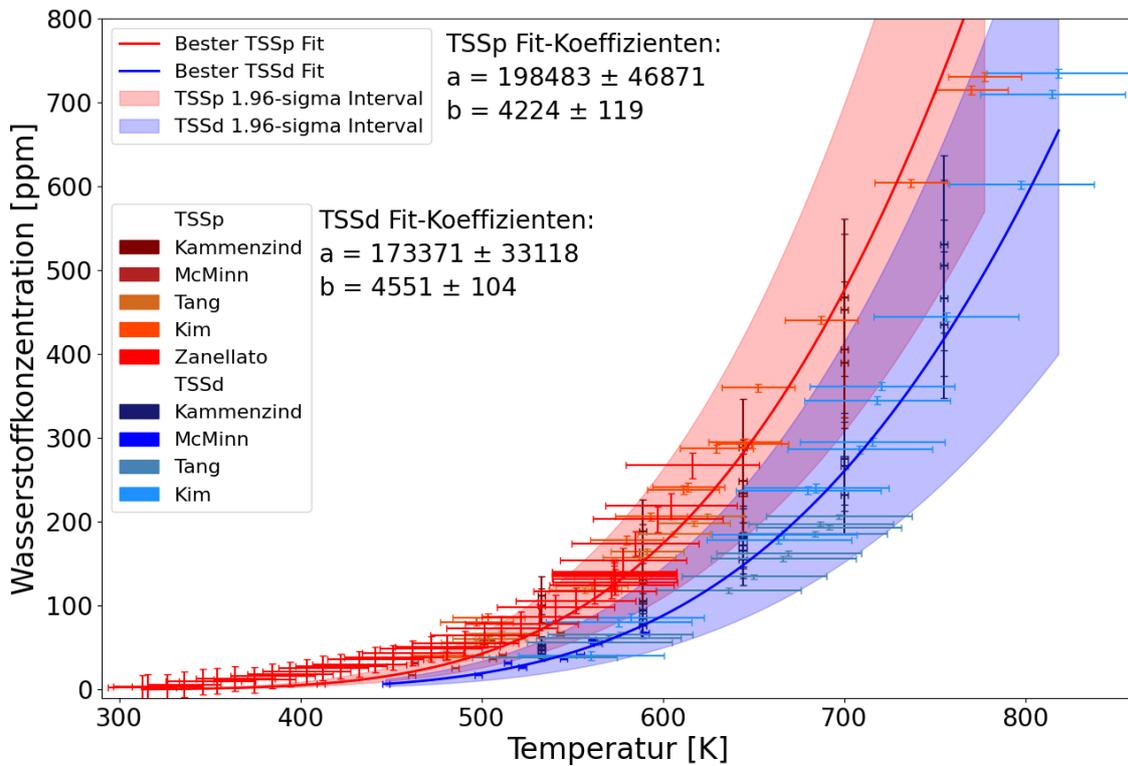


Abb. 4.26 Darstellung der besten TSSd und TSSp Fits mit den jeweiligen Unsicherheiten für Zircaloy-4

Um die Auswirkungen solcher Unsicherheiten auf die Vorhersage des Hydridverhaltens zu analysieren, wurden drei verschiedene Szenarien mit TESPА-ROD simuliert. Hierbei wurde jeweils ein Zry-4 Brennstab beladen mit 100 ppm Wasserstoff von 400°C und einem Innendruck von 145 bar mit 1 °C/Tag abgekühlt. Der Druck im Brennstab wurde während der Simulation mit der Temperatur nach der idealen Gasgleichung verringert. Als TSS-Kurven wurden jeweils das obere und untere 1.96 σ Limit sowie der beste Fit der Daten verwendet. Das Ergebnis ist in Abbildung Abb. 4.27 dargestellt. Der Einfluss der Daten verwendet. Das Ergebnis ist in Abbildung Abb. 4.27 dargestellt. Der Einfluss der TSS-Kurven zeigt sich besonders im Zeitpunkt der Hydridausscheidung.

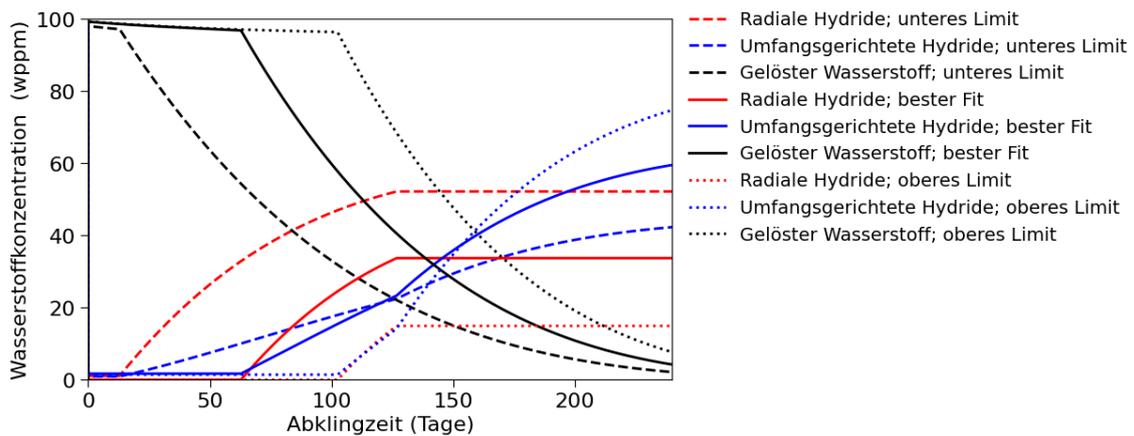


Abb. 4.27 Simulation des Hydridverhaltens mit TESPА-ROD für verschiedene TSSd und TSSp Fits

Während diese unter Anwendung des unteren Limits der TSS-Fitunsicherheit schon nach knapp 15 Tagen beginnt, beginnt diese unter Anwendung des oberen Limits erst nach knapp 100 Tagen. Durch die kontinuierliche Reduzierung des Innendrucks mit der Temperatur verändert sich die Umfangsspannung im Hüllrohr in dieser Zeit von 105 MPa auf 90 MPa. Dies verringert den Anteil an radial ausgeschiedenen Hydriden zum jeweiligen Zeitpunkt von 87,5 % auf 50 %. In dieser Untersuchung zeigt sich der Effekt der verschiedenen TSS-Fits durch eine Differenz der maximalen radialen Hydridkonzentration zum Ende der Simulation von 52 wppm und 15 wppm jeweils für das obere und untere 1.96 σ Limit. Die Konzentration radialer Hydride für dem besten Fit mit 34 wppm radialen Hydriden liegt dabei genau in der Mitte. Hieraus kann geschlossen werden, dass TESPА-ROD einen indirekten Zusammenhang der radialen Hydridkonzentration und der Fitfunktion der TSS-Kurven vorhersagt. Die Anzahl an radialen Hydriden ist ein wichtiger Faktor um potenzielle Aussagen über die Spröbruchempfindlichkeit bestrahlter Hüllrohre während der Zwischenlagerung treffen können. Diese Untersuchungen deuten daher darauf hin, dass eine genaue Kenntnis der Wasserstofflöslichkeit in Zircaloy direkt relevant für die Vorhersage radialer Hydride und damit für eine sicherheitstechnische

Bewertung des Brennstabverhaltens ist. Selektiert man die die Daten nach weiteren Kriterien so ergeben sich teils sehr verschiedene Kurvenverläufe. Dies ist in Abb. 4.28 dargestellt. Während sich für Zircaloy-2 geringere Unsicherheiten ergeben als für Zircaloy-4, ist der Kurvenverlauf deutlich flacher. Selektiert man die Daten nach der im Experiment verwendeten Analyseverfahren so zeigt, dass die Grenzen zwischen TSSd und TSSp stark verschwimmen. Besonders eindrucksvoll ist dies am Beispiel der aus den mit DSC bestimmten Daten gewonnenen Fits. In diesem Fall schneidet die TSSd sogar die TSSp Kurven aller anderen Analysemethoden.

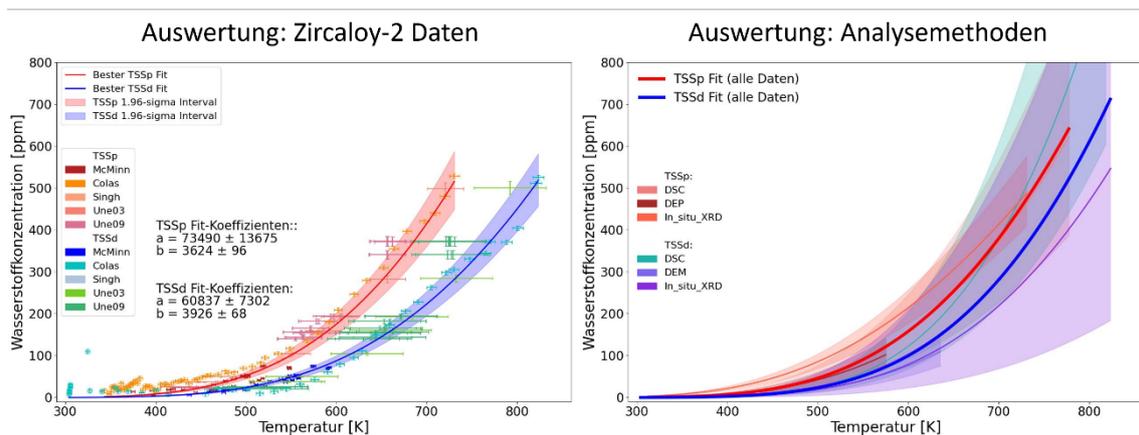


Abb. 4.28 Vergleich der TSS-Fits selektiert nach dem Hüllrohrmaterial Zircalloy-2 (links) und nach der verwendeten Analyseverfahren (rechts)

Die hier erarbeiteten Unsicherheiten der TSS-Kurven zeigen daher, dass weitere Arbeiten nötig sind um den Zeitpunkt der Hydridausscheidung sowie die Ausscheidungsgeschwindigkeit mit ausreichender Genauigkeit vorhersagen zu können. Nur so kann eine verlässlichere Beschreibung des Hydridverhaltens ermöglicht werden.

4.7 Radiale Diffusion von Wasserstoff im Hüllrohr

4.7.1 Implementierung in den TESP-ROD Code

In Zuge des Vorgängervorhabens RS1552 wurde in den TESP-ROD Code ein Diffusionsmodell für Wasserstoff in axiale Richtung, also entlang des Hüllrohrs, implementiert. In dem vorliegenden Eigenforschungsvorhaben wurde dieses Modell nun um die Wasserstoffdiffusion in radialer Richtung erweitert. Dazu wurden die Variablen die die Werte für gelösten Wasserstoff, gesamten Wasserstoff, azimuthale Hydride und radiale Hydride um jeweils eine Dimension erweitert. Dadurch ist es möglich, nicht nur einen axial (*Level*)

bezogenen Wert zu hinterlegen, sondern zur selben Zeit auch einen radialen (*Zone*) Wert. Damit diese Werte überhaupt erzeugt werden können, war es notwendig, die vorhandenen Modelle zu erweitern, sowie Neue hinzuzufügen. Dabei wurde sich an der axialen Diffusion orientiert, um die hieraus gewonnenen Erkenntnisse effizient bei der Entwicklung des radialen Diffusionsmodell zu verwenden. In diesem Zuge wurden die veränderten Modelle an einen zeitgemäßen Code-Dokumentations-Stil angepasst.

Das derzeitige Modell kann eine variable Anzahl an radialen Zonen verarbeiten, welche stets die gleiche Länge aufweisen. So wird derzeit die Gesamtdicke des Hüllrohrs durch die Anzahl der Zonen geteilt und diese Länge den einzelnen Zonen zugewiesen. Die jeweiligen Temperaturen dieser Zonen werden basierend auf den Temperaturen an der Innenseite, bzw. Außenseite des Hüllrohrs linear interpoliert. Somit ist es möglich, Konzentrations- sowie Temperaturgradienten zu berücksichtigen um eine konzentrationsgetriebene, bzw. spannungsgetriebene radiale Diffusion zu simulieren. Lediglich die spannungsgetriebene Diffusion ist derzeit noch nicht integriert, da dies ein sehr tiefes Eingreifen in den TESP-ROD Code voraussetzt.

Die Eingabe des Wasserstoffgehalts erfolgt über ein Verhältnis, welches die Verteilung des gesamten Wasserstoffs in den einzelnen Zonen widerspiegelt. Sowohl das Verhältnis als auch die Anzahl der Zonen können über das Input-File angegeben werden.

4.7.2 Radiale Diffusion in TESP-ROD anhand von Beispielen

Im Folgenden wird das Verhalten der radialen Wasserstoffdiffusion in TESP-ROD anhand von Beispielen erläutert. Hierfür wurden verschiedene Fälle betrachtet, welche auf denselben Beispielen basieren, wie jene, die für die axiale Diffusion verwendet wurden. Sie wurden so ausgewählt, dass sie jeweils einen Aspekt der radialen Diffusion beleuchten. Um die Übersicht zu gewährleisten, bauen die Beispiele aufeinander auf. So dienen die ersten beiden Beispiele (A, B) dazu, einen etwaigen Unterschied zwischen dem alten Input ohne radiale Zonen und dem neuen Input mit radialen Zonen aufzuzeigen. Die Ergebnisse wurden mit Rechnungen, einer TESP-ROD Version vor der Implementierung der radialen Diffusion, verglichen und sind deckungsgleich. Die darauffolgenden Beispiele (C-F) beleuchten die Diffusion zwischen den Zonen und den Einfluss der Löslichkeitsgrenze. Die Rechenfälle werden im jeweiligen Abschnitt näher erläutert.

4.7.2.1 Beispiel A

Um das erweiterte Diffusionsmodell zu evaluieren, wurde ein Fall simuliert, welcher bereits bei der axialen Diffusion verwendet wurde. Hierbei wurde das Hüllrohr in vier axiale Level eingeteilt. Die Bedingungen, die für jedes axiale Level gelten sind in Tab. 4.2 einsehbar.

Tab. 4.2 Startbedingungen für die Beispielrechnung: Beispiel A

Level	1	2	3	4
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	250	250	250	250
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	406	396	386	376
Länge der Level (m)	0,15	0,15	0,15	0,15
Zonen	Keine			

Das Ergebnis ist das gleiche, welches bereits im GRS-Bericht 554 vorgestellt wurde. An dieser Stelle dient das Beispiel lediglich zur Verifizierung des Codes, da dieser seine Funktionalität auch bei Inputs behalten soll, die keine zusätzliche Einteilung in radiale Zonen besitzen. Zum allgemeinen Verständnis sei an dieser Stelle das Ergebnis noch einmal anhand von Abb. 4.29 erläutert. Der Plot beginnt links oben mit dem ersten axialen Level. Hierbei fällt auf, dass die Gesamtmenge an Wasserstoff, welche durch die rotgestrichelte Linie, verdeutlicht wird, zu Beginn über dem gelösten Wasserstoff (blaue Linie) liegt. Diese Diskrepanz lässt sich durch die grüne Linie erklären, welche die im Hüllrohr vorhandenen Hydride anzeigt. Zu Beginn der Rechnung wird die Löslichkeitsgrenze des Hüllrohrabschnitts überschritten, was dazu führt, dass gelöster Wasserstoff in Form von Hydriden ausfällt. Da ebenso wie die Konzentration auch die Temperatur eine Triebkraft der Wasserstoffdiffusion ist, wandert der Wasserstoff zu den kälteren Hüllrohrabschnitten ab. Dies führt dazu, dass die Löslichkeitsgrenze mit der Zeit unterschritten wird, wodurch der vorhandene Wasserstoff vollständig in Lösung geht und sich die Werte von gesamtem und gelöstem Wasserstoff angleichen. Im zweiten Level (rechts oben) ist anfangs ein leichter Zuwachs an Wasserstoff zu sehen, welcher durch die Diffusion von Level 1 zu erklären ist. Dies führt dazu, dass die Löslichkeitsgrenze deutlich länger überschritten ist und es zur zusätzlichen Ausbildung von Hydriden kommt. Letztendlich wird aber auch in Level 2 die Löslichkeitsgrenze unterschritten, da der Wasserstoff in den kälteren Bereich von Level 3 abwandert.

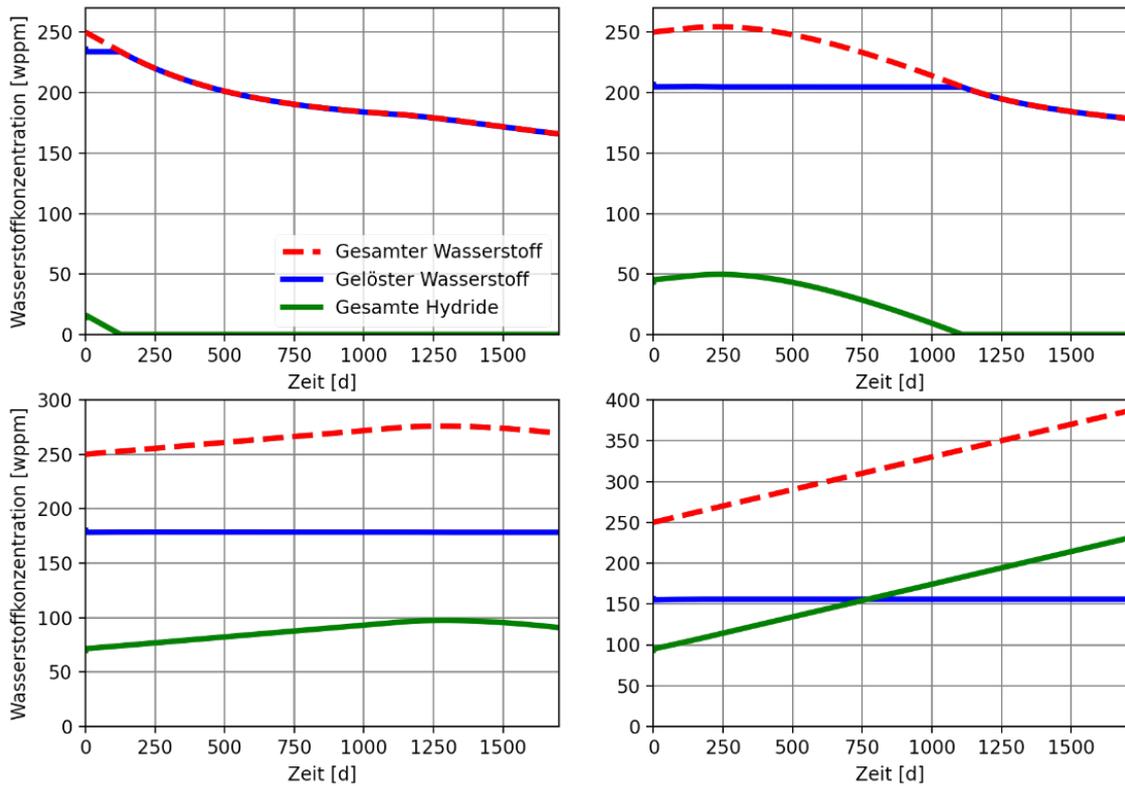


Abb. 4.29 Axiale Wasserstoffverteilung des Beispiels A, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)

In Level 3 (links unten) wiederum, kommt es fast ausschließlich zu einem Anwachsen des Wasserstoffgehalts. Lediglich im letzten Viertel des Plots wird deutlich, dass auch der Wasserstoff von Level 3 stetig in den noch kälteren Bereich des Hüllrohrs (Level 4) diffundiert. Der Plot zu Level 4 (rechts unten) zeigt einen stetigen Anstieg des Gesamtwertes an Wasserstoff. Hierbei handelt es sich um den kältesten Abschnitt des Hüllrohrs, weswegen in diesen Bereich, stetig Wasserstoff aus den anderen Abschnitten, diffundiert. Der Teil an gelösten Wasserstoff bleibt dabei immer gleich, da sich der Anteil des Wasserstoffs in Level 4 stetig über der Löslichkeitsgrenze befindet, was dazu führt, dass der Wasserstoff, der in diesen Abschnitt diffundiert als Hydrid ausfällt.

4.7.2.2 Beispiel B

In diesem Beispiel wurde ebenfalls ein Eingabedatensatz verwendet, welcher zuvor bei der Überprüfung des axialen Diffusionsmodells zum Einsatz kam, und kann in Tab. 4.3 eingesehen werden. Jedoch wurde hier der Input so modifiziert, dass Angaben zur Anzahl der radialen Zonen gemacht wurden. Zur Evaluierung wurde lediglich eine Zone

angeben. Damit sollte sich das Ergebnis nicht von dem des ursprünglichen Inputs unterscheiden.

Tab. 4.3 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel B

Level	1	2	3	4
Zonen	1			
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	400	0	0	0
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	400	400	400	400
Länge der Level (m)	0,15	0,15	0,15	0,15

In Abb. 4.30 ist das Ergebnis des Rechenbeispiels B gezeigt. Auch diese Plots weisen keinen Unterschied zu den bekannten aus dem GRS-Bericht 554 auf. Dies bedeutet, dass die Implementierung des radialen Diffusionsmodells die axiale Diffusion nicht beeinträchtigt und daher keinen Einfluss auf die bisherige Funktionsfähigkeit von TESPA-ROD hat. Der für die Rechnung vorgesehene Input kann sowohl ohne Angabe als auch mit Angabe einer radialen Zone eingelesen werden, ohne dass dies zu einem unterschiedlichen Ergebnis führt. In dem gezeigten Beispiel wurde im Gegensatz zum Beispiel 4 kein Temperaturunterschied zwischen den verschiedenen Leveln angegeben. Jedoch herrscht hier ein Ungleichgewicht bei der Wasserstoffverteilung welches zu einer konzentrationsgetriebenen Wasserstoffdiffusion führt.

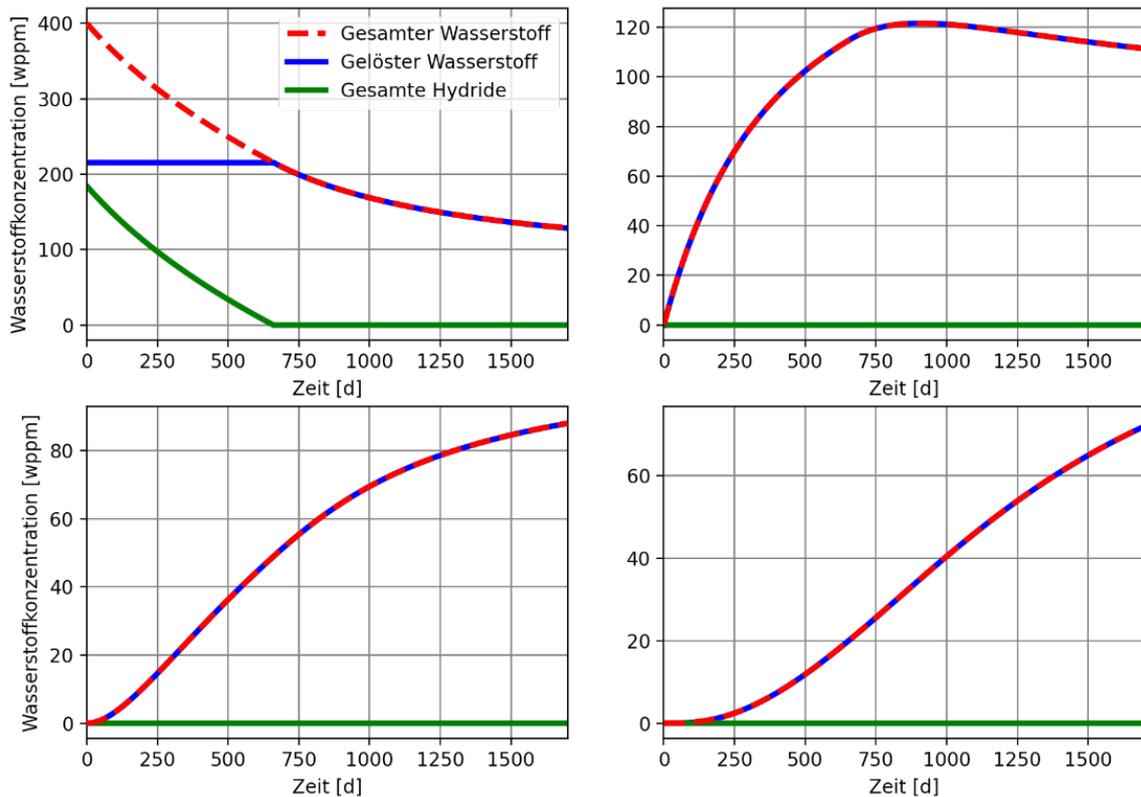


Abb. 4.30 Axiale Wasserstoffverteilung des Beispiels B, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)

Somit diffundiert der Wasserstoff, welcher sich zu Beginn der Rechnung ausschließlich in Level 1 befindet in die anderen Abschnitte des Hüllrohrs. In Abb. 4.30 links oben ist das Level 1 gezeigt. Zu Beginn ist die Löslichkeitsgrenze in diesen Abschnitt überschritten, was dazu führt, dass sich dort neben gelöstem Wasserstoff auch Hydride befinden. Da bedingt durch die Konzentration der Wasserstoff aber in die anderen Level diffundiert, wird der Wasserstoffgehalt in diesem Bereich geringer, was wiederum zu einem Auflösen der Hydride führt. Bis nach etwa 700 Tagen keine Hydride mehr vorhanden sind. Des Weiteren lässt sich beobachten, wie der Wasserstoff durch die einzelnen Bereiche wandert, bis zu Level 4 (rechts unten). Dabei dauert der Anstieg des Wasserstoffs von Level zu Level länger, weil jeweils erst das vorherige Level mit Wasserstoff versorgt werden muss. Letztendlich gleichen sich aber alle Level einem Wasserstoffgehalt an, da es in diesem Beispiel, zusätzlich zur Konzentration, keine Triebkraft für die Diffusion gibt.

4.7.2.3 Beispiel C

Das Beispiel C basiert auf dem Beispiel A, jedoch wurden hier zusätzlich drei radiale Zonen eingefügt. Die 250 wppm Wasserstoff wurden gleichmäßig über alle Zonen verteilt. Dies führt dazu, dass die Löslichkeitsgrenze in diesem Beispiel nicht überschritten wird, weswegen sich keine Hydride bilden. Dieses Beispiel zeigt, dass durch das Einführen von radialen Zonen auch der Wasserstoffgehalt in jeder Zone dementsprechend angepasst werden muss. Dies ist notwendig, da der Wasserstoff in wppm angegeben wird und nicht in einer Gesamtmenge. Die genauen Startbedingungen können in Tab. 4.4 eingesehen werden. Desweiteren wurde von einer geringen Wärmeleistung des Brennstoffes ausgegangen. Dadurch entsteht ein Temperaturgradient über die drei radialen Hüllrohrzonen. Wodurch die temperaturgetriebene Diffusion nicht nur axial zwischen den Leveln, sondern auch radial zwischen den Zonen stattfindet. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.31 und Abb. 4.32 einzusehen. In Abb. 4.31 sind die verschiedenen Hüllrohrabschnitte nach aufsteigendem Level gezeigt. Beginnend mit dem Level 1 links oben und endend mit dem Level 4 rechts unten. In allen Abschnitten sind, wie erwähnt, keine Hydride vorhanden. Der sonstige Verlauf ähnelt dem aus Beispiel A (siehe Abb. 4.29) da auch dieses Beispiel einen Temperaturgradienten über die Hüllrohrabschnitte hat. Der Wasserstoff diffundiert aus Level 1 richtung Level 4. Wodurch es zu einem Verlust des Wasserstoffgehalts in Level 1 kommt. In Level 2 zeigt sich ein kurzfristiger Zuwachs, aber insgesamt eine Abnahme. In Level 3 ist eine Zunahme zu erkennen, die mit der Zeit abflacht. Eine Abnahme ist hier nicht zu erkennen, was vermutlich an der zu kurzen Rechenzeit von etwa 1750 Tagen liegt. Level 4 ist der kälteste Abschnitt und erfährt dadurch auch den größten Zuwachs.

Tab. 4.4 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel C

Level	1			2			3			4		
Länge der Level (m)	0,15			0,15			0,15			0,15		
Zonen	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Wasserstoff-Gehalt zu Beginn (wppm)	83	83	83	83	83	83	83	83	83	83	83	83
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	407	406,5	406	397	396,5	396	387	386,5	386	377	376,5	376

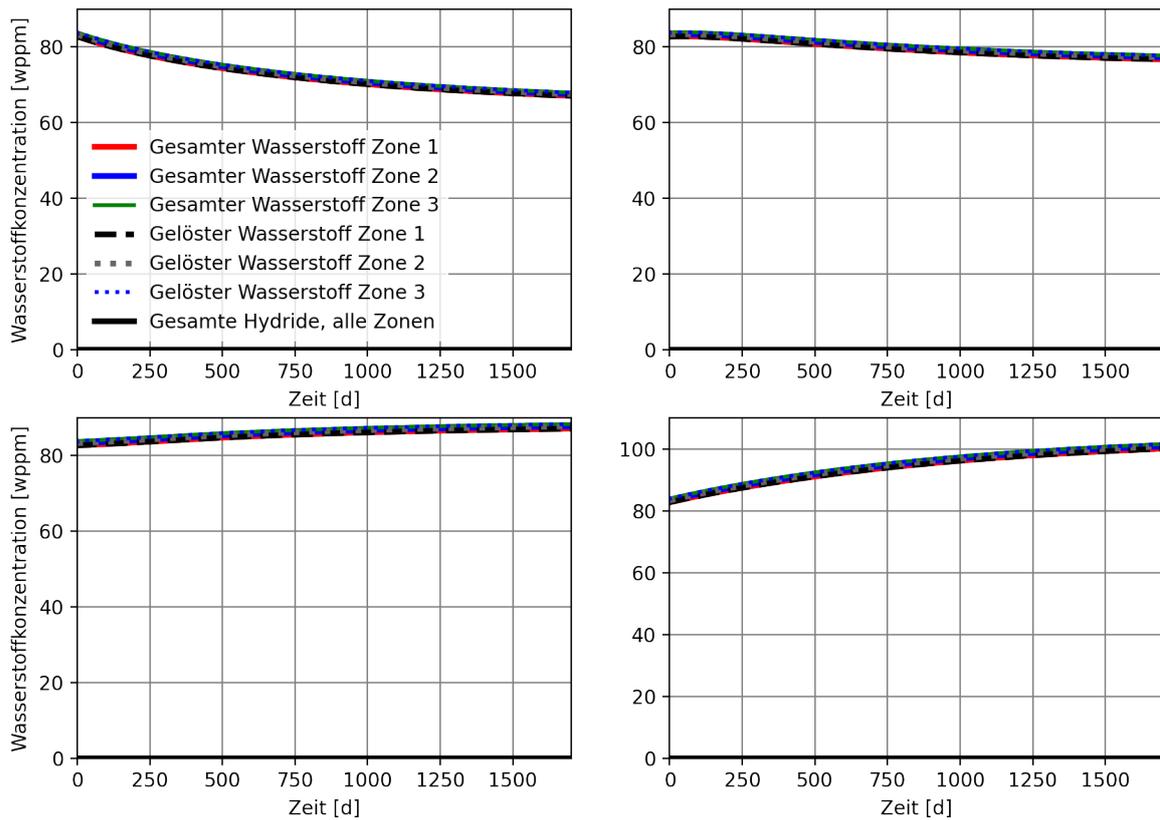


Abb. 4.31 Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels C, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)

Die insgesamt flacheren Verläufe der Kurven im Vergleich zu Beispiel A lassen sich dadurch erklären, dass es in diesem Fall, wie erwähnt, nicht zur Hydridbildung kommt. Dadurch kommt es zu einem Ungleichgewicht im gelösten Wasserstoff, zwischen den einzelnen Leveln. Dieses Ungleichgewicht oder auch Konzentrationsdifferenz führt zu einer konzentrationsgetriebenen Diffusion. Diese wirkt wiederum der temperaturgetriebenen Diffusion entgegen und verlangsamt somit die Wasserstoffdiffusion in Richtung Level 4, was zu einem abflachen der Kurven führt.

Da mit dem Einführen der Zonen deutlich mehr Parameter berechnet werden und die Übersicht darunter leidet, werden weitere zu beobachtenden Phänomene an einem Ausschnitt aus Level 1 in Abb. 4.32 erklärt.

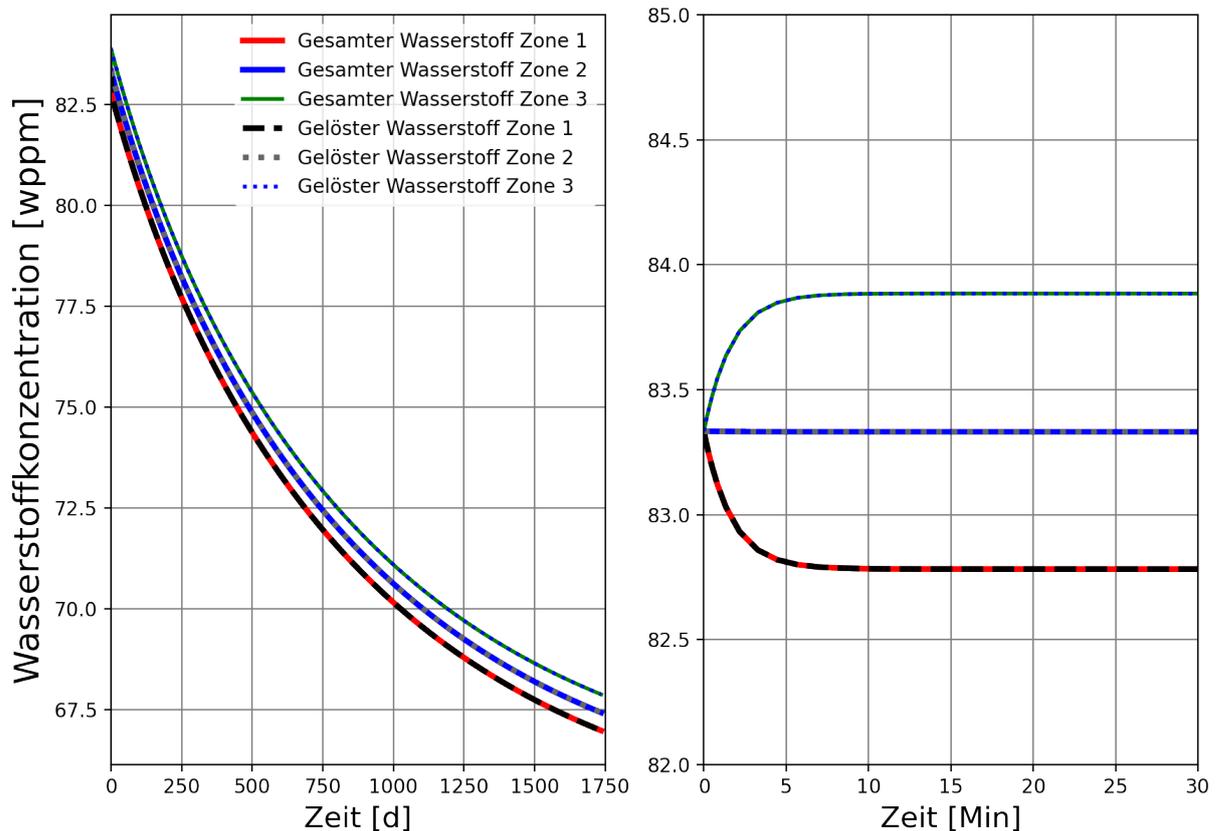


Abb. 4.32 Zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels C in Level 1

Links: Menge an Wasserstoff innerhalb der einzelnen Zonen. Rechts: Änderung der Wasserstoff Verteilung innerhalb der ersten 30 Minuten.

Auf der linken Seite in Abb. 4.32 ist der gelöste und der gesamte Wasserstoff über den kompletten Zeitraum von etwa 1750 Tagen gezeigt. Bereits in dieser Darstellung fällt auf, dass die einzelnen Zonen nicht, wie vielleicht in Abb. 4.31 angenommen, deckungsgleich sind. Zusätzlich driften sie sogar mit zunehmender Zeit weiter auseinander. Im rechten Diagramm ist zu sehen, dass nur zum Zeitpunkt Null alle Zonen denselben Wasserstoffgehalt aufweisen. Der Unterschied ist dadurch zu erklären, dass sich durch die geringe Wärmeleistung des Brennstoffs ein Temperaturgradient in radialer Richtung innerhalb des Hüllrohrs ausbildet. Dieser führt dazu, dass es auch hier zu einer temperaturgetriebenen Diffusion kommt. Da das Hüllrohr eine Gesamtdicke von 0,7265 mm hat sind die zu überwindenden Distanzen deutlich geringer als in axialer Richtung, wodurch die Diffusion deutlich schneller stattfindet, in diesem Beispiel innerhalb von etwa acht Minuten. Dass die einzelnen Zonen mit der Zeit weiter auseinanderdriften, liegt daran, dass jede Zone mit der benachbarten Zone sowohl in axialer als auch in radial Richtung interagieren kann. Dadurch kommt es zu unterschiedlichen Geschwindigkeiten, in denen

der Wasserstoff aus den einzelnen Zonen in die jeweiligen Zonen des nächstgelegenen kälteren axialen Abschnitts (in diesem Fall Level 2) diffundiert.

4.7.2.4 Beispiel D

Dieses Beispiel basiert auf demselben Input wie Beispiel C, jedoch wurde hier der Wasserstoffgehalt nicht über 3 Zonen verteilt, sondern es wurde mit einem Startwert von 250 wppm in Zone 1 gerechnet. Die gewählten Startbedingungen sind in Tab. 4.5 aufgelistet. Das Ergebnis dieser Kalkulation kann in Abb. 4.33 und in Abb. 4.34 eingesehen werden. In Abb. 4.33 sind die verschiedenen Hüllrohr Abschnitte nach aufsteigendem Level gezeigt. Beginnend mit dem Level 1 links oben und endend mit dem Level 4 rechts unten. Der übersichtshalber sind alle Hydride aufaddiert in den Graphen eingezeichnet. In diesem Beispiel wird in der radialen Zone 1 die Löslichkeitsgrenze überschritten, wesswegen es zur Hydridbildung in dieser Zone kommt. Dies geht aus der detaillierten Übersicht in Abb. 4.34 rechts, hervor. Durch die geringe Distanz zwischen zwei Zonen, kann der Wasserstoff schnell zwischen diesen diffundieren. Das führt dazu, dass es zu einem schnellen Abfallen des Wasserstoffgehalts in Zone 1 kommt. Dadurch wird die Löslichkeitsgrenze unterschritten und alle Hydride dieser Zone gehen in Lösung. Durch die konzentrationsgetriebene Diffusion kommt es innerhalb von etwa 10 Minuten zu einem ausgleich Zwischen den einzelnen Zonen. Wobei sich die Zonen jedoch durch den gegebenen Temperaturunterschied und die dadurch temperaturgetriebene Diffusion, niemals vollständig angleichen, wie bereits in Beispiel C gezeigt.

Tab. 4.5 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel D

Level	1			2			3			4		
Länge der Level (m)	0,15			0,15			0,15			0,15		
Zonen	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	250	0	0	250	0	0	250	0	0	250	0	0
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	407	406,5	406	397	396,5	396	387	386,5	386	377	376,5	376

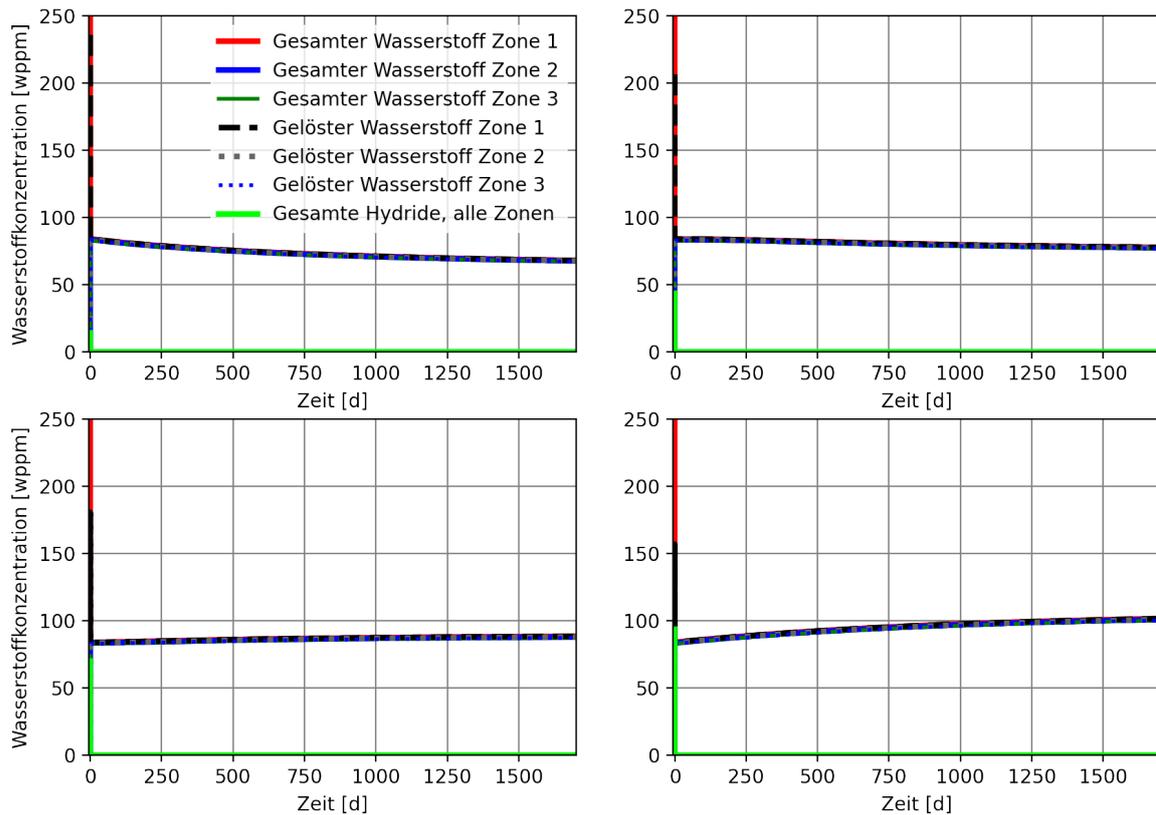


Abb. 4.33 Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels D, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)

Da die Diffusion in radialer Richtung, aufgrund der kürzeren Distanz, deutlich schneller von statten geht, ist das Ergebnis von Level 1 in Abb. 4.34 in einer höheren zeitlichen Auflösung gezeigt. Hierbei ist auf der rechten Seite gezeigt, wie sich der Wasserstoffgehalt in diesem Hüllrohrabschnitt innerhalb der ersten 30 Minuten verändert. Dieser Plot stützt die Aussagen, die bezüglich der zonalen Diffusion getroffen wurden, wie etwa der schnelle Ausgleich oder das rasche Auflösen der Hydride. Auf der linken Seite hingegen sind alle Zonen des ersten Levels gemittelt. Dies dient zur Überprüfung der Funktionen des TESP-ROD Codes, die die Auflösung und Bildung von Hydriden steuern, da sich die Gesamtmenge an Wasserstoff während des Vorgangs nicht ändern darf. Der gesamte Wasserstoff ist durch eine rote Linie gekennzeichnet und diese bleibt, wie gefordert, während des Lösevorgangs auf einem Niveau. Die Abnahme über einen längeren Zeitraum verdeutlicht das Diffundieren in anderen Hüllrohr Abschnitte. Im Folgenden werden Beispiele gezeigt, bei denen nur ein axiales Level vorhanden war, wodurch die Gesamtmenge an Wasserstoff über die ganze Rechenzeit konstant blieb.

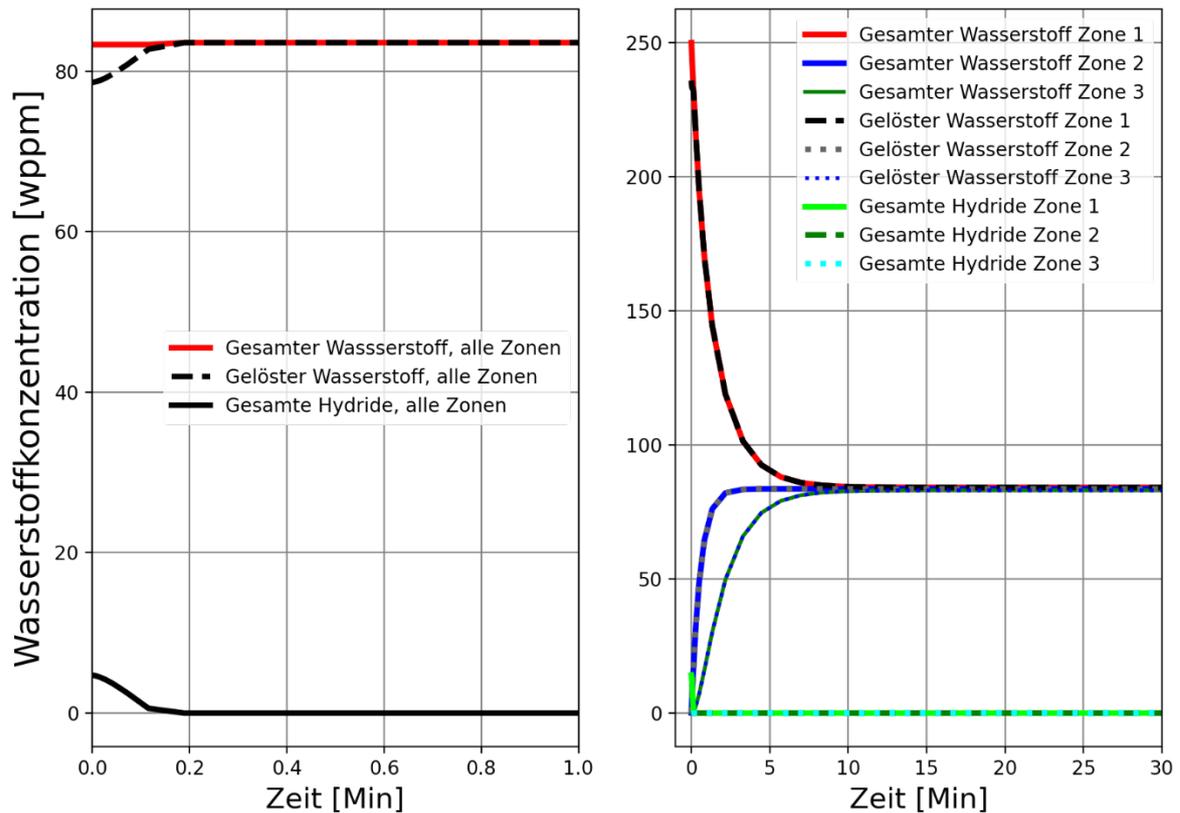


Abb. 4.34 Zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels D in Level 1

Links: Menge an Wasserstoff über alle Zonen gemittelt. Rechts: Änderung der Wasserstoff Verteilung innerhalb der ersten 30 Minuten.

4.7.2.5 Beispiel E

Dieses Beispiel basiert auf den selbem Input wie Beispiel D jedoch wurde der TESPA-ROD Code so modifiziert, dass speziell definierte Fälle betrachtet werden können. Für das folgende Beispiel wurde die Löslichkeitsgrenze, welche im Normalfall temperaturabhängig ist, auf einen festen Wert von 400 wppm gesetzt. Des Weiteren werden 1200 wppm Wasserstoff in Zone 1 angenommen. Es wurde nur mit einem axialen Level gerechnet da dies für die gezeigten Fälle ausreichend ist und die Graphen nicht unnötig verkompliziert. Die Starbedingungen sind in Tab. 4.6 eingetragen. Die Ergebnisse dieses Beispiels sind in Abb. 4.35, Abb. 4.36 und in Abb. 4.37 gezeigt. Abb. 4.35 zeigt hierbei den Verlauf über die komplette Rechenzeit von etwa 1750 Tagen. Wie bereits in Beispiel D erwähnt, kommt es hier zu keinem Abfall der Gesamtmenge an Wasserstoff, über die Zeit. Dies wird auch in Abb. 4.37 deutlich in der alle radialen Zonen aufaddiert wurden und dadurch bedingt, dass der Wasserstoff nicht axial abwandern kann.

Tab. 4.6 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel E

Level	1		
Länge des Levels (m)	0,15		
Zonen	1	2	3
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	1200	0	0
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	407	406,5	406

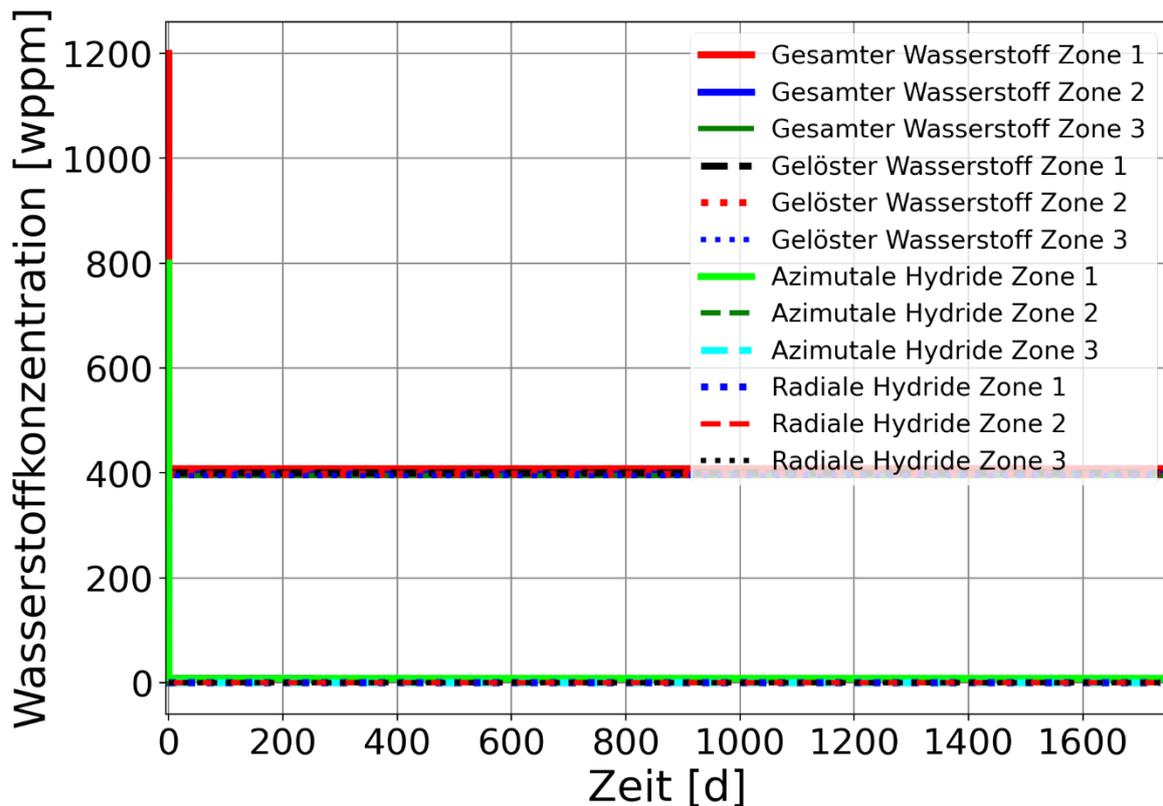


Abb. 4.35 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E

Da die Distanzen zwischen den einzelnen Zonen wesentlich kleiner sind als zwischen den axialen Abschnitten wird ein Gleichgewichtszustand deutlich schneller erreicht, weswegen Abb. 4.36 ein besseres Bild vermittelt, wie dieser Zustand erreicht wird. Hier ist zu sehen, dass zu Beginn azimutale Hydride in Zone 1 vorhanden sind. Dies ist verständlich, da mit 1200 wppm die festgelegte Löslichkeitsgrenze von 400 wppm weit überschritten wird. Die Menge an gelöstem Wasserstoff befindet sich wie erwartet bei 400 wppm. Dieser diffundiert über die Zeit und über Zone 2 in Zone 3 was sich durch den Anstieg in Zone 2 (blau-rote Linie) und den leicht verzögerten Anstieg in Zone 3 (grün-blaue Linie) bemerkbar macht. Durch die Diffusion in die anderen Zonen sinkt die

Menge an gelösten Wasserstoff in der ersten Zone (schwarz-gestichelte Linie) was dazu führt, dass die Hydride in der ersten Zone in Lösung gehen, da sonst der Anteil an gelösten Wasserstoff den Wert von 400 wppm (Löslichkeitsgrenze) unterschreiten würde. Dadurch sinkt der Anteil an Hydriden (hellgrüne Linie) in der ersten Zone, während der Anteil an gelösten Wasserstoff, trotz des Diffundierens, in Zone 2, konstant bleibt. Da sich die Gesamtmenge an Wasserstoff aus dem gelösten Wasserstoff und den Hydriden zusammensetzt, nimmt auch dieser ab, wie anhand der roten Linie ersichtlich ist. Ein vollständiger Ausgleich zwischen den 3 radialen Zonen wird nach etwa 20 bis 25 Minuten erreicht.

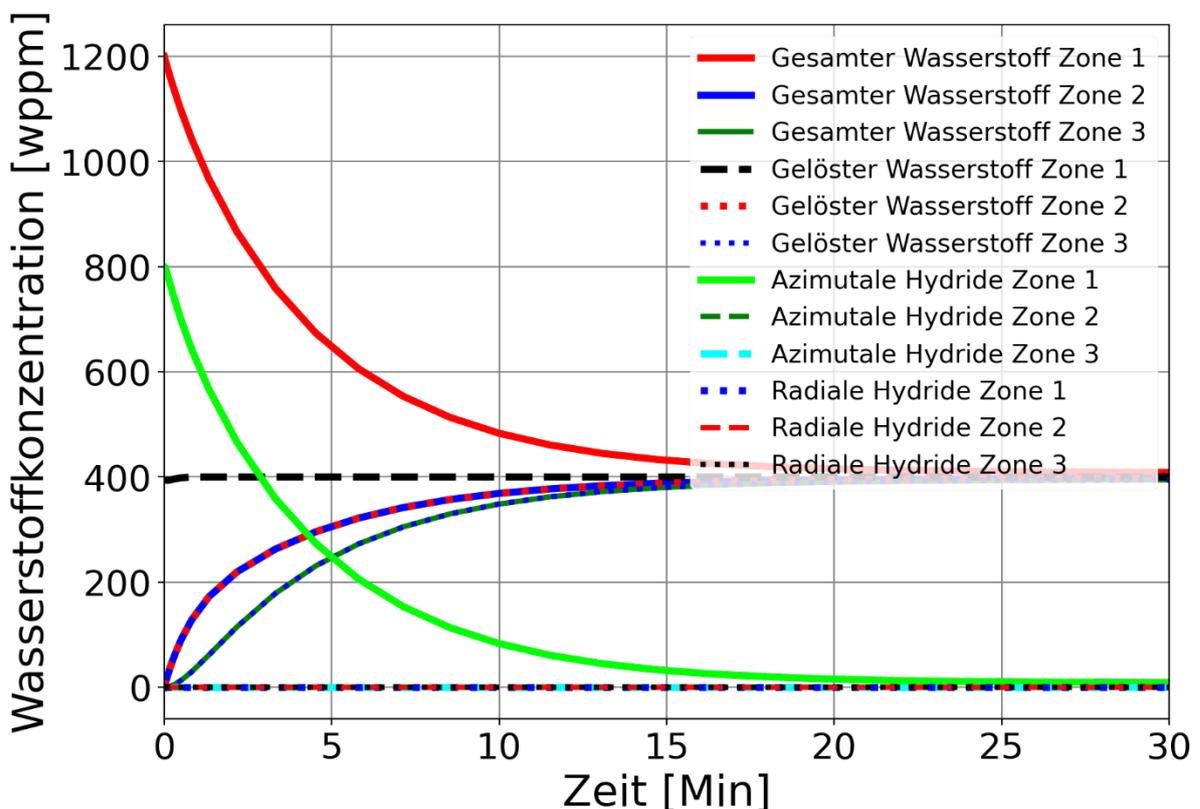


Abb. 4.36 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E für einen Zeitraum von 30 Minuten

In Abb. 4.37 wurden die 3 Zonen gemittelt, um eine bessere Übersicht zu gewährleisten. Zu beachten ist dabei, dass die Gesamtmenge an Wasserstoff unverändert bleibt, was ein Indikator dafür ist, dass das radiale Diffusionsmodell ordnungsgemäß funktioniert. Des Weiteren ist erkenntlich, dass der gelöste Wasserstoff (schwarze Linie) im gleichen Verhältnis steigt, in dem die azimuthalen Hydride (blaue Linie) abnehmen. Diese Plausibilität spricht für die Korrektheit des in den Code eingebauten Modells. Radiale Hydride

werden nicht ausgebildet, da diese eine Spannung im Hüllrohr voraussetzen, die bei diesem Beispiel nicht erreicht wurden.

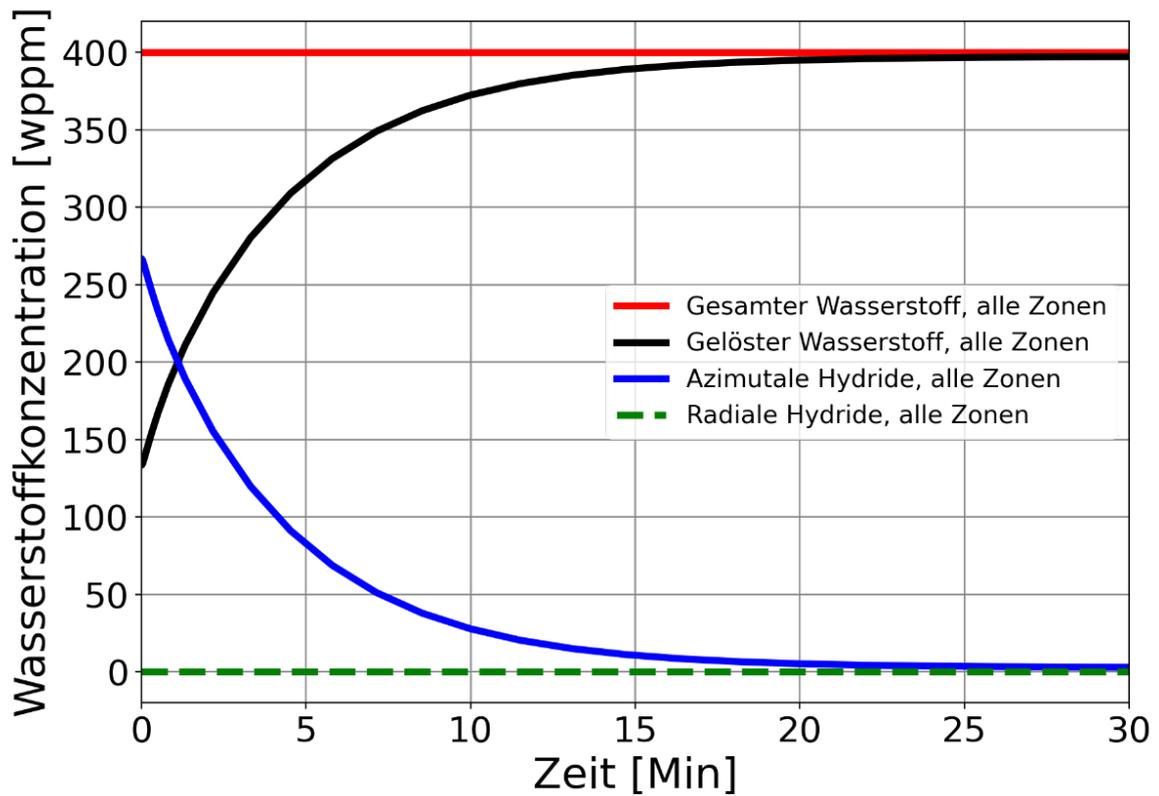


Abb. 4.37 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E für einen Zeitraum von 30 Minuten gemittelt über alle radialen Zonen

4.7.2.6 Beispiel F

Beispiel F basiert auf denselben Annahmen, die in Beispiel E gemacht wurden. Jedoch wurde der Startwert für den Wasserstoff in Zone 1 von 1200 wppm auf 1500 wppm erhöht. Die Starbedingungen sind in Tab. 4.7 eingetragen. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.38 und Abb. 4.39 einsehbar. Abb. 4.38 zeigt hierbei die volle Rechenzeit von etwa 1750 Tagen. Es zeigt sich, dass im Gegensatz zum Beispiel E (Abb. 4.35) die azimuthalen Hydride in Zone 1 nicht verschwinden. Dies liegt daran, dass in diesem Beispiel mehr Wasserstoff vorhanden ist als bedingt durch die Löslichkeitsgrenze von 400 wppm, in Lösung gehen kann. Dadurch bleibt ein Überschuss von etwa 300 wppm, der sich als Hydrid niederschlägt. Was die hellgrüne Linie bestätigt. Diese befindet sich auf 300 wppm und die Gesamtmenge an Wasserstoff für diese Zone (rote Linie) bei 700 wppm.

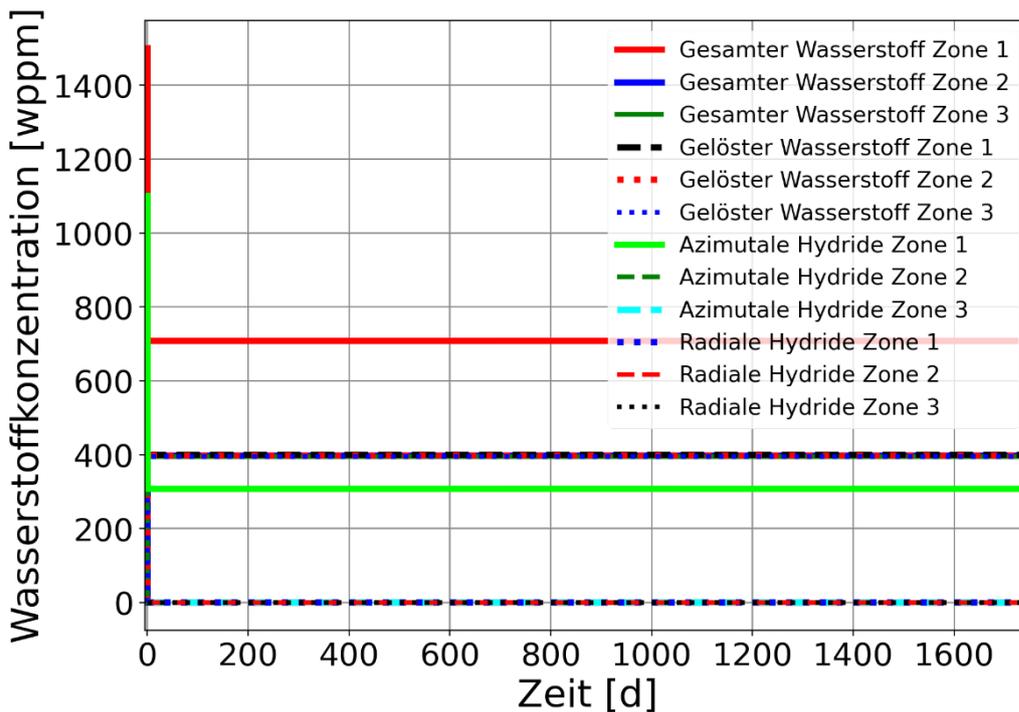


Abb. 4.38 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel F

In Abb. 4.39 ist besser ersichtlich, was im Detail vor sich geht, da diese Abbildung den Zeitraum besser auflöst, in der der Großteil der Diffusion zwischen den radialen Zonen abläuft. Zu Beginn diffundiert der Wasserstoff, ebenso wie in Beispiel E, in die Zone 2 und anschließend in die Zone 3. Wodurch azimutales Hydrid in Zone 1 in Lösung geht. Das Lösen hält so lange an, bis nach etwa 15 bis 20 Minuten ein Ausgleich zwischen den einzelnen Zonen stattgefunden hat. Durch den Ausgleich findet kein konzentrationsgetriebenes Diffundieren mehr statt, weswegen die Menge an gelösten Wasserstoff in den Zonen gleichbleibt und kein Hydrid mehr in Lösung gehen muss, um den Verlust von gelöstem Wasserstoff in dieser Zone auszugleichen.

Tab. 4.7 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel F

Level	1		
Länge des Levels (m)	0,15		
Zonen	1	2	3
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	1500	0	0
Konstante Hüllrohrtemperatur (°C)	407	406,5	406

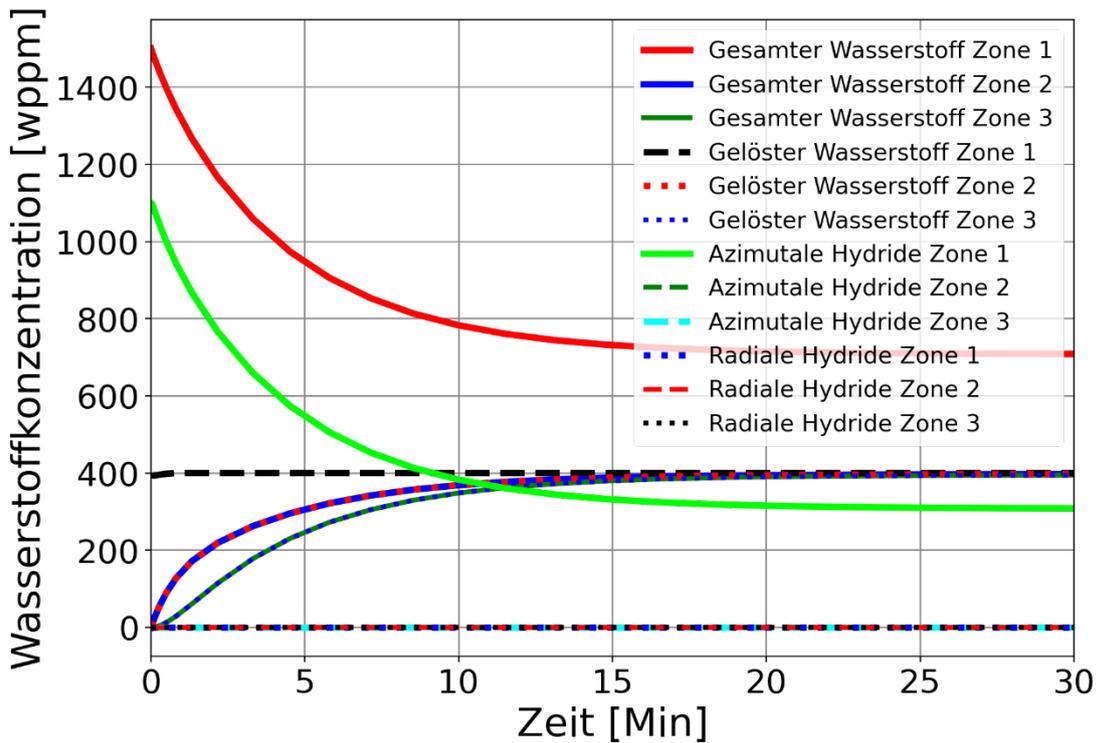


Abb. 4.39 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel F für einen Zeitraum von 30 Minuten

4.7.2.7 Beispiel G

Das Beispiel G verwendet denselben Input wie Beispiel F (siehe Tab. 4.7), jedoch wurde die Löslichkeitsgrenze in Zone 3 auf 300 wppm festgelegt, während sie in Zone 1 und 2 bei den vorherigen 400 wppm bleibt. Die Ergebnisse dieser Rechnung können in Abb. 4.40 und Abb. 4.41 eingesehen werden. In der Rechenzeit von etwa 1750 Tagen zeigt sich, wie in Abb. 4.40 zu sehen, dass es in diesem Beispiel zu einem vollständigen Umverteilen der Hydride kommt. Die azimuthalen Hydride in Zone 1 (hellgrüne Linie) gehen vollständig in Lösung, während die Hydride in Zone 3 (hellblaue gestrichelte Linie) auf etwa 600 wppm ansteigen. Der gelöste Wasserstoff erreicht einen Gleichgewichtszustand von 300 wppm pro Zone. Dies ist verständlich, da durch die reduzierte Löslichkeitsgrenze von 300 wppm in Zone 3 ein stetiger Konzentrationsunterschied zu den anderen Zonen herrscht, in denen 400 wppm Löslichkeitsgrenze vorliegt. Da die Hydride keinen Einfluss auf den Konzentrationsunterschied nehmen, diffundiert der Wasserstoff so lange in Zone 3 und fällt in Form von Hydriden aus, bis in Zone 1 und 2 ebenfalls

300 wppm an gelösten Wasserstoff vorliegt, sodass keine konzentrationsgetriebene Diffusion mehr zwischen den Zonen stattfindet.

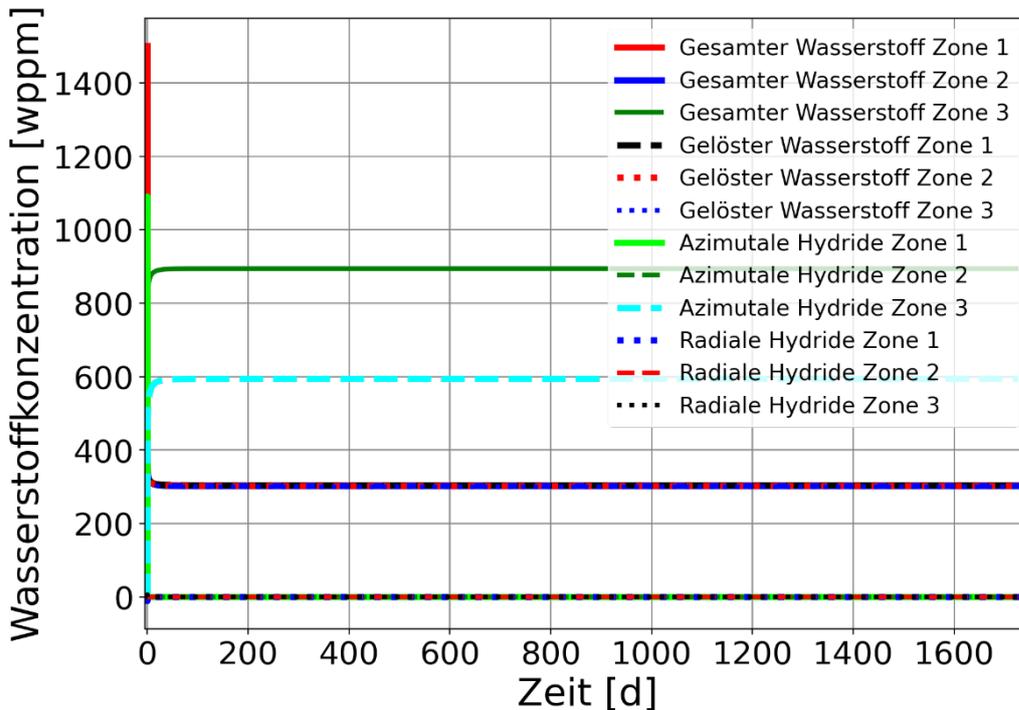


Abb. 4.40 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel G

In Abb. 4.41 ist die Wasserstoffdiffusion innerhalb der ersten 90 Minuten dargestellt. Zu Beginn liegen azimutale Hydride in Zone 1 (hellgrüne Linie) vor. Diese gehen zügig in Lösung, da durch das Diffundieren des Wasserstoffs in Zone 2, respektiv Zone 3, der gelöste Wasserstoff die Löslichkeitsgrenze unterschreitet. Bei etwa 10 Minuten flacht die Kurve etwas ab, da die anderen Zonen ebenfalls, in etwa, einen Wasserstoffgehalt von 400 wppm erreicht haben. Dass die Hydride in Zone 1 nach diesem Zeitpunkt noch weiter gelöst werden, liegt daran, dass in Zone 3 die Löslichkeitsgrenze von 300 wppm überschritten ist, was zum Ausfallen von Hydriden führt (hellblau gestrichelte Linie). Dadurch wird der gelöste Wasserstoff in Zone 3 reduziert, was zu einem Konzentrationsunterschied führt. Bedingt durch diesen diffundiert der Wasserstoff aus den anderen Zonen in Zone 3. Dadurch wird die Löslichkeitsgrenze in Zone 1 wieder unterschritten und es kommt zum weiteren Lösen von Hydriden in dieser Zone. Da das Ausfallen von Hydriden bei einem leichten Überschuss von Wasserstoff kinetisch gehemmt und im Allgemeinen langsamer als das Diffundieren über kurze Distanz ist, kommt es zu genanntem Abflachen der hellgrünen Linie. Die Rate, mit der die Hydride in Zone 1 ab etwa 10 Minuten abgebaut werden, ist invers zu der Rate, mit der die Hydride in Zone 3

aufgebaut werden. Bei etwa 55 Minuten sind alle Hydride in Zone 1 in Lösung gegangen, dadurch gibt es keinen Nachschub mehr an Wasserstoff, was dazu führt, dass der gelöste Wasserstoff, welcher zuvor 400 wppm entsprochen hat abnimmt und sich langsam an die 300 wppm die durch die Löslichkeitsgrenze von Zone 3 vorgegeben sind, anpasst.

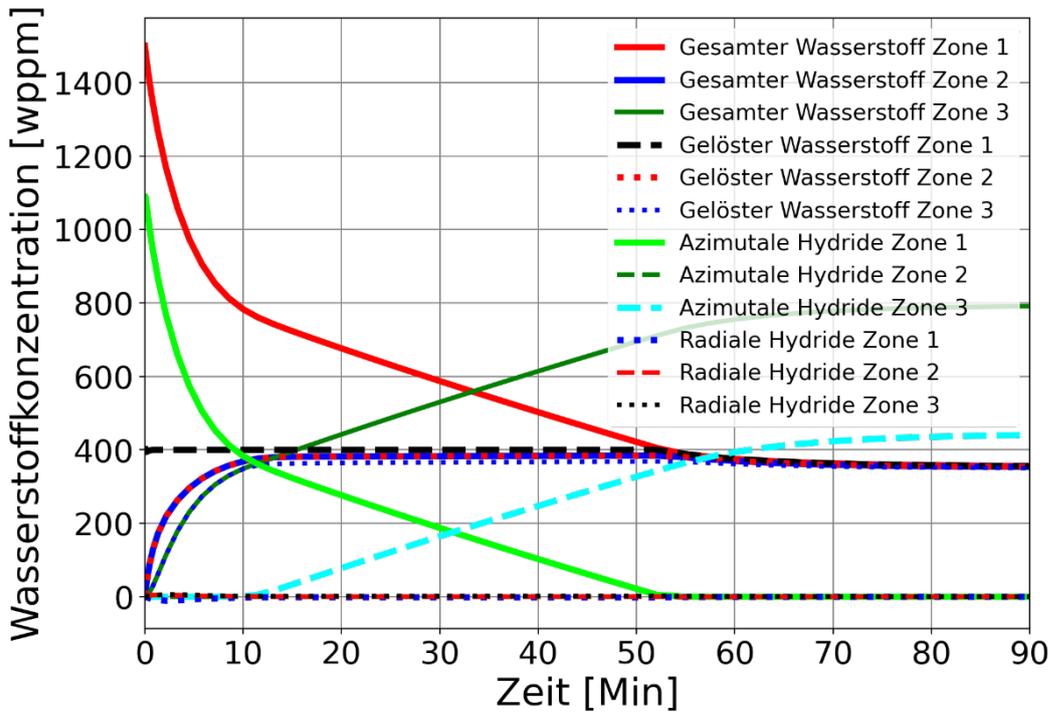


Abb. 4.41 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel G für einen Zeitraum von 30 Minuten

4.7.2.8 Beispiel H

In diesem Beispiel wird eine Simulation gezeigt, die einem realen Fall nachempfunden ist und alle zuvor erläuterten Effekte miteinander vereint. Es werden vier Level und drei Zonen angenommen. Die verwendeten Werte befinden sich in Tab. 4.8.

Tab. 4.8 Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel H

Level	1			2			3			4		
Länge der Level (m)	0,15			0,15			0,15			0,15		
Zonen	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
Wasserstoff- Gehalt zu Beginn (wppm)	750	0	0	750	0	0	750	0	0	750	0	0
Konstante Hüll- rohtemperatur (°C)	407	406,5	406	397	396,5	396	387	386,5	386	377	376,5	376

Die Ergebnisse sind in Abb. 4.42 und Abb. 4.43 gezeigt. Zur besseren Übersicht wurden die Hydride zusammengefasst. Es handelt sich, bedingt durch die Spannung, ausschließlich um azimutale Hydride. In welcher Zone sich die Hydride befinden, lässt sich anhand der Gesamtmenge des Wasserstoffs bestimmen. So befinden sich die Hydride nach einer kurzen Anfangsphase (radiale Diffusion) ausschließlich in Zone 3 (grüne bzw. schwarze Linie), was daraus resultiert, dass dies die kälteste Zone ist und somit die geringste Löslichkeit an Hydriden aufweist. Des Weiteren wird die Diffusion in diese Zone durch den Temperaturunterschied begünstigt. Auch ist zu sehen, dass der Wasserstoff in das kältere Level 4 diffundiert. Da die Hydride nicht zur Triebkraft der Wasserstoff Diffusion beitragen, bildet sich kein Konzentrationsunterschied aus, welcher der temperaturgetriebenen Diffusion entgegenwirken würde. Dies führt zu einer stetigen temperaturgetriebenen Diffusion von Wasserstoff, welcher, sobald er die Löslichkeitsgrenze überschreitet, als Hydrid ausfällt. Dies führt dazu, dass die Level mit höheren Temperaturen (Level 1-3) stetig an Wasserstoff verlieren. Da die Diffusion von Level 1 mit der höchsten Temperatur nach Level 4 mit der niedrigsten Temperatur stattfindet, wird dieser Effekt als erstes in Level 1 deutlich. In Level 3 hingegen lässt sich keine Abnahme des Wasserstoffgehalts feststellen, was lediglich daran liegt, dass der gewählte Zeitraum von etwa 1750 Tagen nicht ausreicht, um diesen Effekt aufzulösen, da von Level 2 stetig Wasserstoff in das kältere Level 3 diffundiert.

In Abb. 4.43 sind die abgebildeten Zeiträume individuell gewählt, um einen besseren Überblick darüber zu verschaffen, was innerhalb der Anfangszeit, der Simulation, passiert. Durch den hohen Überschuss an Wasserstoff in Zone 1 (750 wppm) bilden sich Hydride aus welche anschließend gelöst werden, da der Wasserstoff zügig in die anderen, zu Beginn, leeren Zonen fließt. Da jede Zone nicht nur mit den benachbarten Zonen auf demselben Level, sondern auch mit den benachbarten Zonen in den angrenzenden

Leveln kommunizieren kann, kommt es zu einem verlangsamten lösen der Hydride je kälter das jeweilige Level ist.

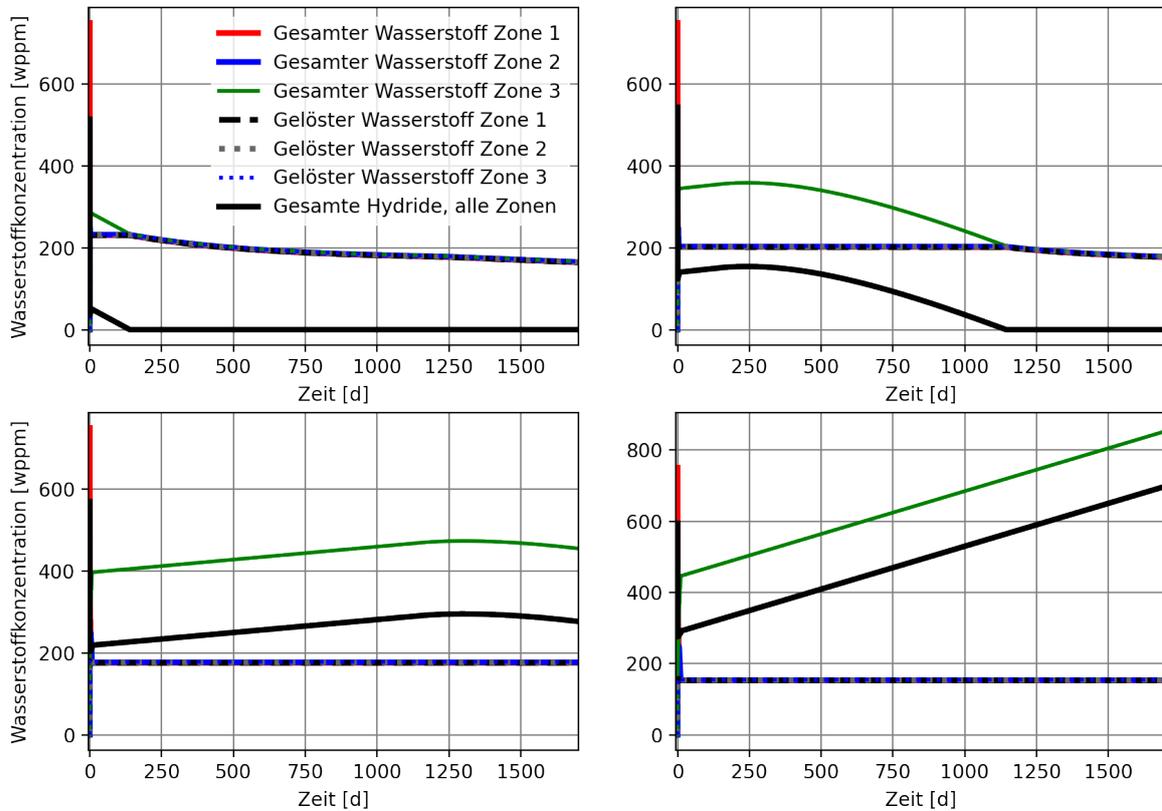


Abb. 4.42 Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels H für den gesamten Zeitraum von etwa 1750 Tagen, nach Leveln aufgelöst

Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten).

Auch die veränderte Löslichkeitsgrenze, bedingt durch die Temperatur lässt sich in dieser Abbildung gut erkennen. So ist sie in Level 1 bei etwa 250 wppm und in Level 4 nur bei etwa 150 wppm (erkenntlich durch die Menge an gelösten Wasserstoff, gestrichelte Linien). Dadurch ist das Verhältnis von gelöstem Wasserstoff zu Hydriden, zu Beginn, in jedem Level unterschiedlich.

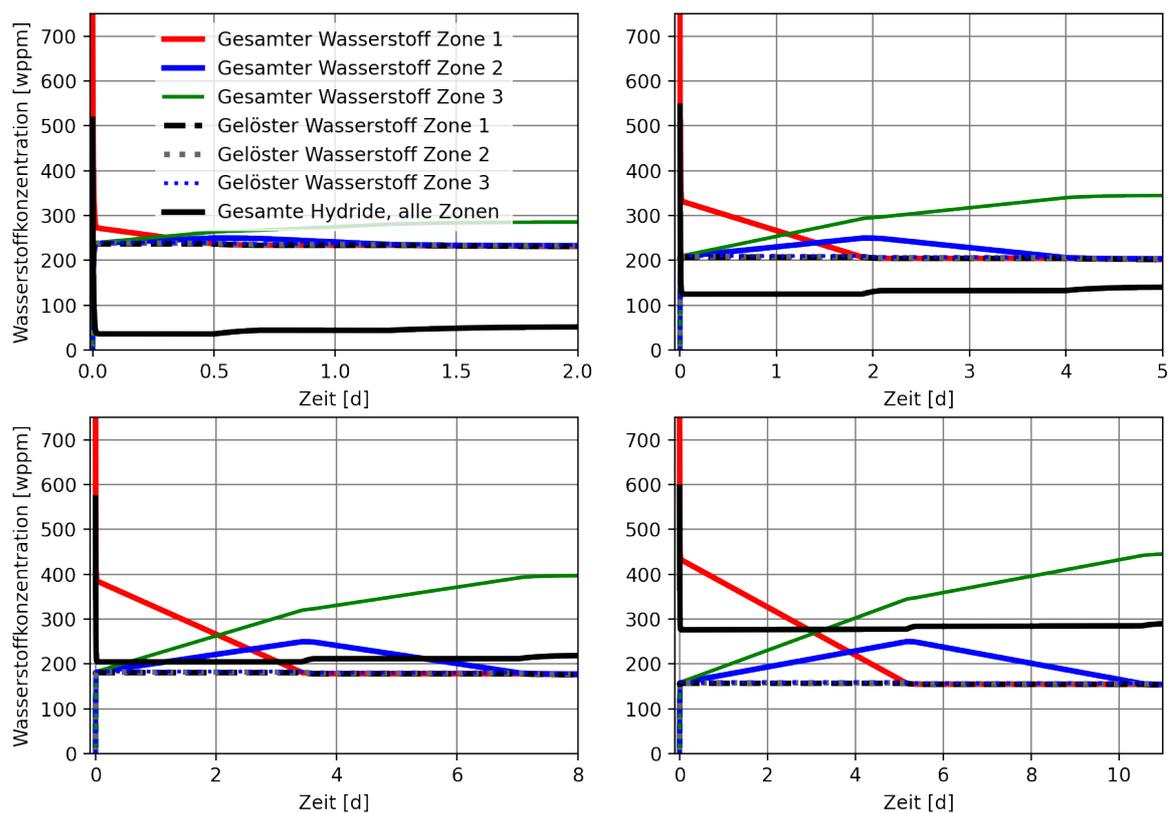


Abb. 4.43 Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels H für einen ausgewählten Zeitraum, nach Leveln aufgelöst

Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten).

4.8 Kampmann-Wagner-Modell

Wie sich unter anderem durch Arbeiten im aktuellen (siehe Kap. 4.6) und im Vorgänger- vorhaben gezeigt hat, ist eine korrekte Beschreibung der Wasserstoffausscheidung nötig, um verlässliche Aussagen über das Brennstabverhalten in der Zwischenlagerung treffen zu können. In der aktuellen Literatur wird die Wasserstoffdynamik vor allem über semiempirische Modelle, basierend auf experimentell gewonnenen TSSd- und TSSp- Kurven, beschrieben. Wie in Kap. 4.6 gezeigt wurde, können die Wasserstofflöslichkeits- kurven großen Unsicherheiten unterliegen. Dadurch wird die Aussagefähigkeit theoretischer Modelle reduziert. Zusätzlich sind aktuelle Modelle zur Beschreibung der Hydrid- dynamik nicht in der Lage Aussagen über die Größenverteilung ausgeschiedener Hydride zu treffen.

Ausgehend von dem modifizierten Langer-Schwartz-Formalismus (MLS) zur Beschreibung von Ausscheidungs Vorgängen wurde ein Simulationsmodell für die Ausscheidung von Zirkoniumhydriden entwickelt. Das Kampmann-Wagner-Numerisches-Modell (KWN-Modell) ermöglicht die Beschreibung der Größenverteilung der ausgeschiedenen Hybride und des Anteils der ausgeschiedenen Hybride am Gesamtwasserstoffgehalt. Als externe Variable geht in das KWN-Modell nur eine TSSd-Kurve ein. Die Existenz einer TSSp Kurve wird als ein rein kinetisches Phänomen betrachtet. Potenziell verzögerte Ausscheidungen werden direkt im Modell, zum Beispiel über eine Keimbildungsbarriere, berücksichtigt. Das KWN-Modell liefert neben dem Anteil der Hybride ebenfalls eine Größenverteilung der Hydridausscheidungen. Das hier beschriebene Modell wurde im Rahmen des SEDS-Workshop 2021 bereits vorgestellt /STE 21/ und basiert zu großen Teilen auf einer Publikation von Perez et al. /PER 08/. Das Modell ist in Python implementiert und verwendet entweder ein Euler- oder ein *Backward Differentiation Formulas* (BDF)-Lösungsverfahren.

Im KWN-Modell wird die Hydriddynamik über einen Satz an Differentialgleichung beschrieben. Diese bilden die Keimbildung sowie das Wachstum und Schrumpfung der Hybride ab (Abb. 4.44).

Keimbildung:

$$\frac{dN}{dt}(R^* + \Delta R^*) = N_0 Z \beta^* \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{t}\right) \quad \text{Gl. I}$$

Wachstum/Schrumpfung:

$$\frac{dN_i}{dt} \Delta R = \frac{dR_{i-1}}{dt} \left[\Theta\left(\frac{dR_{i-1}}{dt}\right) N_{i-1} + \Theta\left(-\frac{dR_{i-1}}{dt}\right) N_i \right] - \frac{dR_i}{dt} \left[\Theta\left(\frac{dR_i}{dt}\right) N_i + \Theta\left(-\frac{dR_i}{dt}\right) N_{i+1} \right] \quad \text{Gl. II}$$

$$\frac{dR_i}{dt} = \frac{D}{R} \frac{c_H - c_H^{\text{interface}}(R_i)}{c_{ZrH_x} - c_H^{\text{interface}}(R_i)} \quad \text{Gl. III}$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x > 0 \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

Abb. 4.44 Differentialgleichungen zur Beschreibung der Hydridkeimbildung und des Hydridwachstums nach Kampmann-Wagner

Die Größenverteilung innerhalb des KWN-Modells ist nicht kontinuierlich, sondern wird durch eine festgelegte Anzahl an Größenklassen mit einer festen Breite ΔR zwischen einem minimalen Radius R_{\min} und einem maximalen Radius R_{\max} beschrieben (Abb. 4.45). Für jeden Simulationszeitschritt wird überprüft, ob die Keimbildungsbarriere $\Delta G^*(\text{TDDs}(T))$ überschritten wird. Ist dies der Fall, wird ein kritischer Keimbildungsradius berechnet, der zugehörigen Größenklasse zugeordnet und eine bestimmte Menge an

Hydride ausgeschieden. Anschließend wird für alle populierte Größenklassen eine Radiusänderung nach Gl. III berechnet. Diese Änderung kann entweder positiv (Wachstum) oder negativ (Schrumpfung) sein. Die Radiusänderung ist hierbei von der aktuellen Unter- oder Übersättigung an gelöstem Wasserstoff sowie der Oberflächenenergie der ausgeschiedenen Hydride abhängig. Über Gleichung Gl. II wird die Hydridpopulation in den besetzten Größenklassen in Abhängigkeit von $\frac{dR}{dt}$ anschließend vergrößert oder verkleinert. Der Zeitschritt der Simulation ist hierbei durch die Breite der Größenklassen ΔR limitiert. Es gilt $dt = \frac{0,5 \cdot \Delta R}{\max(\frac{dR}{dt})}$. Dies verhindert, dass eine Hydridpopulation innerhalb eines Zeitschrittes mehr als eine Größenklasse wächst. Es hat sich gezeigt, dass bei hohen Temperaturen oder hohen Übersättigungen sehr große Wachstumsraten entstehen können. Passiert dies, geht der Zeitschritt der Simulation gegen Null, es entsteht großer numerischer Aufwand und sehr lange Rechenzeiten.

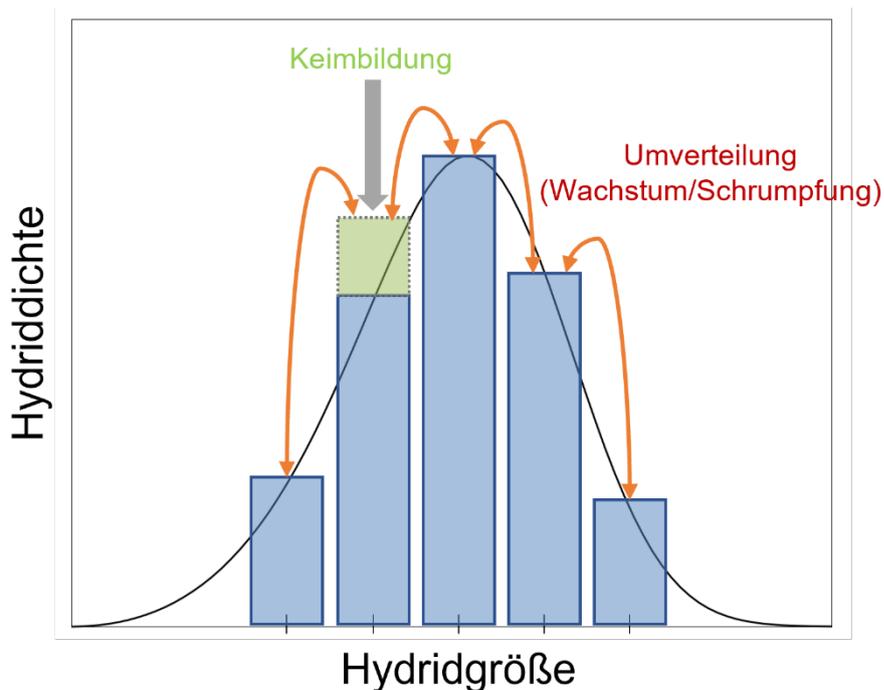


Abb. 4.45 Schematische Darstellung der Hydridverteilung auf die Größenklassen sowie der Hydridynamik durch Keimbildung, Wachstum und Schrumpfung

Das entwickelte Modell wurde mit zwei bereits publizierten Modellen zur Vorhersage der Hydridausscheidung verglichen: Dem derzeit in TESPAs-ROD implementierten Modell, sowie dem im Brennstab-Code BISON implementierten „Hydride Nucleation, Growth and Dissolution“ (HNGD) Modell /PAS 20/. Beide Modelle verwenden je zwei Löslichkeitsgrenzen: Eine für die Auflösung von Hydriden (Terminal Solid Solubility for Dissolution,

TSSd) und eine für die Ausscheidung (Terminal Solid Solubility for Precipitation, TSSp). Im direkten Vergleich bei der Anwendung auf die Röntgendiffraktometrie-Versuche des Argonne National Laboratory (ANL) zeigen diese Codes ein sehr ähnliches Verhalten /IVA 18/.

Der im Rahmen dieses Projektes durchgeführte Vergleich ist in Abb. 4.46 dargestellt. Es wurde hier jeweils ein Brennstababschnitt beladen mit 100 wppm Wasserstoff in einer Temperaturtransiente simuliert. Für TESP-ROD zeigt sich in der Abkühlung, bis zum Erreichen der TSSp, eine langsame Hydridbildung. Während der folgenden Aufheizphase kommt es zu einer schnellen Hydridauflösung. Im Gegensatz dazu zeigt das HNGD-Modell zu Beginn eine schnelle Hydridbildung und in der Aufheizphase ein langsames Auflösen der Hydride. Das KWN-Modell simuliert unter diesen Bedingungen eine verzögerte Hydridbildung und eine rasche Hydridauflösung. Die Schwächen des KWN-Modells zeigten sich in diesem Vergleich vor allem in der Simulationszeit, welche die der anderen Modelle deutlich überschritt. Um Rechenzeit in einem verträglichen Maß zu halten, wurde die Simulation bei relativ niedrigen Temperaturen durchgeführt.

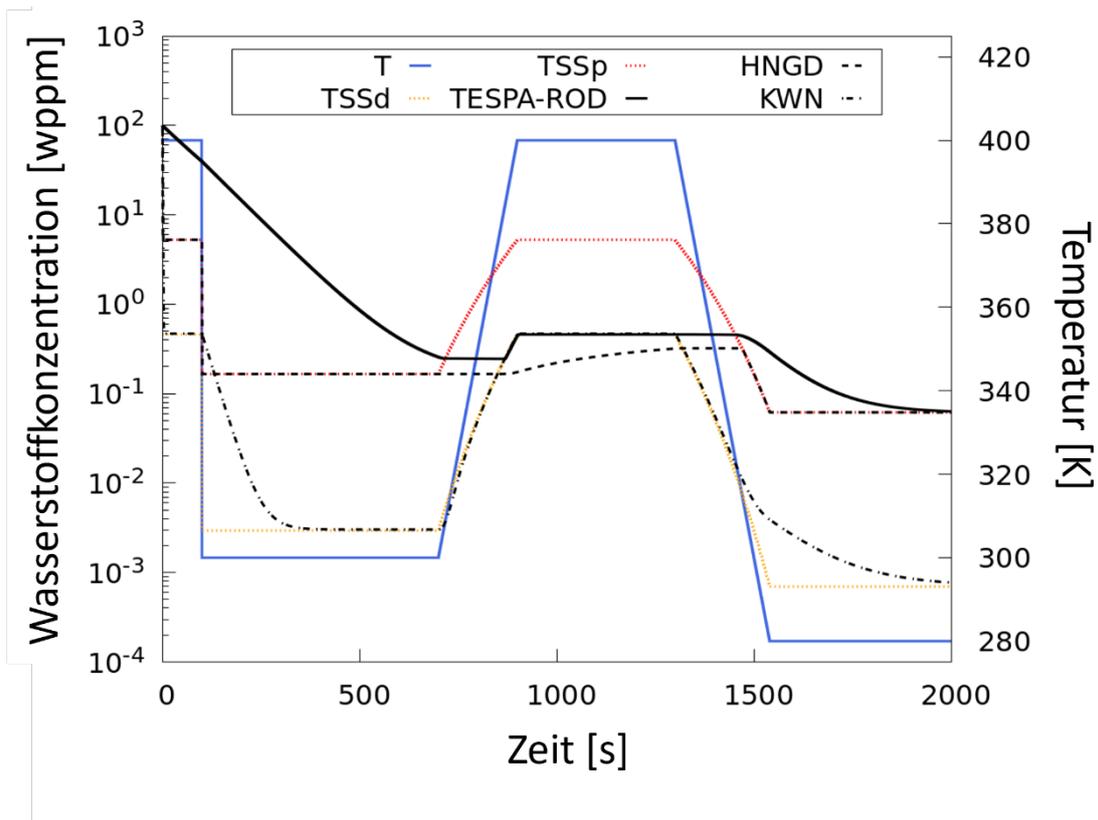


Abb. 4.46 Vergleich des KWN-Modells mit den Hybridmodellen der Brennstabcodes TESPA-ROD und BISON

Aufgrund des hohen Rechenaufwand des KWN-Modells wurde die Simulation bei tiefen Temperaturen und niedrigen Wasserstoffkonzentrationen durchgeführt.

Abbildung Abb. 4.47 zeigt die, durch das KWN-Modell, vorhergesagte Hydridverteilung sowie die Entwicklung der Hydridichte über den Simulationszeitraum. Die Verteilung des Hydridradius reicht von 0 bis 160 nm und beträgt im Mittel knapp 94 nm. Über den Simulationszeitraum von 2000 s verschiebt sich die Verteilung zunehmend zu höheren Radien. Radien in diesem Größenbereich werden zum Beispiel für sogenannte „nano-scale Hydride“ erwartet /MOT 19/. Diese bauen im Verbund die, auf Schlifffbildern erkennbaren, makroskopische Hydride auf. Die Bildung solcher makroskopischen Strukturen lassen sich durch den KWN-Ansatz jedoch nicht ohne weiteres beschreiben. Die Hydridichte steigt zu Beginn der Simulation stark an und nimmt mit zunehmenden Keimwachstum kontinuierlich ab.

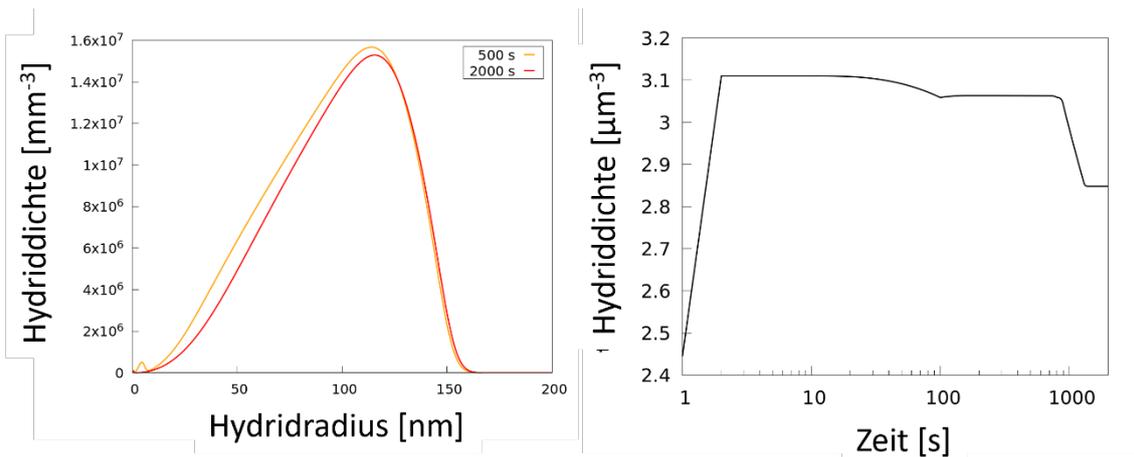


Abb. 4.47 Durch das KWN-Modell vorhergesagte Hydridgrößenverteilung und Hydrid-dichte

Grundlegend zeigt sich das im Rahmen dieses Projektes entwickelte KWN-Modell als eine vielversprechende Alternative zu den etablierten Modellen. Die Vorteile sind, dass keine Unterteilung in TSSd und TSSp nötig ist und dass die Ausgabedaten den gesamten Ausscheidungs- und Wachstumsprozess beschreiben. Ein großer Nachteil ist jedoch der hohe Rechenaufwand, welcher in für die Zwischenlagerung relevanten Temperaturbereichen zu unverhältnismäßig langen Simulationszeiten führt. Eine Implementierung des Modells in TEPESA-ROD würde nach derzeitigem Stand zu einer signifikanten Reduzierung der Rechenleistung führen. Aus diesem Grund wurde die Entwicklung des Modells vorerst eingestellt. Eine potenzielle Lösung wäre die Weiterentwicklung von TEPESA-ROD zum Beispiel mit Hilfe des, von der GRS entwickelten, *Numerical Toolkit* (NuT-Paket) /STE 20/. Dadurch könnten die im KWN-Modell enthaltenen Differentialgleichungen deutlich effizienter gelöst werden. Eine solche Weiterentwicklung ist für zukünftige Eigenforschungsvorhaben geplant.

4.9 Bildanalyse

Die mechanische Stabilität des Brennstabhüllrohrs in der Zwischenlagerung wird nicht allein durch die Orientierung der Zirkoniumhydride, sondern auch durch deren Länge beeinflusst. Hierbei ist der Anteil an radialen Hydriden (*radial hydride fraction* (RHF)) direkt mit der mechanischen Integrität der Zirkonium basierten Hüllrohre verknüpft /KON 21/. Die Länge verbundener radialer Hydride, relativ zur Hüllrohrwandstärke, wird als Hydridkontinuitätsfaktor bezeichnet (Radial Hydride Continuous Path (RHCP)). Hierbei müssen die Hydride nicht direkt verbunden sein. Auch direkte räumliche Nähe der

Hydride ist ausreichend, um eine Schwachstelle im Hüllrohr darzustellen und eine potenzielle Rissausbreitung zu katalysieren. Der Hydridkontinuitätsfaktor kann also als Indikator für die Sprödbruchempfindlichkeit verwendet werden /SIM 21/. So konnte unter anderem mit Ringdrucktests (*ring compression tests*, RCT) gezeigt werden, dass lange radiale Hydridstrukturen, starken Einfluss auf die mechanischen Widerstandsfähigkeit bestrahlter Hüllrohre aufweisen /BIL 13/. Aktuell gibt es allerdings noch keine theoretischen Modelle zur zuverlässigen Vorhersage der Länge ausgeschiedener Hydride in Abhängigkeit der thermischen Historie des Brennstabes. Daher sind die Parameter RHF und RHCP lediglich über die Auswertung von Hüllrohrschliffbildern zugänglich. Die Auswertung solcher Schliffbilder kann automatisiert über Bildanalyse durchgeführt werden. Hierbei könnte eine umfangreiche Auswertung der in der Literatur verfügbaren Schliffbilder dabei helfen, die Vorhersage von bestimmten kritischen Hydridmorphologien zu ermöglichen. Ein solches Modell würde eine theoretische Vorhersage der mechanischen Stabilität von Brennstäben in der längerfristigen Zwischenlagerung signifikant voranbringen.

Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieses Vorhabens ein Werkzeug zur automatisierten Auswertung von Hüllrohrschliffbildern hinsichtlich der Hydridorientierung und -konnektivität entwickelt. Es ist wichtig zu erwähnen, dass während diese Arbeiten durchgeführt wurden, vergleichbare Werkzeuge mit ähnlichem oder größerem Funktionsumfang publiziert und teilweise frei zugänglich gemacht wurden /MAR 22/, /SIM 21/. Das hier entwickelte Werkzeug ist in Python geschrieben und basiert größtenteils auf den „scikit-image“ Bildprozessierungsalgorithmen sowie den Skeletanalysepaket *skan* /VAN 14/.

Der Ablauf einer Bildanalyse beginnt mit dem Einlesen des zu analysierenden Bildes. Das Bild wird anschließend mit dem „scikit-image“ Paketen bearbeitet und zur nachfolgenden Analyse vorbereitet. Dieser Vorgang ist exemplarisch in Abb. 4.48 am Beispiel eines von Auzoux et al. publizierten Schliffbild dargestellt /AUZ 22/. Das eingelesene Farbbild wird zunächst invertiert und anschließend in ein schwarz-weißes Binärbild überführt. Dadurch werden alle Hydride als rein weiße Strukturen auf einem schwarzen Hintergrund abgebildet. Bei diesen Schritten entstandene kleine Artefakte werden anschließend mit einem „top hat“ Filter entfernt. Im letzten Schritt werden die Hydridstrukturen „skeletiert“. Das bedeutet, dass die zuvor mehrere Pixel breiten Strukturen auf eine breite von einem Pixel kollabiert werden. Eine Überlagerung der Skeletstrukturen mit dem ursprünglichen Bild zeigt die gute Übereinstimmung des Skelets mit den Hydriden (Abb. 4.48 unten rechts).

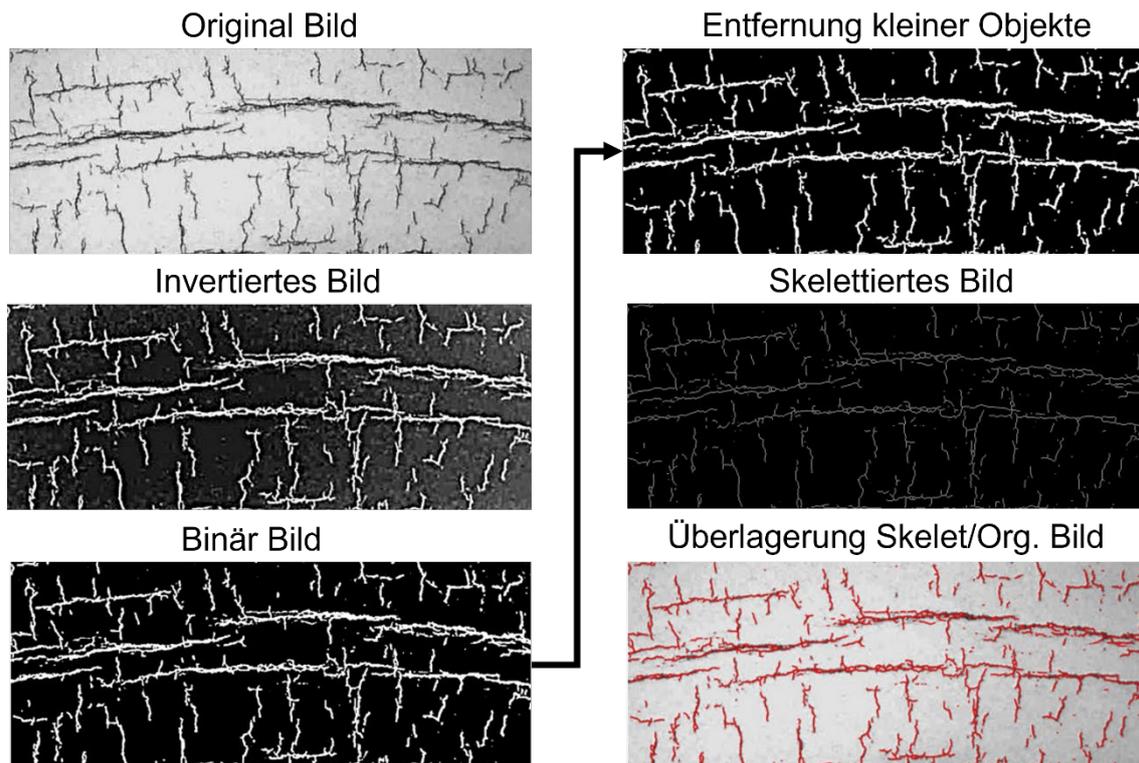
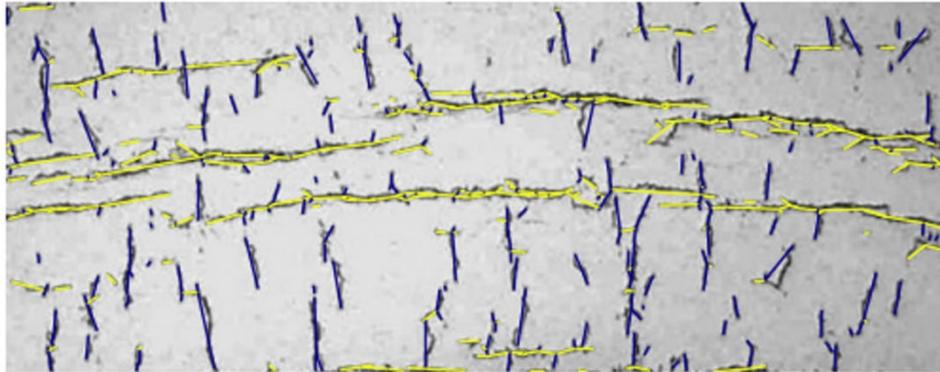


Abb. 4.48 Darstellung des Arbeitsablaufes zur Bildbearbeitung in Vorbereitung auf die Hydridanalyse

Im nächsten Schritt wird die zuvor erzeugte Skelettstruktur über das „skan“ Paket in ein Netzwerk aus verzweigten oder unverzweigten Vektorsystemen unterteilt. Das Ergebnis für das oben vorgestellte Beispiel ist in Abb. 4.49 dargestellt. Hierbei sind radiale Hydride (absoluter Winkel $>45^\circ$, $>135^\circ$) in blau und umfangsgerichtete Hydride in Gelb (absoluter Winkel $<45^\circ$, $<135^\circ$) dargestellt. In der Analyse entstehen sowohl einzelne lineare Vektoren als auch verzweigte und teilweise geschlossene Ringsysteme. Vor allem letztere erlauben keine klare Auswertung der unterliegenden Hydridstrukturen nach deren Länge und Winkel. Um die Auswertung zu erleichtern, wurde eine Routine entwickelt, welche jede isolierte Skelettstruktur eine Graphstruktur umwandelt. Ein solcher Graph besteht aus Knoten, welche über Kanten miteinander verbunden sind. Der Graph wird anschließend analysiert. Zunächst wird die längste Kante jedes Graphen identifiziert und deren Winkel berechnet. Anschließend werden alle anderen Kanten in der Struktur, relativ zur Längsten, hinsichtlich des Winkels und ihrer Länge analysiert. Überschreitet eine verbundene Kante zuvor festgelegte Grenzwerte für Länge und Winkelunterschied (z. B. $20\ \mu\text{m}$ und 45°) so wird der Graph am jeweiligen Kontaktknoten aufgetrennt. Anschließend werden die so aufgetrennten Graphen auf eine einzelne Kante, bestehend

aus Anfang und Endpunkt des ursprünglichen Graphs, kollabiert. Das Ergebnis dieser Vereinfachung ist in Abb. 4.49 unten dargestellt.

Analyzierte Skelettstruktur



Reduzierte Skelettstruktur

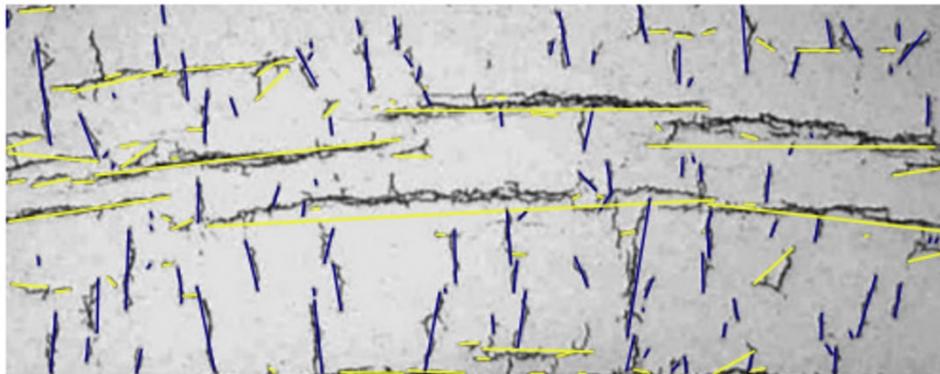


Abb. 4.49 Darstellung des aus der Skeletanalyse entstandenen Vektorsystems (oben). Darstellung des Vektorsystems nach Reduzierung auf jeweils einen Anfangs- und Endpunkt (unten)

Radiale Hydride sind in Blau und umfangersgerichtete Hydride in Gelb dargestellt.

Aus Basis dieser reduzierten Skelettstruktur können die Hydride im Schliffbild ausgewertet werden. Für dieses Beispiel ergibt sich ein RHF-Wert von 61 %. Dies bedeutet das 61 % aller Hydride eine Ausrichtung im absoluten Winkelbereich von $<45^\circ$ bis $>135^\circ$ aufweisen. Dieser Wert allein ist aber schwer zu interpretieren, da hier rein die Anzahl an Hydriden verglichen wird. Im gewählten Beispiel existieren viele kürzere radiale Hydride und weniger längere umfangersgerichtete Hydride. Ein aussagekräftigerer relativer RHF-Wert von 46 % ergibt sich, wenn jedes Hydrid relativ zu seiner Länge in die Berechnung eingeht. Wie schon von Simon et al. Publiziert, können benachbarte aber nicht direkt verbundene Hydride bei der Rissausbreitung einen ähnlich schwächenden Effekt wie ein einzelnes durchgängiges Hydrid aufweisen /SIM 21/. Die Analyse der

Konnektivität der radialen Hydride bestimmt daher maßgeblich den Hydridkontinuitätsfaktor. Daher wurde in dem in diesem Vorhaben entwickelten Werkzeug die Möglichkeit geschaffen, die Skelettstrukturen auf ihre nächsten Nachbarn zu untersuchen. Dies basiert auf „nächsten Nachbarn“ Algorithmen des „networkx“ Pythonpaket. Hierzu werden alle Endknoten der Hydride, in einer variabel einstellbaren Entfernung (meist 15-30 μm), jeweils auf Endknoten anderer Hydride in der direkten Nähe untersucht. Anschließend die zum nächsten Nachbarknoten gehörende Kante auf ihren Winkel relativ zur Ausgangskante analysiert. Eine Verbindung der Hydride wird ist nur zulässig, wenn der Winkelunterschied kleiner als 45° ist. Erfüllen mehrere Punkte das Entfernungs- und Winkelkriterium wird der Punkt mit der niedrigsten Entfernung ausgewählt. Nach diesem Verfahren werden aus den zuvor reduzierten Skelettstrukturen erneut linear verknüpfte Strukturen erzeugt. Abschließend werden die Anfangs- und Endpunkte der so erzeugten Skelette miteinander verknüpft und alle weiteren Knoten werden verworfen. Es entsteht so eine einzige lineare unverzweigte Struktur. Das Ergebnis der „nächster Nachbar“ Analyse in Abb. 4.50 gezeigt.

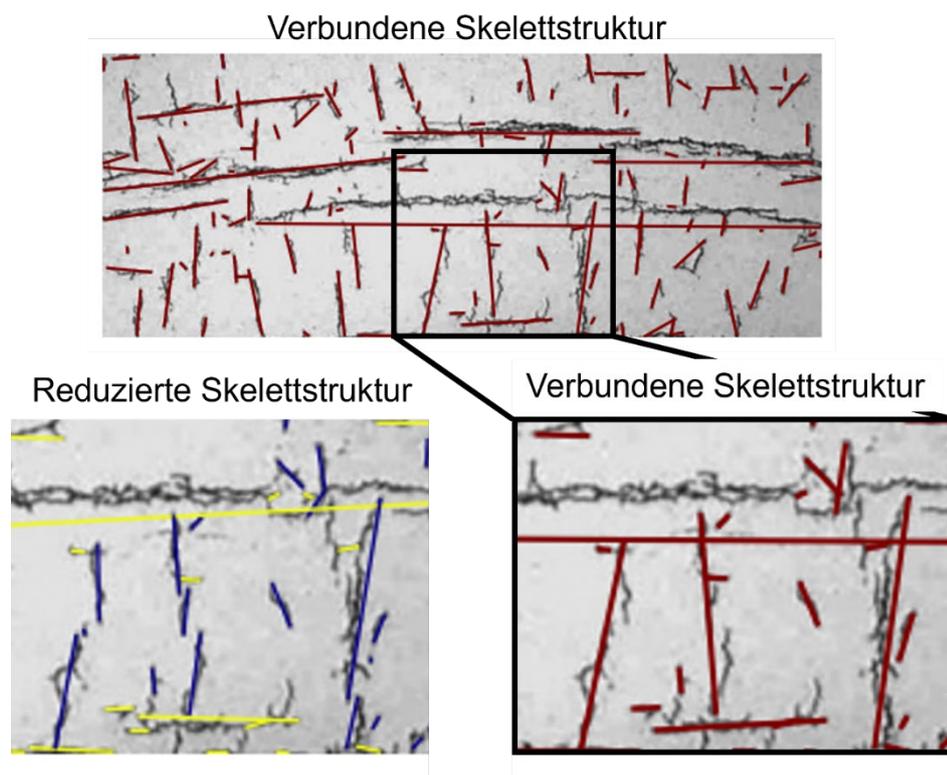


Abb. 4.50 Darstellung des Ergebnisses der „nächsten Nachbar“ Analyse und der daraus erzeugten verbundenen Skelettstruktur

In den vergrößerten Ausschnitten zeigt sich die Auswirkung der Verbindung der nahegelegenen Hydride deutlich.

Aus dieser Analyse ergibt für das längste radiale Hydrid eine Länge von 250 μm . Relativ zur Hüllrohrwandstärke von kann 640 μm ergibt sich so ein Hydridkontinuitätsfaktor von 39 %. Die hier beschriebene Auswertung eines Hüllrohrschliffbildes erlaubt auch eine statistische Auswertung der Daten, zum Beispiel durch Darstellung in einem Balkendiagramm (Abb. 4.51). Hier zeigt sich, dass die Orientierung der Hybride im Schliffbild nicht gleichverteilt ist, sondern sich Maxima an den Extrempunkten von 0 ° (radial) und 90 ° (umfangsgerichtet) ausbilden. Rein der Anzahl nach überwiegen in diesem Beispiel die radialen Hybride. Gewichtet nach der Länge überwiegen die umfangsgerichteten Hybride jedoch deutlich.

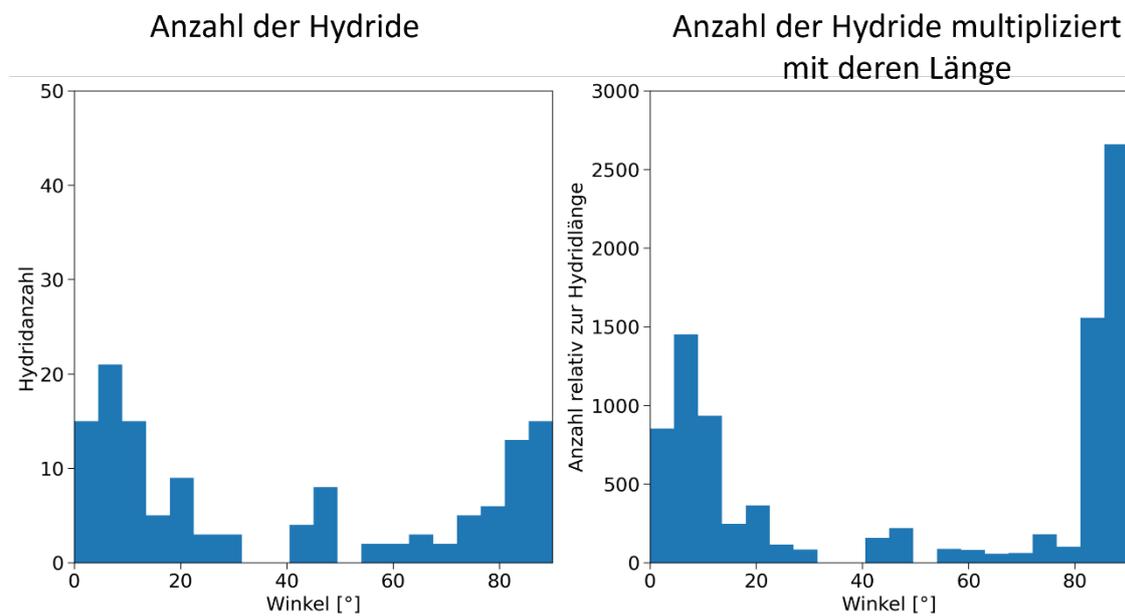


Abb. 4.51 Darstellung der Hydridstruktur des ausgewerteten Schliffbildes als Balkendiagramm.

Es ist die Anzahl der Hybride, bzw. die Anzahl multipliziert mit der jeweiligen Hydridlänge, pro Winkelabschnitt von 4.5° dargestellt.

4.10 Untersuchungen zum Einfluss von Hydriden auf die mechanischen Eigenschaften des Hüllrohrs in Ringdrucktests

4.10.1 Anknüpfung an die Modellierung im Vorhaben RS1175

4.10.1.1 Modell

Ringdrucktests (Abb. 4.52) dienen der Ermittlung der Festigkeit von Brennstabhüllrohren unter definierten Bedingungen. Dabei drückt eine bewegliche Platte mit konstant zunehmender Verschiebung Δl von oben auf einen Abschnitt eines Hüllrohrs. Zusammen mit der gemessenen Last P ergibt sich im Ergebnis eine Last-Verformungskurve.

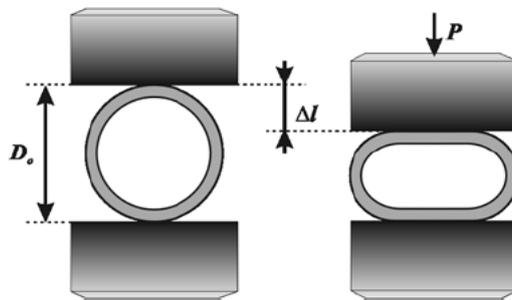


Abb. 4.52 Prinzipieller experimenteller Aufbau der Ringdrucktests

Für die Simulation von Ringdrucktests wurde erstmals der Finite Elemente Code ANSYS Mechanical 2021 R2 /ANS 21/ eingesetzt, um erweiterte und effizientere Modellierungsmöglichkeiten im Vergleich zum bisher verwendeten Code ADINA zu nutzen. Zur Absicherung des Übergangs wurden einzelne Rechnungen aus dem Vorhaben RS1175 /SON 10/ mit ANSYS Mechanical wiederholt und ausgewählte Ergebnisse verglichen.

Die betreffenden Ringdrucktests wurden von ANL (Argonne National Laboratory) durchgeführt, um Effekte während eines LOCA-Störfalls zu simulieren /BIL 04a, BIL 04b, BIL 08/. Entsprechend des Anwendungsfalls wurde das Hüllrohr vor den Tests bei einer definierten Temperatur für eine definierte Zeit oxidiert. Dadurch ändert sich das Werkstoffverhalten und es bildet sich an der Oberfläche eine Schichtstruktur aus, die die Festigkeit beeinflusst und daher in der Simulation zu berücksichtigen ist (Abb. 4.53). Die Dicke der Schichtstruktur wird dabei durch den Wert ECR (Equivalent Cladding Reacted) als Anteil der Randschichten bezogen auf die ursprüngliche Wandstärke ausgedrückt.

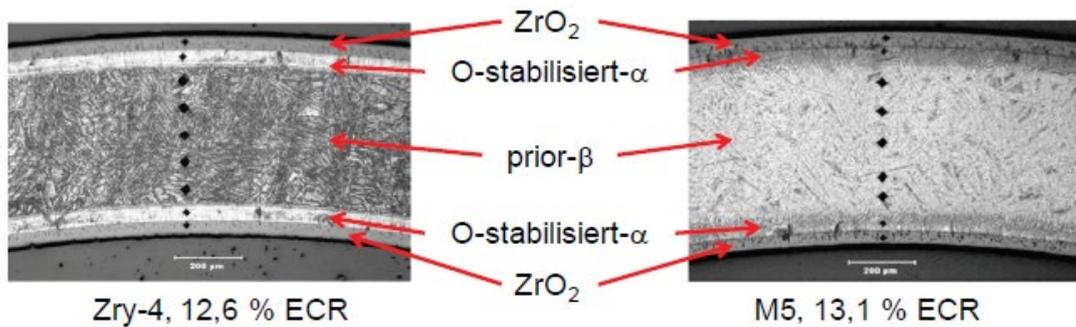


Abb. 4.53 Schichtstruktur von oxidiertem Zry-4 und M5 /BIL 08/

Geometrie und Randbedingungen des ANSYS Modells (Abb. 4.54, links) entsprechen denen des ADINA Modells unter Nutzung der Symmetrien. Die Tiefe des 2D-Modells wurde entsprechend der Probenlänge in den Versuchen mit 8 mm festgelegt. Wie im ADINA-Modell wurden für den Fall ECR = 10 % an den Oberflächen je zwei Randschichten (ZrO_2 -Schicht und O- α -Schicht) mit konstanter Dicke von je 5 % der Gesamtwandstärke definiert. Die Belastung wird durch Kontakt mit einem fiktiven Körper aufgebracht, dessen Knoten in jedem Zeitschritt um die gleiche Distanz verschoben werden. Für den Kontakt zwischen dem fiktiven Körper und dem Hüllrohr wurde ein Kontaktmodell (Augmented Lagrange, reibungsfrei) mit aus früheren Rechnungen bewährten Kontakteinstellungen implementiert. Die Last wird als Reaktionskraft an der gegenüberliegenden Einspannungsrandbedingung ermittelt. Die Vernetzungen des alten und neuen Modells sind vergleichbar (Abb. 4.54, mittig und rechts). In radialer Richtung werden die äußeren Schichten mit jeweils einem und die innere Schicht mit etwa zehn Elementen diskretisiert.

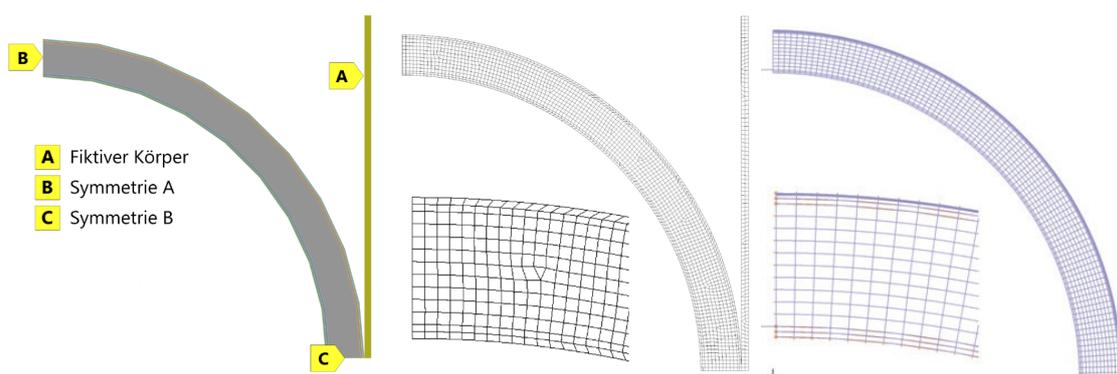


Abb. 4.54 Geometrie und Randbedingungen des ANSYS Modells (links), Gitternetz des ANSYS Modells (mittig) und ADINA Modells (rechts)

Die Werkstoffdaten für die mittlere Schicht aus Zry-4 wurden aus /SON 10/ übernommen (Abb. 4.55), wobei die Werte für ECR = 10 % etwas unter denen des unbehandelten Werkstoffs liegen. Für die Randschichten wurde ein elastisches Verhalten mit einem E-Modul von 152 GPa verwendet. Unter Zugbelastungen nehmen die Schichten oberhalb einer Bruchdehnung von 0,09 % wie auch im Vorgängermodell keine weitere Last mehr auf, während unter Druckbelastungen keine Begrenzung vorgesehen ist.

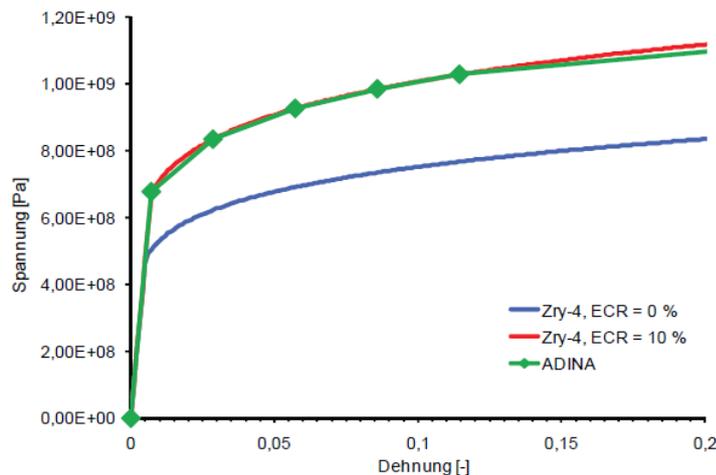


Abb. 4.55 Spannungs-Dehnungskurve für Zry-4 mit ECR = 10 %, oxidiert bei 1200 °C, E-Modul: 94,2 GPa

4.10.1.2 Ergebnisse

In Abb. 4.56 wird die Last-Verformungs-Funktion des ANSYS Modells den Ergebnissen eines ADINA Modells mit vergleichbaren Dicken der Randschichten gegenübergestellt. Die Ergebnisse stimmen gut überein, wobei die verbleibende Abweichung auf den dem ADINA Modell nachgeschalteten Prozess zur adaptiven Anpassung der Werkstoffdaten zurückzuführen ist. Im ANSYS Modell wurde die Rechnung zusätzlich erstmals mit großen Verformungen (Updated Lagrange) durchgeführt, wodurch sich eine leichte Abweichung oberhalb einer Verformung von 0,5 mm ergibt. Die Verläufe der Vergleichsspannungen bei unterschiedlichen Verfahrenswegen (Abb. 4.57 bis Abb. 4.59) stimmen ebenfalls gut überein. Daher wurde der Code ANSYS Mechanical 2021 R2 auch für die im Vorhaben vorgesehenen Rechnungen zum Hydrideinfluss eingesetzt, insbesondere um die gegenüber ADINA robustere Analysetechnik einschließlich erweiterter und effizienterer Modellierungsmöglichkeiten zu nutzen.

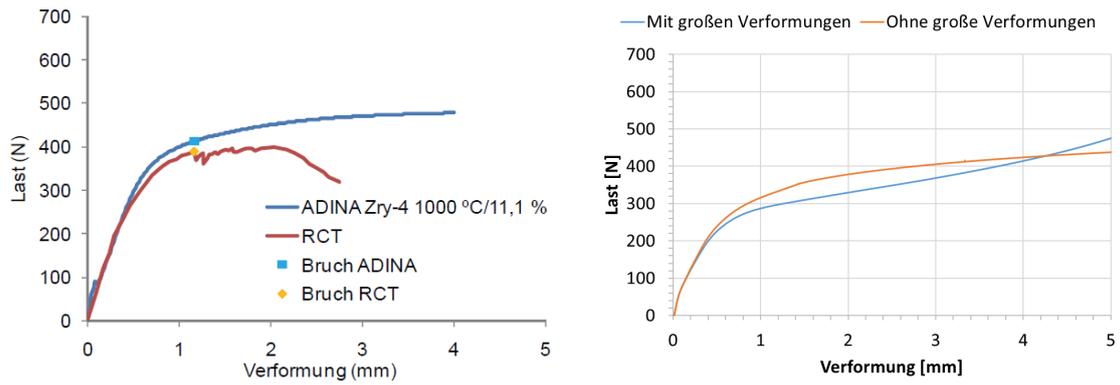


Abb. 4.56 Vergleich der Last-Verformungs-Funktion zwischen ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts)

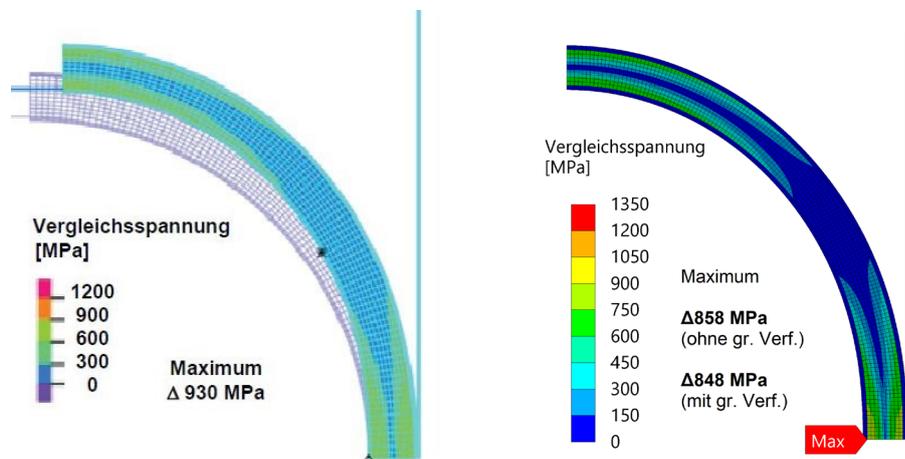


Abb. 4.57 Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrensweg 0,4 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts)

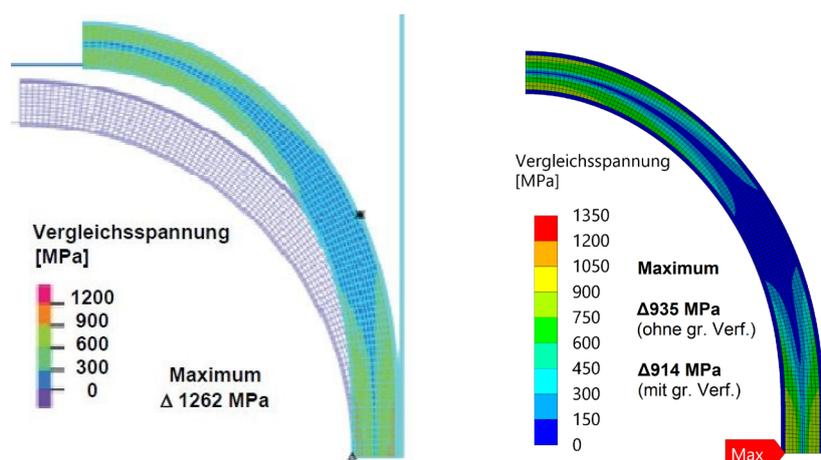


Abb. 4.58 Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrensweg 0,8 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts)

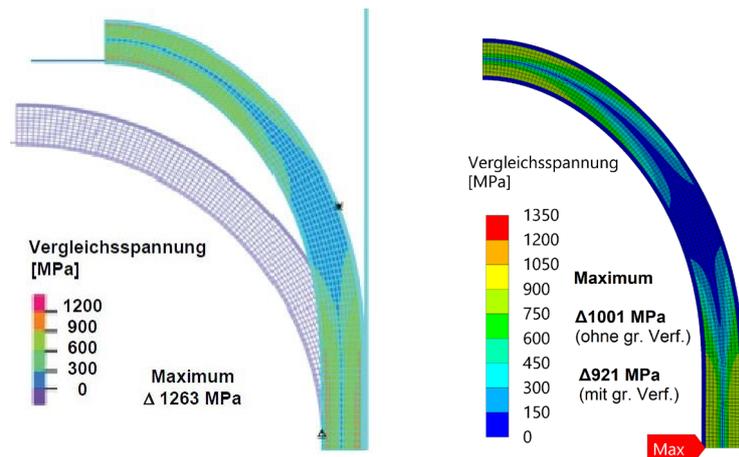


Abb. 4.59 Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrensweg 1,2 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts)

4.10.2 Rechnungen zum Hydrideinfluss

4.10.2.1 Modell

Das Modell zur Bewertung des Hydrideinflusses, der im Rahmen von Versuchen am ANL /BIL 11, BIL 12/ untersucht wurde, ist ähnlich zu dem in 4.10.1.1 beschriebenen Modell aufgebaut, wobei die wesentlich dünneren Randschichten hier vernachlässigt wurden. Als Außendurchmesser und Wandstärke wurde gemäß den Experimenten 9,58 mm und 0,55 mm gewählt.

In unterschiedlichen Modellvarianten wurden jeweils keine, ein und neun Bereiche in Umfangs- bzw. Radialrichtung pro Viertelrohr in gleichem Abstand voneinander eingebracht, welche mit Abmessungen von jeweils $385 \times 5 \mu\text{m}$ Hydrideinschlüsse darstellen (Abb. 4.60, links). In einer weiteren Variante wurde im Rahmen einer Netzstudie das Modell mit neun radialen Hydriden im Bereich um die Hydride herum wesentlich feiner diskretisiert. Dazu wurde die ANSYS-Funktion „Body of Influence“ verwendet, mit der die Netzfeinheit abgegrenzter Bereiche (hier als Balken quer über dem Hydrid dargestellt) unter graduellem Übergang zu den Nachbarbereichen festgelegt werden kann (Abb. 4.60, rechts). Die lokale Netzgröße wurde dabei mit einem Drittel der Hydriddicke angesetzt. Im Übrigen entspricht die Diskretisierung dem in 4.10.1.1 beschriebenen Modell.

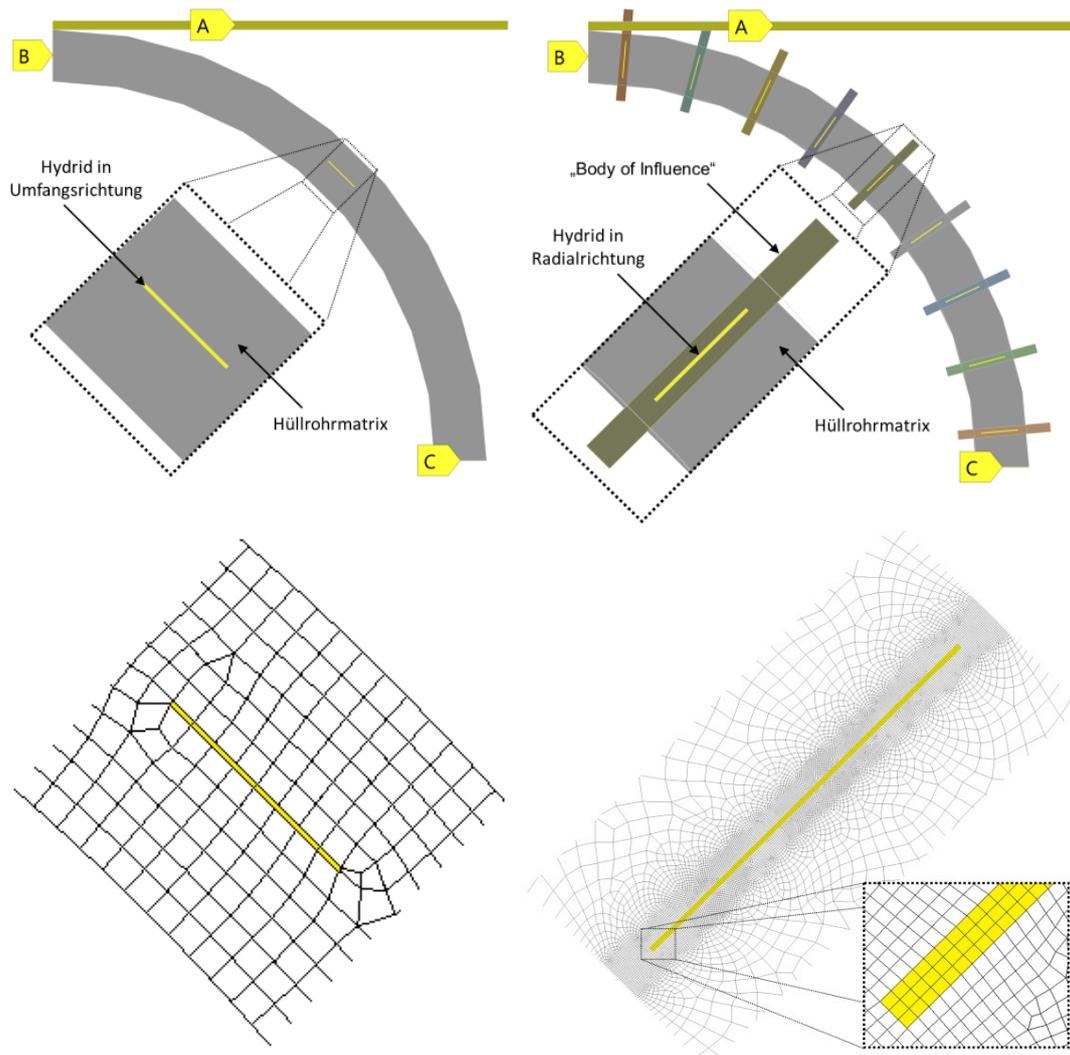


Abb. 4.60 Geometrie und Randbedingungen der Modellvarianten mit einem Hydrid in Umfangsrichtung (oben links) und neun radialen Hydriden und Netzverfeinerung (oben rechts), Nodalisierung im Hydridbereich (jeweils darunter)

Für die Modellierung der Werkstoffeigenschaften der Hydride bei Umgebungstemperatur wurden drei Varianten verwendet. In einer Basisvariante wurde ein rein elastisches Verhalten mit einem E-Modul von 91,65 GPa gemäß /HAG 79/ gewählt. In einer zweiten Variante wurde für eine Grenzbetrachtung die Tragfähigkeit des Hydrids auf einen aus /PUL 05/ abgeleiteten Festigkeitswert von 677 MPa begrenzt. In einer dritten Variante wurden die Hydride, angelehnt an die Herangehensweise in /NIL 10/, als „Lücken im Werkstoff“, d. h. ohne jegliche Tragfähigkeit, modelliert. Die Durchdringung der Flanken wurde dabei durch eine entsprechende Kontaktmodellierung unterbunden.

Für die elastisch-plastische Modellierung des Hüllrohrwerkstoffs wurden zwei Varianten verwendet (Abb. 4.61). Daten für M5 wurden aus MATPRO /HAG 79/ entnommen und setzen sich aus einem E-Modul von 86,74 GPa und einer plastischen Verfestigung $\sigma = K \cdot \epsilon^n$ mit $K = 694,8 \text{ MPa}$ und $n = 0.05$ zusammen. Daten für Zry-4 wurden aus /SON 10/ entnommen. Insgesamt ergaben sich dadurch 28 unterschiedliche Varianten (Tab. 4.9).

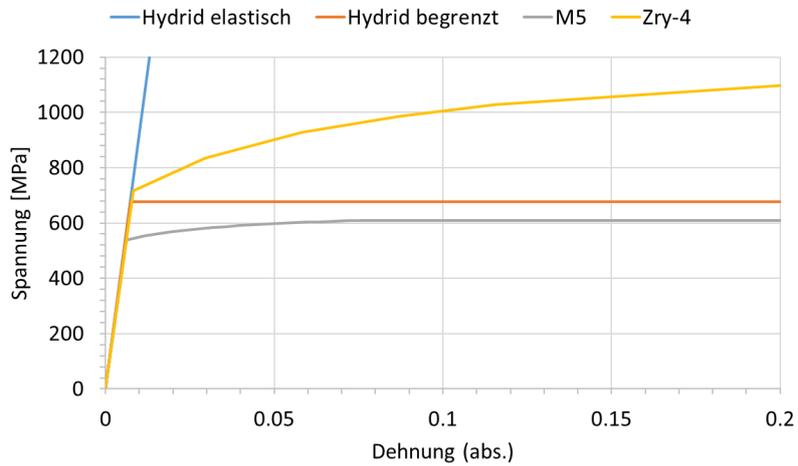


Abb. 4.61 Spannungs-Dehnungs-Verhalten der verwendeten Werkstoffmodelle

Tab. 4.9 Übersicht zu den untersuchten Modellvarianten

Geometrie und Vernetzung	Hüllrohrwerkstoff	Hybridverhalten
Ohne Hydride	M5	Elastisch
1 Hydrid radial	Zry-4	Hydrid als „Lücke“
9 Hydride radial		Tragfähigkeit begrenzt
1 Hydrid im Umfang		
9 Hydride im Umfang		
9 Hydride im Umfang, feinere Vernetzung		

4.10.2.2 Ergebnisse

Abb. 4.62 zeigt experimentell ermittelte Last-Verformungskurven von Ringdrucktests mit dem Hüllrohrwerkstoff M5 ohne und mit Hydriden /BIL 11, BIL 12/ sowie entsprechende Nachrechnungen mit Annahme eines elastischen Hydridverhaltens. Ein geringer Lateralversatz von 0,01 mm, der möglicherweise von Toleranzen im Experiment oder der Kontaktmodellierung in der Simulation stammt, wurde durch eine entsprechende horizontale Verschiebung in der Darstellung ausgeglichen.

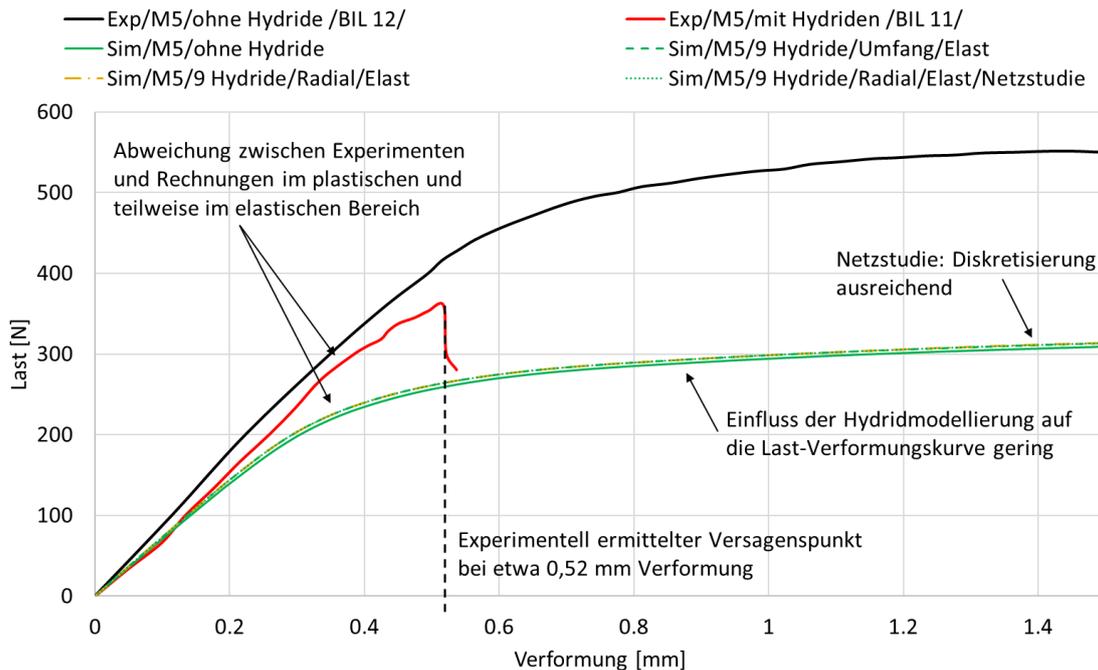


Abb. 4.62 Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation ohne und mit elastisch modellierten Hydriden zusammen mit experimentell ermittelten Kurven für ein Hüllrohr aus M5 ohne und mit Hydriden /BIL 11, BIL 12/

Zwischen den Experimenten und den Nachrechnungen zeigen sich insbesondere im plastischen Bereich signifikante Abweichungen. Ähnliche Diskrepanzen wurden bereits in /SON 10/ oder /BIL 20/ festgestellt und lassen sich möglicherweise auf eine Streuung der Werkstoffdaten zwischen einzelnen Chargen, eine zu konservative oder unzureichende Materialcharakterisierung, etwa durch Annahme eines isotropen ratenunabhängigen Verformungsverhaltens, oder ungewünschte Einflüsse in der Versuchsdurchführung, etwa in Form von Elastizität im Einspannbereich, zurückführen.

Alle Kurven mit elastischer Modellierung des Hydrids weichen nur unwesentlich von der Rechnung ohne Hydride ab. Grund hierfür ist, dass die Werkstoffeigenschaften der Hydride aufgrund ihres geringen Volumenanteils kaum Einfluss auf das globale Verformungsverhalten haben und durch die umgebende Hüllrohrmatrix überformt werden. Im Vergleichsspannungsverlauf (Abb. 4.63) macht sich der vom Hüllrohrwerkstoff abweichende E-Modul lediglich als stufenartig innerhalb des Hydrids leicht ansteigendes Spannungsniveau bemerkbar. Unter Zuhilfenahme des im Experiment /BIL 11/ ermittelten Versagenspunkts von ca. 0,52 mm Verfahrweg lässt sich analog zur Vorgehensweise in /SON 10/ das maximale Vergleichsspannungsniveau am Punkt des experimentellen Versagens an der Unterseite des Hydrids nahe der Platte im Modell mit neun radialen Hydriden ermitteln (Abb. 4.63). Dabei ergibt sich eine Versagensvergleichsspannung von ca. 625 MPa. Die Normalspannungen betragen 573 MPa in Umfangs- und -89 MPa in Radialrichtung. Im Hüllrohrwerkstoff (M5) werden dabei maximal etwa 627 MPa erreicht. Die Netzstudie bestätigt eine ausreichende Diskretisierung.

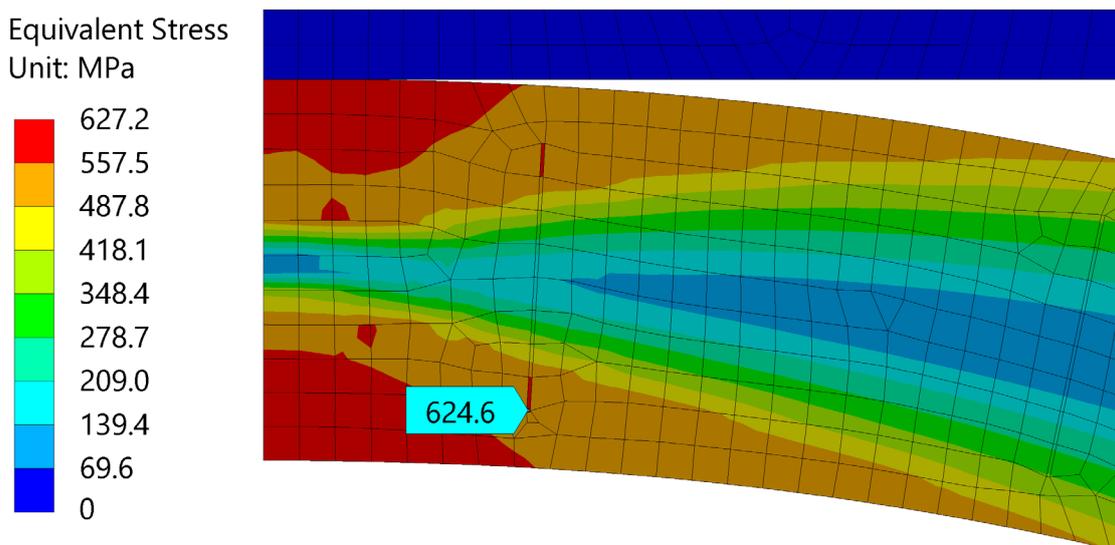


Abb. 4.63 Spannungsniveau im elastisch modellierten Hydrid nahe der Platte im Modell mit neun radialen Hydriden und Hüllrohrwerkstoff M5 zum Zeitpunkt des Versagens im Experiment

Abb. 4.64 zeigt eine experimentell ermittelte Last-Verformungskurve eines Ringdrucktests mit Hydriden aus /BIL11/ sowie die Ergebnisse der Grenzbetrachtungen durch Modellierung der Hydride als „Lücke“ und mit begrenzter Tragfähigkeit für den Hüllrohrwerkstoff M5.

Die Modellierung der Hydride als „Lücke“ führt bereits frühzeitig zu einer graduellen Abweichung der Last-Verformungs-Kurve zu geringeren Lastwerten, ohne dass eine genaue Integritätsgrenze bestimmt werden kann. Ursache ist die plastische Verformung des Ligaments um die „Lücke“ herum an den beiden äußeren Hydriden (Abb. 4.65). Dies lässt sich nur für die Variante mit neun radialen Hydriden beobachten, da bei den anderen Varianten im Bereich des Hydrids Druckkräfte vorliegen. In der Variante mit begrenzter Tragfähigkeit zeigt sich kein Einfluss, da diese über der Festigkeit des Hüllrohrwerkstoffs (vgl. Abb. 4.61) liegt.

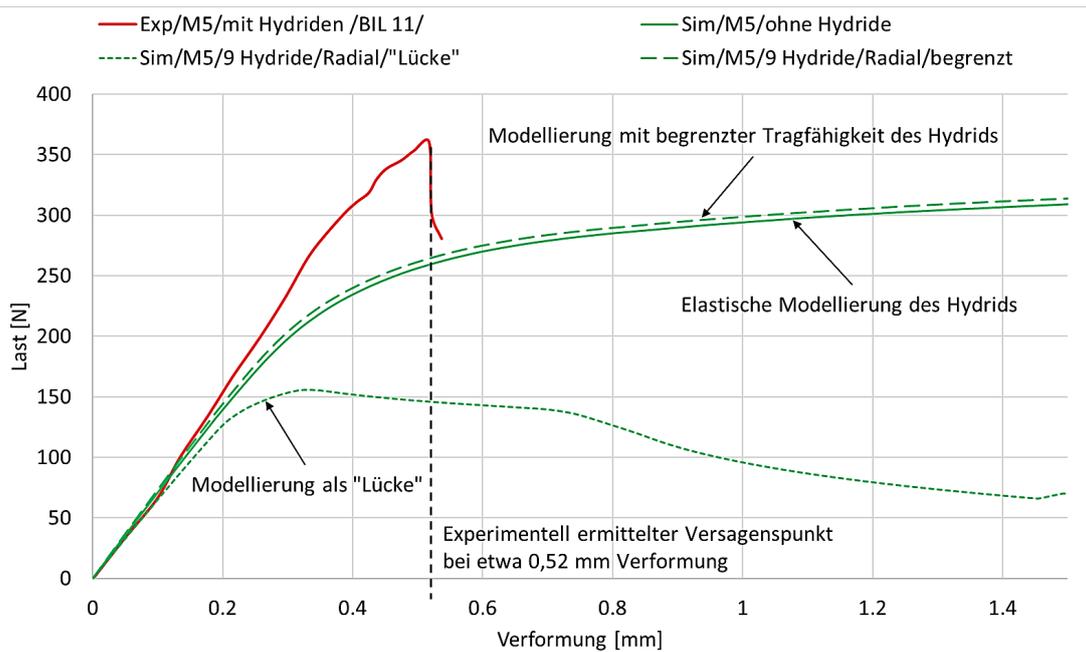


Abb. 4.64 Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation mit verschiedenartig modellierten Hydriden und experimentell ermittelte Kurve für ein Hüllrohr aus M5 mit Hydriden /BIL 11/

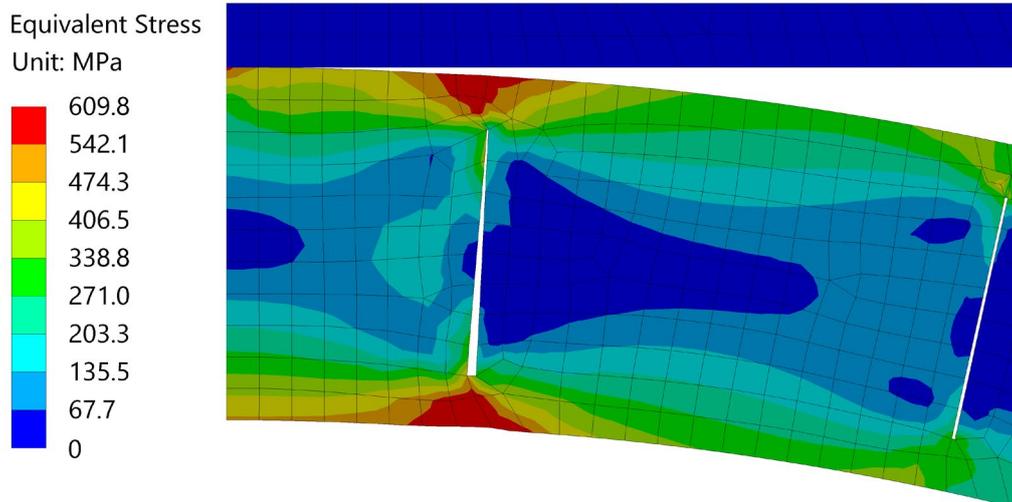


Abb. 4.65 Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids als „Lücke“ im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus M5 bei Verfahrweg 0,4 mm

Abb. 4.66 zeigt die für den Hüllrohrwerkstoff M5 ermittelten Kurven aus Abb. 4.64 zusammen mit den zugehörigen Kurven für den Hüllrohrwerkstoff Zry-4.

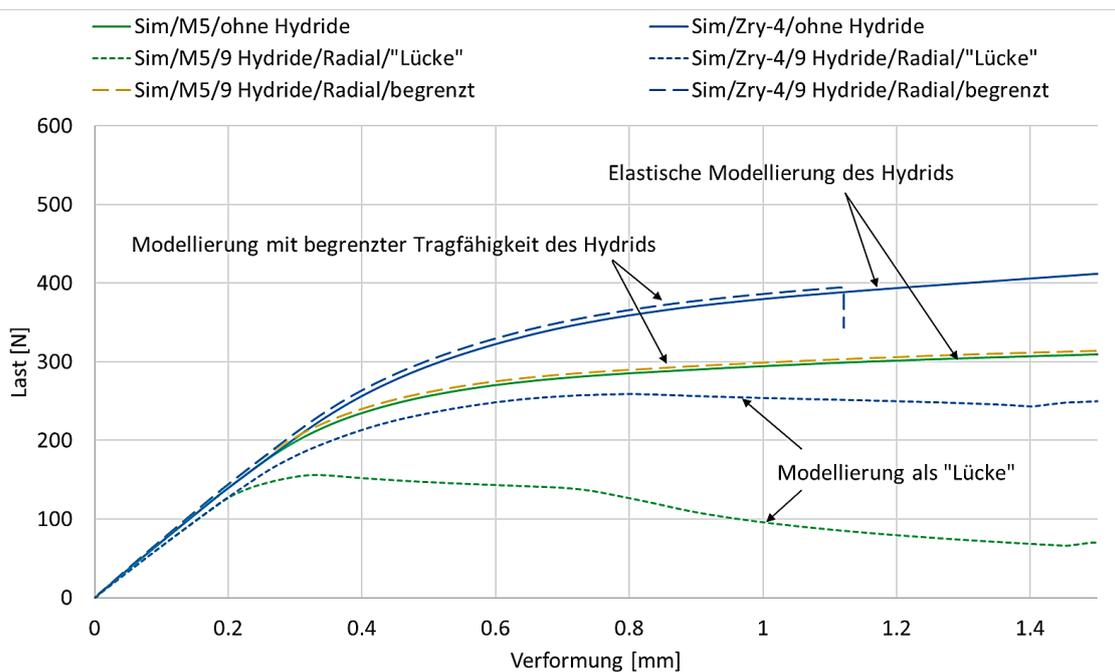


Abb. 4.66 Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation mit verschiedenartig modellierten Hydriden Hüllrohre aus M5 und Zry-4

Neben der allgemein unterschiedlichen Festigkeit im plastischen Bereich kommt es in der Variante mit Zry-4 und begrenzter Tragfähigkeit (Grenzspannung 677 MPa) bei einer Verformung von 1,04 mm zur Divergenz der numerischen Rechnung mit abruptem

Lastabfall als Hinweis auf eine reale Instabilität durch Überschreiten der Tragfähigkeit im Gesamtquerschnitt aus Hydrid und Ligament am Hydrid nahe der Platte. Ursache ist, dass im Gegensatz zur Simulation mit M5 die Festigkeit des Werkstoffs nun über dem des Hydrids liegt (vgl. Abb. 4.61). Die Tragfähigkeit wird bei einem Verfahrweg von 0,43 mm die Grenzbelastung des Hydrids erstmals erreicht und ein lokales Versagen im Bereich des Hydrids kann ab dann nicht mehr ausgeschlossen werden (Abb. 4.67). Im weiteren Verlauf bleibt die Spannung im Hydrid gleich, während sich die Spannung in der Hüllrohrmatrix bis zur Instabilität weiter erhöht (Abb. 4.68).

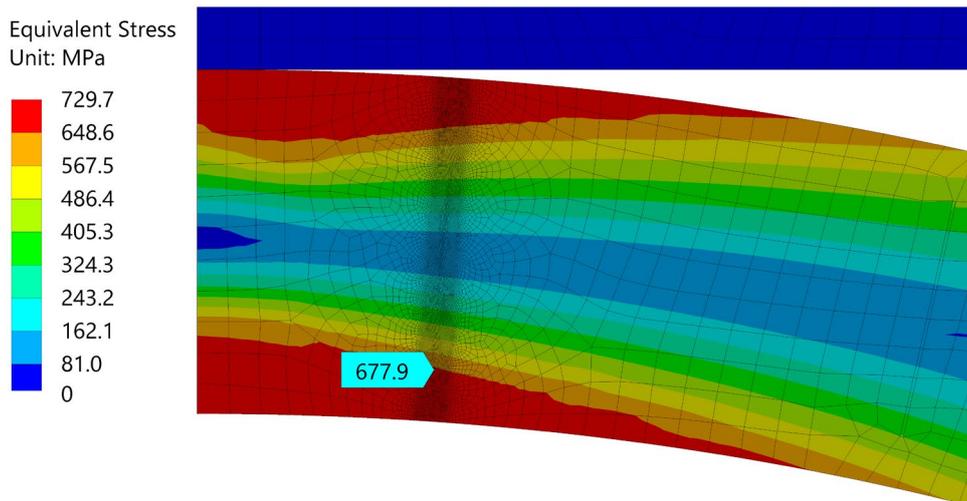


Abb. 4.67 Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids mit begrenzter Tragfähigkeit im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus Zr-4 bei Verfahrweg 0,43 mm, Tragfähigkeit des Hydrids am unteren Ende erreicht

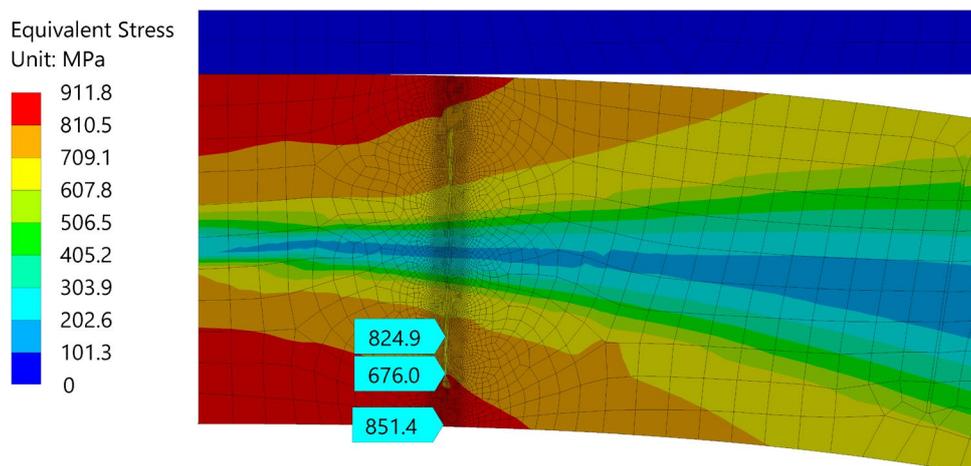


Abb. 4.68 Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids mit begrenzter Tragfähigkeit im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus Zr-4 bei Verfahrweg 1,04 mm, Tragfähigkeit von Hydrids und Restligament überschritten

4.10.2.3 Schlussfolgerungen und Ausblick

Im Rahmen des Vorhabens wurden zu ANL-Versuchen generische Simulationen des strukturmechanischen Verhaltens von Hüllrohren unter Berücksichtigung von Hydriden, die in Umfangs- bzw. radialer Richtung orientiert sind, durchgeführt. Dabei wurde erstmalig der Finite Elemente Code ANSYS Mechanical eingesetzt. In Verbindung mit der Kenntnis der experimentellen Versagenszeitpunkte wurden analog zur Vorgehensweise in /SON 10/ entsprechende Versagensspannungen im Bereich der Hydride berechnet. Zusätzlich wurden Grenzbetrachtungen durchgeführt, um den realen Versagensmodus anzunähern und den Punkt des Versagens grob einzugrenzen. Insgesamt lässt sich allerdings feststellen, dass mit Hilfe, der hier verwendeten rein kontinuumsmechanischen Modellierungsansätze eine mechanistische Reproduktion im Sinne einer komplexen Nachbildung des Versagensmechanismus nicht möglich ist. Daher sollten im nächsten Schritt Modellierungen der Delamination und der bruchmechanischen Effekte, wie sie beispielsweise in /SIM 22/ entwickelt wurden, durchgeführt werden. Auf dieser Basis ist die Entwicklung eines für den Anwendungsfall prognosefähigen Analysewerkzeugs möglich. Zusätzlich sollte die Werkstoffdatenbasis verbessert werden, um den Anforderungen dieser Modelle an die Vorhersage des Verformungsverhaltens, sowohl im elastischen als auch im plastischen Bereich, besser gerecht zu werden.

5 **Arbeitspaket 2 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen**

Die Validierung der in RS1552 erstmals aufgestellten Rechenkette ist nicht direkt möglich, da eine Behälteröffnung mit bestrahlten Brennelementen mangels entsprechend langer Lagerzeiten heute noch nicht zielführend sein kann. Um eine bessere Einschätzung der Belastbarkeit der erstellten Rechenkette zu erhalten, wurden in diesem Vorhaben detaillierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen der COBRA-SFS und TESPARED-Modelle durchgeführt.

5.1 **COBRA-SFS**

Der strukturierte und textbasierte Eingabedatensatz sowie die relativ kurze Simulationszeit einer stationären Berechnung mit COBRA-SFS ermöglicht die Anwendung des Monte-Carlo Verfahrens für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Hierzu wurden für das DWR- und das SWR-Behältermodell jeweils 20 beziehungsweise 23 Parameter ausgewählt und in festgelegten Grenzen zufallsbasiert variiert. Die Variation der Parameter erfolgte mit dem GRS-Programm SUSA unter Verwendung des *simple random sample* Verfahrens. Die variierten Parameter wurden anschließend mittels dem auf SUSA aufsetzenden Python-basierten Code-Paket SUnCISTT an zuvor festgelegten Stellen in den COBRA-SFS Eingabedatensatz übertragen /BEH 14/.

Die Auswertung der einzelnen Ausgabedatensätze erfolgte erneut mit SUnCISTT. Die statistische Auswertung der Ausgabedaten wurde anschließend mit SUSA durchgeführt. Die variierten Parameter sind in Tab. 5.1 aufgelistet, wobei die erste und letzte Zahl jeweils der unteren und oberen Grenze des variierten Bereichs entspricht. Der im *best estimate* Modell verwendete Wert ist in fett hervorgehoben. Die Variation aller Parameter wurde in den Grenzen jeweils gleichverteilt durchgeführt. Einzige Ausnahme ist der Parameter 3 (Anzahl Abstandshaltergitter), welcher diskret auf ganze Werte verteilt wurde. Die Unsicherheit und Sensitivität der errechneten Temperaturen wurde in beiden Behältermodellen an je vier Positionen analysiert. Diese sind in Abbildung Abb. 5.1 dargestellt. Position 1 entspricht hierbei dem heißesten Brennstab im zentralen Brennelement. Dies ist bei einer homogenen und symmetrischen Beladung stets die heißeste Stelle im ganzen Behälter. Position 2 entspricht dem heißesten Festkörper-Rechenknoten auf der Behälteroberfläche. Diese befindet sich an der Position, an welcher der Tragkorb dem Behältermantel am nächsten kommt. Die Positionen 3 und 4 entsprechen jeweils den

heißesten Knoten des Tragkorbes an den Positionen mit geringster und größter Entfernung zwischen Tragkorb und Behältermantel.

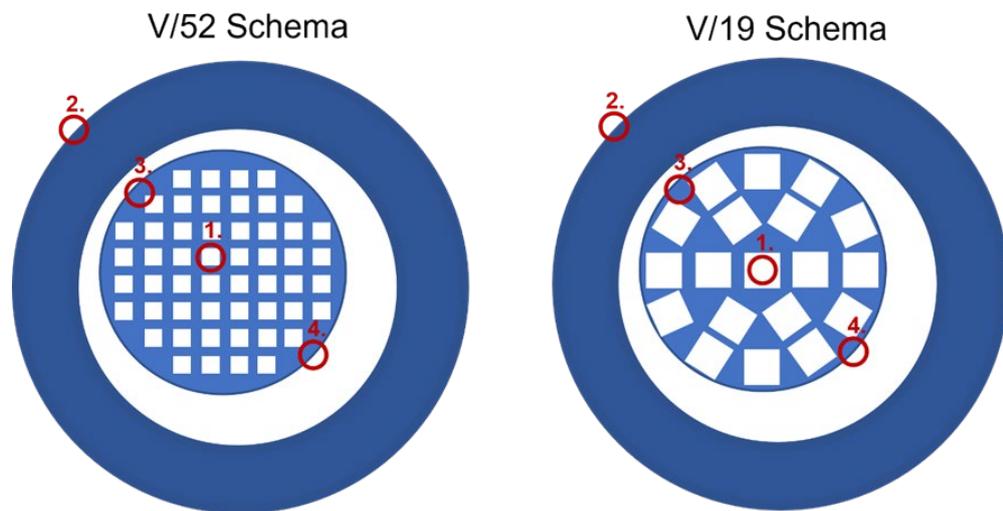


Abb. 5.1 Positionen der Temperaturbestimmungen zur Unsicherheitsanalyse in den generischen DWR und SWR-Behältern

Tab. 5.1 Auflistung der in der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse variierten Parameter für die generischen SWR- und DWR-Modelle

Fett hervorgehobene Zahlen sind jeweils die Werte im *best-estimate* Modell.

No.	Parameter	Variationsbereich DWR-Modell	Variationsbereich SWR-Modell
1	Behälterinnendruck	0.6 – 0.8 – 1.0 [bar]	0.6 – 0.8 – 1.0 [bar]
2	Umgebungstemperatur	15 – 25 – 35 [°C]	15 – 25 – 35 [°C]
3	Anzahl Abstandshaltergitter	2 – 7 – 12	2 – 7 – 12
4	Druckverlustfaktor an Abstandshaltergitter	0.5 - 5	0.5 - 5
5	Emissionsgrad Behältermantel (Außen-seite)	0.8835 – 0.93 – 0.9765	0.8835 – 0.93 – 0.9765
6	Emissionsgrad Aluminium	0.08 – 0.18 – 0.28	0.08 – 0.18 – 0.28
7	Emissionsgrad Stahl	0.38 – 0.48 – 0.58	0.38 – 0.48 – 0.58
8	Emissionsgrad Behältermantel (Innenseite)	0.15 – 0.25 – 0.35	0.15 – 0.25 – 0.35
9	Wärmeleitfähigkeit Aluminium	188 – 209 – 230 [W/mK]	188 – 209 – 230 [W/mK]
10	Wärmeleitfähigkeit Stahl	14.4 – 16 – 17.6 [W/mK]	14.4 – 16 – 17.6 [W/mK]
11	Wärmeleitfähigkeit Gusseisen	33.3 – 37 – 40.7 [W/mK]	33.3 – 37 – 40.7 [W/mK]
12	Wärmeleitfähigkeit Helium	90 – 100 – 110 [%]	90 – 100 – 110 [%]
13	Tragkorb Exzentrizität	0 – 100 [%]	0 – 100 [%]
14	Tragkorbspalt	0 – 1 – 4 [mm]	0 – 2 – 4 [mm]
15	Spaltabstand Tragkorb-Tragkorbschienen	0 – 0.5 – 1 [mm]	0 – 2 – 3 [mm]
16	Spaltabstand oberes Plenum	0 – 3.2 – 3.8 [mm]	0 – 3.2 – 3.8 [mm]

Tab. 5.2 Weiterführung der Tabelle Tab. 5.1

No.	Parameter	Variationsbereich DWR-Modell	Variationsbereich SWR-Modell
17	Nusseltzahl für Konvektion im Brennelement	3.29 – 3.66 – 4.03	3.29 – 3.66 – 4.03
18	Nusseltzahl für Konvektion im Heliumkanal	3.29 – 3.66 – 4.03	3.29 – 3.66 – 4.03
19	Wärmeausfuhrkoeffizient (Behältermantelfläche mit Umgebung)	4.90E-6 – 5.61E-6 – 6.34E-6	4.90E-6 – 5.61E-6 – 6.34E-6
20	Nachzerfallsleistung	34.5 – 36.7 – 39 [kW]	35.4 – 37.7 – 40 [kW]
21	Emissionsgrad Wasserkasten	--	0.4 – 0.8 – 0.9
22	Wärmeleitfähigkeit Zirkonium	--	13.7 – 15.2 – 16.7 [W/mK]
23	Wärmeleitfähigkeit homogenisierter Tragkorb	--	69 – 77 – 85 [W/mK]

5.1.1 Unsicherheitsanalyse der GRS-Behältermodelle

Die Auswertung der Unsicherheitsanalyse erfolgte über das untere und obere einseitige Toleranzlimit nach Wilks. Für das SWR- und DWR-Behältermodell ergeben sich, an den oben diskutierten Positionen, die in Abb. 5.2 dargestellten Unsicherheiten. Vergleicht man die Unsicherheiten beider Modelle an den vier verschiedenen Positionen so fällt direkt auf, dass das DWR-Modell größere Unsicherheiten hinsichtlich der Position 1 (Maximale Hüllrohrtemperatur), Position 3 (Tragkorbtemperatur minimaler Abstand) und Position 4 (Tragkorbtemperatur maximaler Abstand) aufweist. Zusätzlich sind die oberen und unteren Toleranzlimits des DWR-Modells an Position 1 und 4, hinsichtlich der Temperatur des *best estimate* Modells, stark asymmetrisch. Wobei das obere Toleranzlimit jeweils weiter von der Temperatur des „best estimate“ Modells entfernt liegt. Der Grund hierfür liegt in der asymmetrischen Variation des Tragkorbspaltes im DWR-Modell von 0-4 mm um den *best estimate* Wert von 1 mm. Im Vergleich hierzu ist der „best estimate“ Wert des Tragkorbspaltes im SWR-Modell 2 mm. Die Wahl eines unterschiedlichen „best estimate“ Wertes für beide Modell lässt sich vor allem auf einen Unterschied in der Modellierung des Tragkorbspaltes der Behälter zurückführen: Im Gegensatz zum DWR-

Behältermodell, wurde der Tragkorbmantel im SWR-Behältermodell explizit als ein Ring bestehend aus 38 Rechenkonten („slab-nodes“) modelliert (Abb. 4.5). Der Spalt zwischen Tragkorb und Behältermantel ist damit für die gesamte Tragkorboberfläche über den Kontakt der Tragkorbmantelknoten zu den inneren Behältermantelknoten definiert. Die für den direkten Wärmeaustausch zur Verfügung stehende Kontaktfläche beträgt damit 21 m².

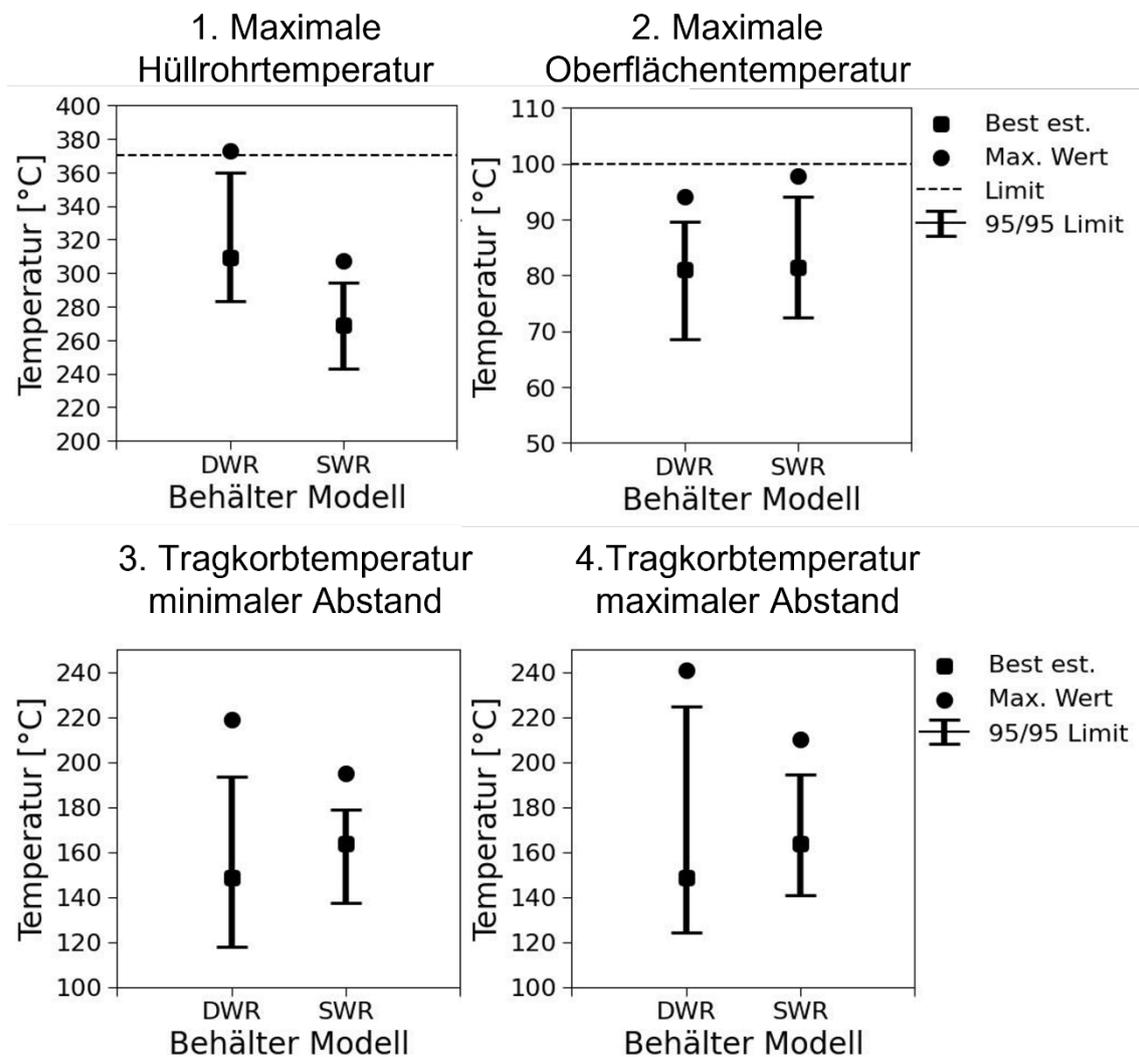


Abb. 5.2 Auswertung der Unsicherheitsanalyse der generischen DWR- und SWR-Behältermodelle

Zusätzlich stehen alle Tragkorbmantelknoten direkt im Festkörperkontakt zu den zentralen Knoten des Tragkorbs, wodurch ein effizienter Wärmetransfer auf den Tragkorbmantel simuliert werden kann. Im Gegensatz dazu wurde der Tragkorbmantel im DWR-Behältermodell nicht explizit abgebildet /BOL 20/. Die außenstehenden Brennelemente sind offen modelliert und stehen bzgl. Wärmeleitung und Wärmestrahlung im direkten

Kontakt mit den Behältermantel. Die über Knoten-zu-Knotenkontakt modellierte Oberfläche zwischen Tragkorb und Behältermantel beträgt daher nur 7,8 m². Dadurch wird die Wärmeausfuhr über Festkörperwärmeleitung aus den zentralen Tragkorbnoden erschwert. Das DWR-Modell ist daher, bei gleich Tragkorbspalt, hinsichtlich der Wärmeausfuhr deutlich konservativer als das SWR-Modell.

Um diesen Unterschied in der Modellierung zu berücksichtigen, wurde der „best-estimate“ Wert für den Tragkorbspalt im DWR-Modell lediglich mit 1 mm angenommen. Die Auswirkungen der unterschiedlichen Modellierung zeigen sich besonders deutlich am Beispiel der maximalen Hüllrohrtemperatur. Hier ergibt sich für das DWR-Modell eine Unsicherheit von knapp 80 °C im Bereich zwischen 280 °C bis 360 °C. Wobei die Temperatur des „best-estimate“ Modell bei knapp 310 °C liegt. Bemerkenswert ist, dass in den durchgeführten 400 Variationen lediglich ein Wert über dem deutschen technischen Limit für die maximale Hüllrohrtemperatur von 370 °C liegt /SPY 18/. Im Vergleich dazu ergibt sich für das SWR-Modell eine geringere Unsicherheit der maximalen Hüllrohrtemperatur von knapp 60 K zwischen den Konfidenzlimits von 240 °C und 300 °C. Das SWR-Modell sagt also überwiegend niedrigere Temperaturen voraus als das DWR-Modell. An diesem Punkt ist es wichtig zu erwähnen, dass die hier berechneten Konfidenzlimits direkt auf den gewählten Variationsparameterbereichen beruhen.

Da keine genauen Informationen über reale Unsicherheiten der Parameter in der freien Literatur verfügbar sind, wurde diese für die hier durchgeführte Analyse nach Expertenmeinung abgeschätzt. Aus dieser Analyse kann also keine Information über die Unsicherheit der Temperaturfelder in den realen CASTOR[®]-Behältern gewonnen werden. Die Analyse ermöglicht es lediglich, Informationen über den Einfluss verschiedener Parameter auf die generischen GRS-Behältermodelle zu erhalten. Auffällig ist auch, dass das DWR-Modell niedrigere Oberflächentemperaturen zeigt als das SWR-Modell. Der Grund hierfür liegt in der niedrigeren Mantelfläche des SWR-Modells. Dieses weist lediglich 42.4 m² auf während das DWR-Modell eine Mantelfläche von 45.5 m² auf. Zusätzlich ist die maximale Nachzerfallsleistung im DWR-Modell niedriger.

5.1.2 Sensitivitätsanalyse der generischen GRS-Behältermodelle

Zur genaueren Untersuchung der generischen GRS-Behältermodelle wurde auf Basis der oben beschriebenen Parametervariation eine Sensitivitätsanalyse mit dem GRS-Code SUSA durchgeführt. Da die ausgewerteten Temperaturen nicht normalverteilt sind, wurde eine Ranganalyse nach Spearman angewandt. Zur leichteren Einordnung der

Ergebnisse sind in den folgenden Abbildungen jeweils die Spearman- und die partiellen Spearman-Korrelationskoeffizienten abgebildet. Zusätzlich sind die Korrelationskoeffizienten im Bereich zwischen 0.4 und -0.4 durch gestrichelte Linien hervorgehoben. Koeffizienten zwischen diesen Grenzen werden als nicht signifikant angesehen.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur und der Oberflächentemperatur für das generische DWR-Behältermodell der GRS sind in Abb. 5.3 dargestellt. Hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur ergeben sich daher nach Spearman lediglich zwei einflussreiche Parameter, der Tragkorbspalt und die Nachzerfallsleistung. Berücksichtigt man zusätzlich die partiellen Spearmankoeffizienten (hier ist der Einfluss anderer Parameter auf die einzelnen Parameter reduziert), so kommen vier weitere einflussreiche Parameter, der Behälterinnendruck, die Umgebungstemperatur, die Heliumwärmeleitfähigkeit und die Nusseltzahl für den konvektiven Wärmeaustausch in den Brennelementen, hinzu.

Sensitivität maximale Hüllrohrtemperatur (Pos. 1) DWR-Behälter

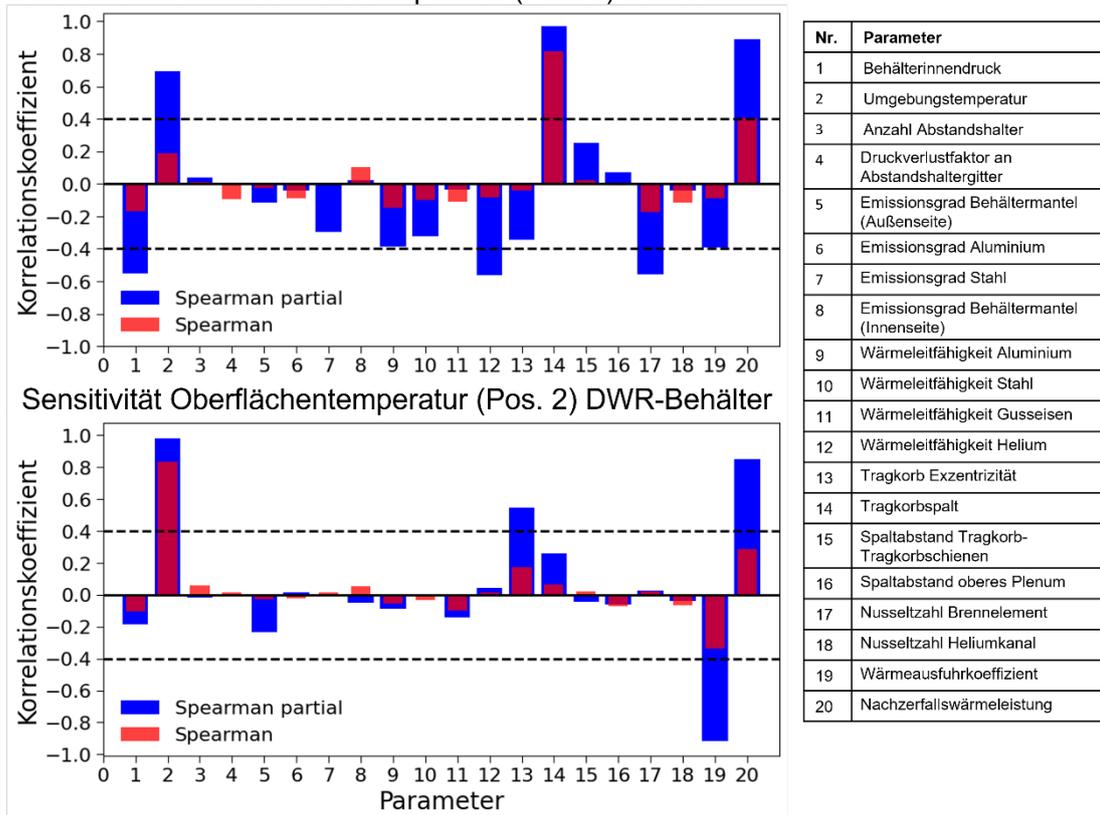


Abb. 5.3 Sensitivitätsanalyse des generischen DWR-Behältermodell hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur (oben) und der Oberflächentemperatur (unten)

Um den Unterschied, zwischen den Spearman- und den partiellen Spearmankoeffizienten auf dieses Modell besser einschätzen zu können, wurden die sechs einflussreichen Parameter in einer Einzeleffektanalyse in den in Tab. 5.1 aufgeführten Grenzen variiert. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.3 zusammengefasst.

Tab. 5.3 Einzeleffektanalyse der sechs einflussreichsten Parameter des GRS DWR-Behältermodell

Parameter	Variationsbereich	Maximale Hüllrohrtemperatur
1 Behälterinnendruck	0.6 – 1 bar	317.7 – 329.2 °C; Δ 11.5 K
2 Umgebungstemperatur	15 – 35 °C	315.7 – 330.2 °C; Δ 14.5 K
12 Wärmeleitfähigkeit Helium	90 – 110 %	318.4 – 328.3 °C; Δ 9.9 K
14 Tragkorbspalt	0 – 4 mm	300.2 – 367.6 °C; Δ 67.7 K
17 Nusseltzahl Brennelement	95 – 105 %	319.0 – 327.6 °C; Δ 8.6 K
20 Nachzerfallsleistung	94 – 106 %	295.5 – 323.1 °C; Δ 27.6 K

Aus der Einzeleffektanalyse wird deutlich, dass die zwei Parameter mit einem Spearman-Korrelationskoeffizient von über 0.4 deutlich größeren Einfluss auf die maximale Hüllrohrtemperatur haben als die Parameter, bei welchen nur der partielle Spearman Koeffizient größer 0.4 ist. Nichtsdestotrotz liegt der Einzeleinfluss der anderen Parameter im Bereich von 10 K und ist daher nicht zu vernachlässigen.

Hinsichtlich der Behälteroberflächentemperatur zeigen sich vier einflussreiche Parameter: die Umgebungstemperatur, die Tragkorbbexzentrizität, der Wärmeausfuhrkoeffizient für den Wärmeübergang vom Behältermantel zur Umgebung und die Nachzerfallsleistung. Dies zeigt, dass die Oberflächentemperatur nur von Faktoren beeinflusst wird, welche den Wärmeaustausch mit der Umgebung oder die Gesamtleistung des Behälters beeinflussen. Unter den 20 variierten Parametern sind dies lediglich die Umgebungstemperatur, der Wärmeausfuhrkoeffizient und die Nachzerfallsleistung. Die Tragkorbbexzentrizität ist hier ein Spezialfall, da sich die Oberflächentemperatur nur an der Position der Annäherung zwischen Tragkorb und Behältermantel erwärmt. An der gegenüberliegenden Seite verringert sich die Oberflächentemperatur, wodurch die mittlere Oberflächentemperatur nahezu unverändert bleibt. Dies zeigt sich auch daran, dass die

Tragkorbbexzentrizität nur einen sehr geringen Einfluss auf die maximale Hüllrohrtemperatur hat. Die Temperatur im Zentrum des Behälters wird durch den mittleren Wärmeausfuhrkoeffizienten des Tragkorbes bestimmt und dieser ändert sich bei einer Verschiebung des Tragkorbs nicht.

Die gleiche Analyse wurde für das SWR-Behältermodell durchgeführt. Hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur zeigen sich erneut unter Berücksichtigung des partiellen Spearman Korrelationskoeffizient sechs einflussreiche Parameter (siehe Abb. 5.4).

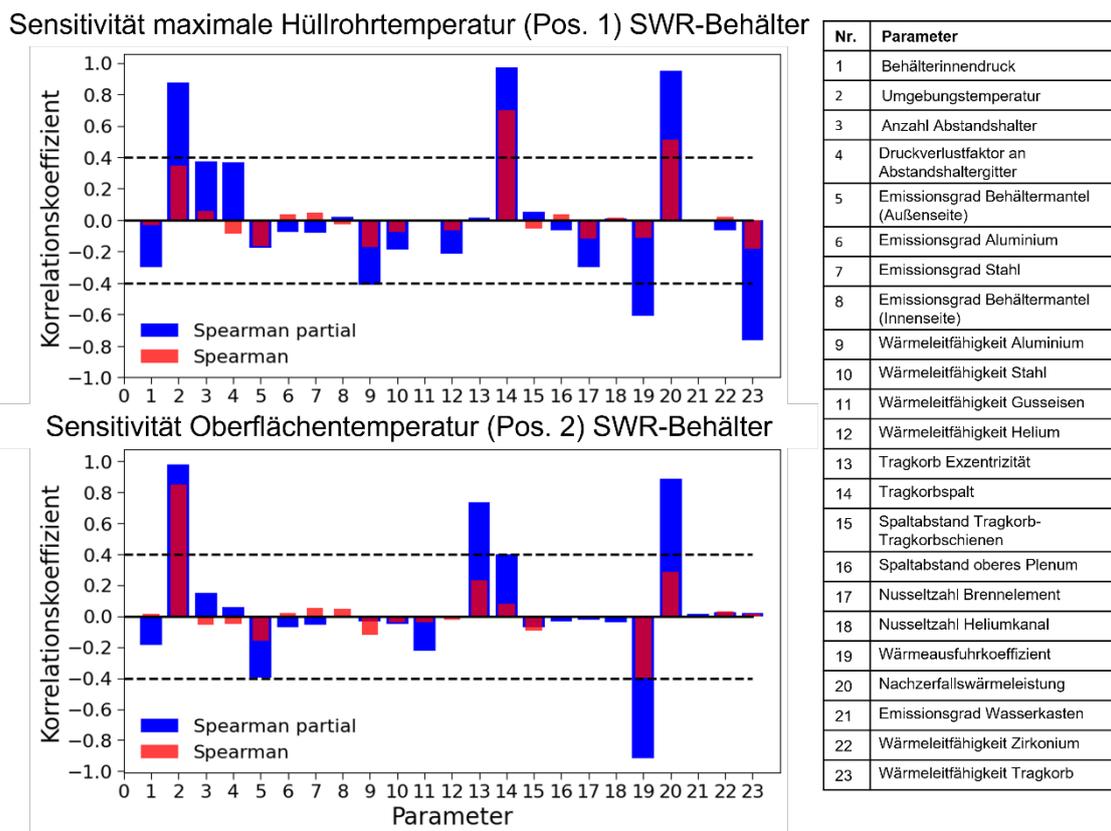


Abb. 5.4 Sensitivitätsanalyse des generischen SWR-Behältermodell hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur (oben) und der Oberflächentemperatur (unten)

Erneut zeigen die Umgebungstemperatur, der Tragkorbspalt, der Wärmeausfuhrkoeffizient und die Nachzerfallsleistung einen signifikanten Einfluss. Interessanterweise ist der Einfluss des Behälterinnendrucks und der Nusseltzahl für den konvektiven Wärmeaustausch in den Brennelementen im SWR-Behälter nur gering. Dafür zeigt die Wärmeleitfähigkeit der homogenisierten Tragkorbkomponenten und der Aluminiumwärmebleche einen deutlich größeren Einfluss. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Wärmeausfuhr im generischen SWR-Behältermodell stärker durch Festkörperwärmeleitung bestimmt wird.

Im Gegensatz dazu ist der Einfluss der konvektiven Wärmeausfuhr im DWR-Behältermodell größer. Begründet werden kann dies darüber, dass die Brennelemente im Tragkorb des SWR-Behälters kompakter gepackt sind und keine inneren großen Heliumkanäle vorhanden sind. Hinsichtlich der Behälteroberflächentemperatur ist kein signifikanter Unterschied der Sensitivitäten zwischen den beiden Behältermodellen zu erkennen.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse der Brennstabtemperaturen in den äußeren Brennelementen ist in Abbildung Abb. 5.5 dargestellt. Grundsätzlich zeigt sich ein vergleichbares Bild zu den Brennstabtemperaturen der zentralen Brennelemente. Im Gegensatz ist hier jedoch der Einfluss des Behälterinnendrucks in beiden Modellen vernachlässigbar. Dies lässt auf eine geringere Abhängigkeit der Wärmeausfuhr von der Naturkonvektion schließen. Aufgrund der Nähe zum Tragkorbrand zeigt sich zusätzlich ein ausgeprägter Einfluss der Tragkorbverschiebung.

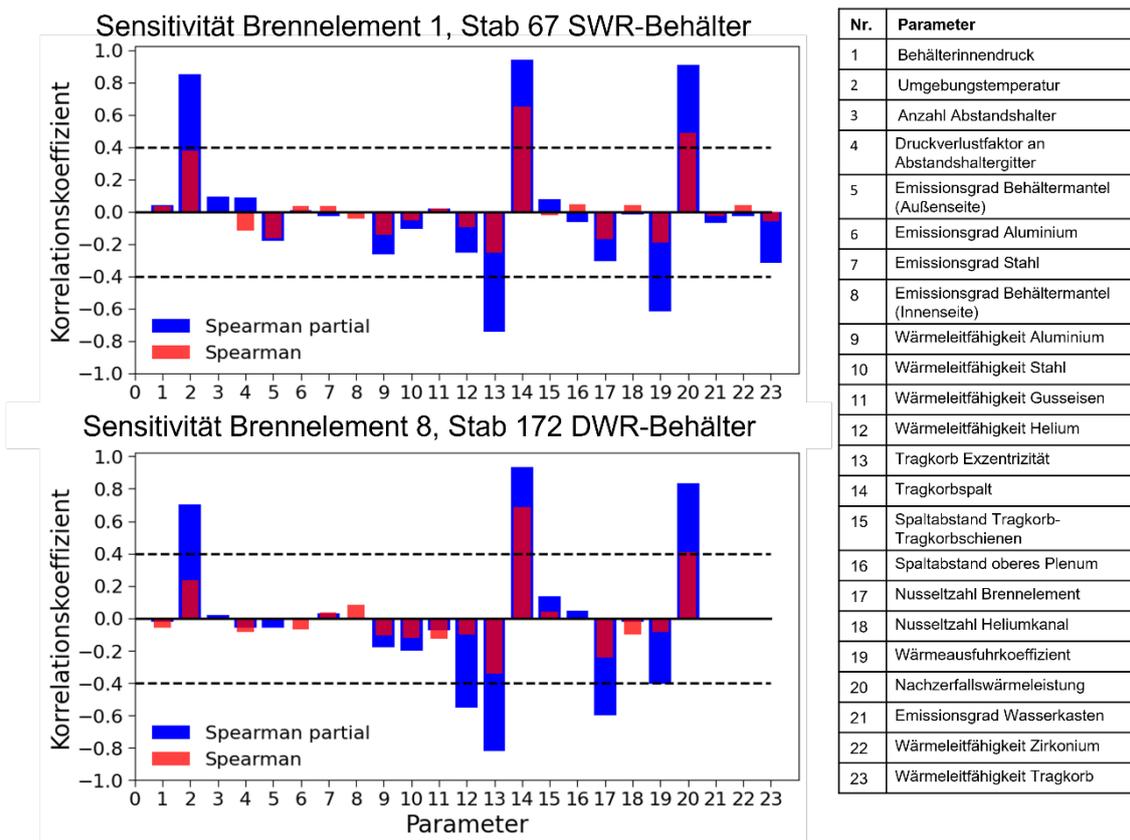


Abb. 5.5 Sensitivitätsanalyse der generischen SWR- und DWR-Behältermodelle hinsichtlich der Hüllrohrtemperatur in den äußeren Brennelementen

Zusammenfassend konnten in dieser Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse drei Parameter identifiziert werden, welche auf das gesamte Temperaturfeld der Transport- und Lagerbehälter einen großen Einfluss aufweisen. Dies sind die Umgebungstemperatur, die Nachzerfallsleistung und der Tragkorbspalt. Für eine aussagefähige Behältermodellierung sind diese Parameter daher essenziell.

Die Umgebungstemperatur eines Transport- und Lagerbehälter während der Zwischenlagerung hängt vor allem von der Standposition im Zwischenlager und der Auslastung des Lagers ab. Zusätzlich wird die Lufttemperatur im Lager aber auch durch das Klima am Standort beeinflusst. Aufgrund der großen Masse der Behälter spielen Tagestemperaturen nur eine untergeordnete Rolle, viel wichtiger ist hier die Monatsmitteltemperatur. Zur Analyse eines gegebenen Behälters lässt sich dabei die Umgebungstemperatur jedoch relativ einfach durch Temperaturmessungen bestimmen. Daher ist dieser Parameter nur einer geringen Unsicherheit unterlegen. Die Nachzerfallsleistung (NZL) der Brennelemente hängt von der Leistungshistorie im Reaktor sowie der Abklingzeit ab. Nach der Einlagerung ist die NZL jedoch nicht mehr per Messung zugänglich. Auch vor Einlagerung wird die NZL im Allgemeinen nicht gemessen, sondern lediglich mit einem geeigneten Abbrandcode berechnet. Generell kann bei der Simulation der NZL von einem Fehler von +6 % für SWR-Brennelemente und +4 % für DWR-Brennelemente ausgegangen werden [ILA 21]. Abdeckend wurde in dieser Analyse für beide Brennelementtypen eine Unsicherheit von +6 % angenommen.

Die Einzeleffektanalyse zeigte für die Variation der NZL ein Unterschied von knapp 28 °C hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur im DWR-Behältermodell. Dieser Parameter sollte daher immer möglichst genau eingegrenzt werden. Dies kann beispielsweise durch die Reduzierung der Unsicherheiten in der Abbrandsimulation erreicht werden.

Der dritte und mit Abstand einflussreichste Parameter hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur ist der Tragkorbspalt. Der Abstand zwischen Tragkorb und Behältermantel ist von vielen Faktoren abhängig, beispielsweise den Fertigungstoleranzen für die Behälterherstellung, der Temperatur im Behälter und der Wärmedehnung der Behälterstrukturen sowie die Positionierung bzw. Zentrierung des Tragkorbes in der Behälterkavität. Sowohl die Fertigungstoleranzen als auch materialspezifische Daten zur Wärmedehnung der Tragkorbkomponenten sind nicht frei zugänglich. Auch die Prozedur zur Zentrierung des Tragkorbs, während der Behälterbildung ist nicht frei zugänglich und daher unbekannt. Aus diesen Gründen ist es aktuell nur möglich, konservative Schätzwerte zum Tragkorbspalt in der Modellierung anzuwenden (siehe auch Kap. 4.4).

Die hier beschriebenen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen legen den Grundstein für eine realistischere und weniger konservative Behältermodellierung. Die Hüllrohrtemperatur ist einer der wichtigsten Faktoren für potenzielle Hüllrohr-degradierende Mechanismen. Weniger konservative Vorhersagen der Hüllrohrtemperatur ermöglichen genauere Vorhersagen des Brennstabverhaltens während der Zwischenlagerung. Die als einflussreich identifizierten Parameter stellen hierbei Ansatzpunkte für eine Verbesserung der Modelle dar. Allerdings wird für eine solche Verbesserung Detailwissen zu den jeweiligen Behältern benötigt, welches der GRS zum aktuellen Zeitpunkt nicht zugänglich ist.

5.2 TESPА-ROD

Zur Analyse des Brennstabverhaltens in der längerfristigen Zwischenlagerung verwendet die GRS den hauseigenen Brennstabcode TESPА-ROD. Im Rahmen des Vorhabens RS1552 wurde mehrere neue Modelle und Korrelationen basierend auf experimentellen Daten in TESPА-ROD implementiert. Viele der Modelle zur Simulation des Brennstabverhaltens sind aufgrund der unzureichenden Datenlage bisher noch nicht ausreichend validiert und verifiziert. Um eine Einschätzung über die Aussagefähigkeit der Zwischenlagersimulationen mit TESPА-ROD zu erhalten, wurden ebenfalls Monte-Carlo basierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt. Hierzu wurden zehn unabhängige Brennstabparameter in 150 Szenarien zufallsbasiert variiert. Zur Simulation des Brennstabverhalten wurde ein DWR-Szenario mit einem Zircaloy-4 Brennstab und einem mittleren Wasserstoffgehalt von 295 wppm ausgewählt. Dieses Basisszenario ist angelehnt an den GRS *Thermomechanical Fuel Rod Behaviour* Benchmark, welcher in Kap. 5.1.2. im Detail beschrieben ist. Das verwendete Szenario beginnt mit der Abschaltung des Reaktors, es folgen fünf Jahre Nasslagerung bei 40 °C. Anschließend wird die Einlagerung in den Transport- und Lagerbehälter und eine trockene Lagerung von 95 Jahren simuliert. Zusätzlich wurden weitere neun Eingabedaten basierend auf den Zufallsergebnissen der unabhängigen Parameter variiert. Die variierten Parameter sind in Tab. 5.4 aufgelistet, wobei die erste und die letzte Zahl jeweils der unteren und oberen Grenze des variierten Bereichs entsprechen. Der im *best-estimate* Modell verwendete Wert ist in fett hervorgehoben. Hierbei wurden alle Parameterbereiche basierend auf Erfahrungswerten festgelegt. Einzige Ausnahme ist die Temperatur, hier wurden die Grenzen und der „best-estimate“ Wert durch die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse für den generischen GRS DWR-Behälter bestimmt. Die Grenzen entsprechen hierbei den oberen und unteren 95 % Konfidenzintervallen und der „best-estimate“ Wert der

Hüllrohrtemperatur des „best-estimate“ Models. Dies stellt eine Verbindung zwischen den beiden Analysen her und erlaubt Aussagen über den Einfluss der Unsicherheiten der gesamten Rechenkette auf die Simulation des Brennstabverhaltens.

In der GRS-Rechenkette ist die einzige direkte Abhängigkeit zwischen der Thermohydrauliksimulation mit COBRA-SFS und der Brennstabsimulation mit TESP-ROD die Übergabe der Temperaturdaten. Eine gekoppelte Unsicherheitsanalyse ist daher nicht nötig, und die Unsicherheit der Rechenkette kann, wie hier durchgeführt, durch zwei getrennte Analysen bestimmt werden. In der Unsicherheitsanalyse zu COBRA-SFS wurden die Hüllrohrtemperaturen allerdings nur zum Zeitpunkt der Einlagerung untersucht. Dies entspricht in dem hier verwendeten Szenario dem Zeitpunkt von fünf Jahren und es liegt keine direkte Information für die Unsicherheiten zu den späteren Zeitpunkten vor. Aus diesem Grund wurde hier zunächst ein einfaches Zwischenlagerszenario mit dem „best-estimate“ Behälter über den Zeitraum von 100 Jahren simuliert. Basierend auf den so gewonnenen Temperaturdaten wurden acht zusätzliche Stützstellen an den Zeitpunkten 7, 10, 30, 50, 70, 90, 100 ausgewählt. Mit SUSA wurde nun jeweils die Temperatur zu Beginn der Trockenlagerung zufallsbasiert in den festgelegten Grenzen variiert. Anschließend wurde die prozentuale Abweichung vom „best-estimate“ Wert (Tab. 5.4) berechnet. Basierend auf dieser Abweichung wurden anschließend die Temperaturen an den Stützstellen berechnet.

Tab. 5.4 Auflistung der in der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Simulation des Brennstabverhalten mit TESP-ROD variierten Parameter

Fett hervorgehobene Zahlen sind jeweils die Werte im „best-estimate“ Rechenfall.

No.	Parameter	Abkürzung	Variationsbereich
1	Hüllrohraußendurchmesser	ODC	9.48 – 9.50 – 9.52 [mm]
2	Pelletdurchmesser	ODP	8.03 – 8.05 – 8.07 [mm]
3	Hüllrohrwandstärke	TOC	0.57 – 0.575 – 0.58 [mm]
4	Pelletrauigkeit	ROC	0.0018 – 0.0028 – 0.0038 [mm]
5	Spaltgasfreisetzung	FGR	3 – 7.5 – 12 [%]
6	Hüllrohrdruckbeaufschlagung	HeP	20 – 22.5 – 25 [bar]
7	Abbrand	BU	55 – 65 [GWd/THM]
8-15	Hüllrohrtemperatur	T5 – T13	283 – 309 – 360 [°C]
16	Pellethüllrohrspalt	GAP	berechnet
17	Heliumfreisetzung	HeR	0.00001 – 0.03 – 0.06 [%]
18	Pelletschwellfaktor	PSW	0 – 0.0001 – 1

Mit dem GRS-Code SUSA wurden aus den in Tab. 5.4 aufgelisteten Parametern je 200 Zufallswerte erzeugt und in 200 unterschiedliche TESP-ROD Eingabedatensätze überführt. Die so variierten Zwischenlagerszenarien wurden anschließend mit TESP-ROD simuliert und mit SUSA ausgewertet. Die Auswertung erfolgte hierbei über die in Tab. 5.5 aufgelisteten Ausgabeparameter. Die Auswertung der Unsicherheitsanalyse erfolgte auf Basis einer zweiseitigen Ranganalyse nach Wilks mit den Konfidenzlimit von 0,95.

Tab. 5.5 Auflistung der in der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Simulation des Brennstabverhalten mit TESPA-ROD analysierten Parameter

No.	Parameter	Abkürzung	Einheit
1	Umfangsspannung	SCH	MPa
2	Innendruck	PRE	bar
3	Spaltweite	SPW	µm
4	Anteil umfangsgerichteter Hydride	HYA	ppm
5	Anteil radialer Hydride	HYR	ppm
6	Brennstoffaußenradius	FOR	mm

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse für alle sechs Parameter sind in Abb. 5.6 dargestellt. Es zeigt sich, dass die variierten Parameter nur geringen Einfluss auf die Umfangsspannung aufweisen. Über das gesamte Szenario entstehen die höchsten Umfangsspannung stets zu Beginn der Trockenlagerung, da hier ist die Temperatur des Hüllrohrs am höchsten ist. Es zeigt sich für die Umfangsspannung eine Variation im Bereich zwischen 40 und 60 MPa. Ab der Einlagerung sinkt die Umfangsspannung stetig, dies kann auf die Abkühlung des Behälters zurückgeführt werden. Ein ähnlicher Trend ist auch für den Hüllrohrinnendruck zu erkennen, welcher im Maximum zwischen 50 und 67 bar variiert. Interessanterweise zeigt sich für die maximal Werte des Innendruck und der Umfangsspannung ein Minimum nach knapp 75 Jahren, danach beginnen beide Werte erneut anzusteigen. Dies kann auf die Freisetzung von Helium aus der Brennstoffmatrix zurückgeführt werden, welche ab diesem Zeitpunkt die temperaturbedingte Druckabnahme überkommen. Der Spaltabstand variiert in dieser Analyse zum Ende des Szenarios zwischen 48 und 82 µm und liegt im Mittel bei knapp 62 µm. Selbst zu Beginn des Szenarios werden bereits sehr hohe Spaltweiten in einem ähnlichen Bereich vorhergesagt. Vergleicht man die hier von TESPA-ROD vorhergesagten Werte mit den Simulationsergebnissen anderer Brennstabcodes im GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten in der verlängerten Zwischenlagerung (Kap. 7.1), so zeigt sich, dass die TESPA-ROD Vorhersagen deutlich höher sind. Von den Benchmark Teilnehmer wurden Spaltweiten von 0-12 µm vorhergesagt. Zu Beginn eines Zwischenlagerszenarios macht TESPA-ROD eine einfache Abschätzung des Brennstabzustands basierend auf dem

mittleren Stababbrand. Diese bildet das im Reaktor auftretende Aufschumpfen des Hüllrohrs auf den Brennstoff und den damit verbundenen Spaltschluss nicht ausreichend ab.

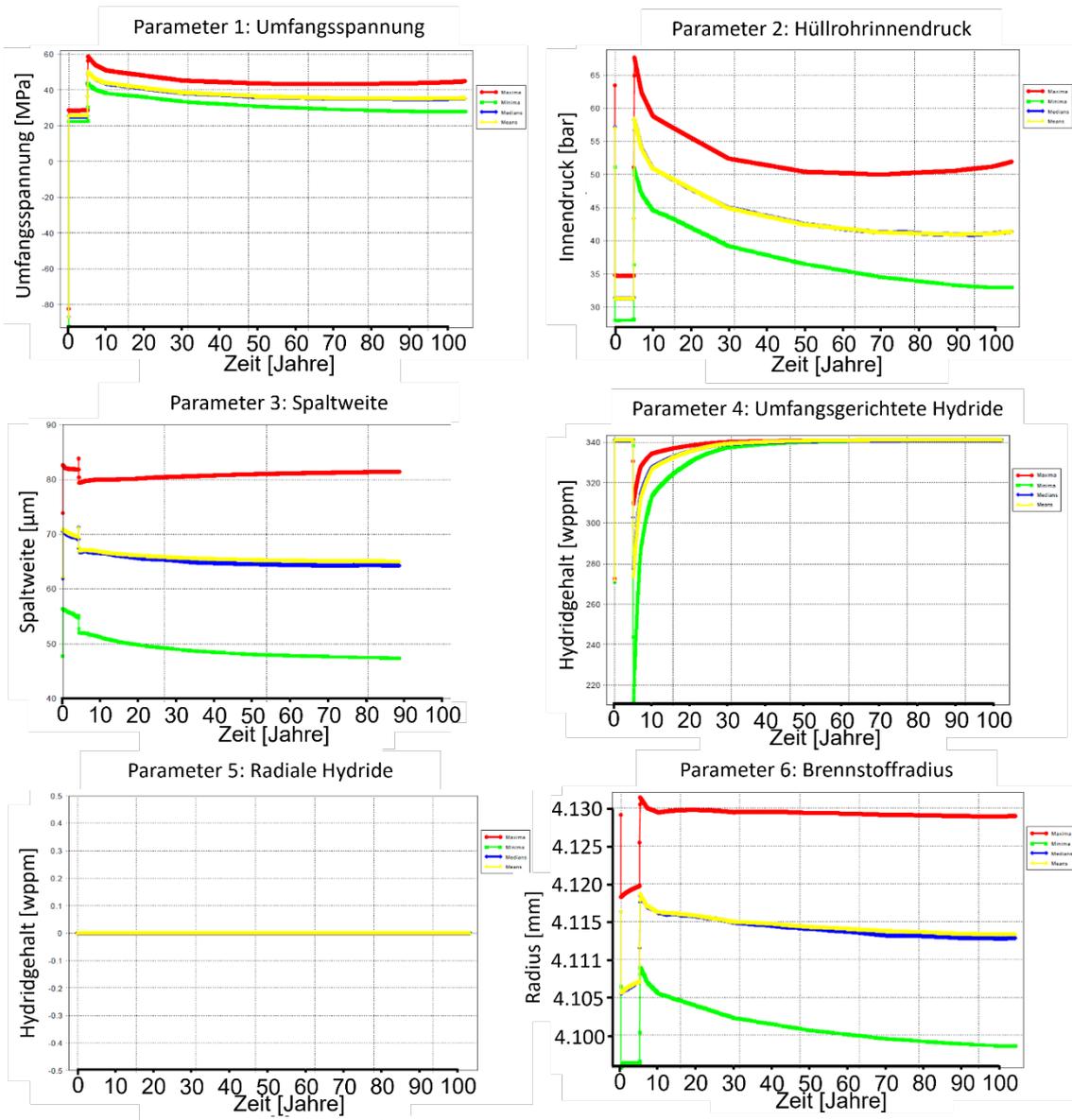


Abb. 5.6 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse in 200 Zwischenlager szenarien für sechs verschiedene Parameter

Dies zeigt den Bedarf zur Weiterentwicklung von TESP-ROD, um eine verbesserte Abschätzung des Zustandes eines Brennstab zu Beginn der Zwischenlagerung zu ermöglichen. Als vierter und fünfter Parameter wurde die Konzentration an umfangsgerichteten und radialen Hydriden analysiert. Dies zeigt, dass es über alle 200 Szenarien nie zur Bildung von radialen Hydriden kam. Der Grund hierfür ist die geringe Umfangsspannung, welche im Maximum lediglich 60 MPa betrug. Höhere Umfangsspannungen entstehen zum Beispiel für höhere Brennstabtemperaturen, diese waren aber im Maximum durch

die Unsicherheitsanalyse des generischen DWR-Behälters begrenzt. Zusätzlich können aufgrund des Schwellens des Brennstoffes und dem daraus entstehenden Festkörperdruck hohe Umfangsspannungen entstehen. Dies wurde jedoch durch die durchgängig hohen Spaltabstände verhindert. So zeigt sich hier lediglich der Effekt der Hüllrohrtemperatur durch eine langsamere oder schnellere Ausscheidung der Hydride, wobei sich der Großteil aller Hydride im Zeitraum zwischen 5 und 35 Jahre ausscheidet.

Der sechste ausgewertete Parameter ist der Radius des Brennstoffpellets. Dieser Parameter verdeutlicht vor allem den Einfluss des konservativen Modells zur Simulation des Brennstoffschwellens. In dieser Analyse zeigt sich eine Differenz des Brennstoffradius zwischen maximal und minimal Wert von ungefähr 30 μm . Während sich die höchsten Werte durchweg zu Beginn der Trockenlagerung ergebend ist der Durchmesser während der Nasslagerung am kleinsten. Dies lässt erneut einen starken Einfluss der Brennstabtemperatur vermuten. Am deutlichsten ist der Einfluss des Pelletschwellens während der Nasslagerung. Hier ist die Brennstabtemperatur konstant aber der Brennstoffradius nimmt im Mittel deutlich zu. Interessanterweise reicht das Brennstoffschwellen während der Trockenlagerung nicht aus, um die temperaturbedingte Radiusabnahme zu überkommen. Dies zeigt sich im Verlauf der, mit *Maxima* gekennzeichneten Kurve, welche über die Zeit der Simulation näherungsweise, konstant bleibt. Insgesamt zeigt sich aus dieser Unsicherheitsanalyse, dass für keinen der ausgewerteten Parameter ein Klippeneffekt zu erkennen ist. Alle Parameter ändern sich über die Zeit der Trockenlagerung kontinuierlich. Zusätzlich lässt sich für alle Parameter ein starker Einfluss der Temperatur vermuten.

Der Einfluss der übrigen Eingabedaten wurde anschließend über eine Sensitivitätsanalyse im Detail analysiert. Diese Ergebnisse sind in Abb. 5.7 und Abb. 5.8 dargestellt. Abgebildet sind jeweils die Sensitivitäten der Ausgabeparameter hinsichtlich der variierten Eingabeparameter über den gesamten Simulationszeitraum von 100 Jahren. Im direkten Vergleich der Sensitivitäten der Umfangsspannung und des Innendrucks fällt die Ähnlichkeit der Ergebnisse auf. In TESP-ROD wird die Umfangsspannung bei gleichbleibender Hüllrohrwandstärke und dem Ausbleiben einer Pellet-Hüllrohrinteraktion hauptsächlich durch den Hüllrohrinnendruck bestimmt. Eine Korrelation zwischen den Ausgabeparametern ist daher zu erwarten. Bis zur Hälfte des Simulationszeitraums zeigen sich hinsichtlich der Spaltgasfreisetzung (Par 5) und der Temperatur (Par 8-15) hohe Korrelationen, welche für spätere Zeitpunkte kontinuierlich abfallen. Als dritter einflussreicher Parameter konnte hier die Heliumfreisetzung identifiziert werden, wobei sich der

Einfluss hier über den Simulationszeitraum fortwährend erhöht. Dieser Verlauf ist nachvollziehbar, da die Heliumfreisetzung ein kontinuierlicher Prozess ist und sich das freigesetzte Gas dauerhaft im freiem Stabvolumen ansammelt und so den Innendruck erhöht. Interessanterweise zeigt der Abbrand deutlich geringeren Einfluss, obwohl zum Beispiel der Alphazerfall in Realität eine starke Abbrandabhängigkeit aufweist /BOL 19b/. Diese Abhängigkeit ist in TESP-ROD aktuell jedoch nicht implementiert und der Alphazerfall ist dauerhaft auf einen Abbrand von 65 GWd/tSM normiert. Für realistischere Simulationsergebnisse sollte in der Zukunft eine Abbrandabhängigkeit implementiert werden.

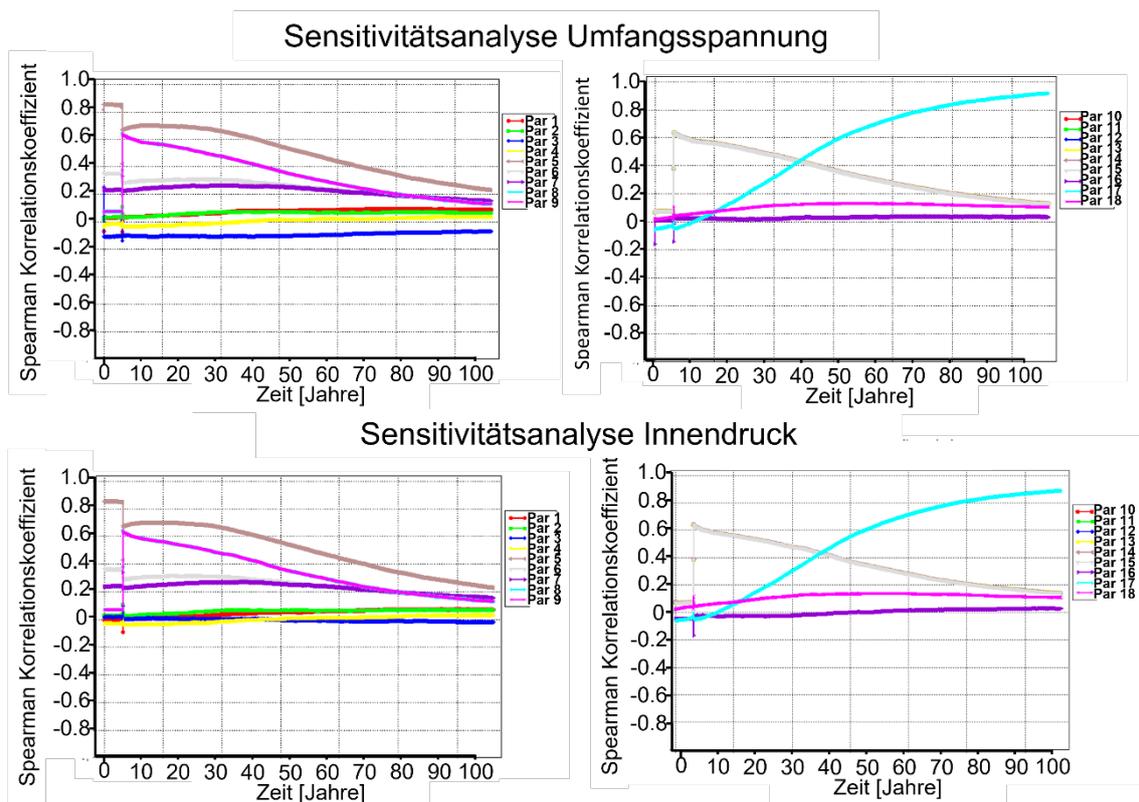


Abb. 5.7 Sensitivitätsanalyse der Umfangsspannung und des Hüllrohrinnendruck simuliert mit TESP-ROD für ein Zwischenlagerszenario

Die Spaltweite zeigt eine starke positive Abhängigkeit vom Hüllrohraußendurchmesser und eine negative Abhängigkeit vom Pelletdurchmesser und der Hüllrohrwandstärke. Diese Einflüsse sind nachvollziehbar, da diese Parameter durch die Brennstabgeometrie direkt miteinander verknüpft sind. Zusätzlich zeigt das Pelletschwellen ausgeprägten negativen Einfluss, da dies direkt den Pelletdurchmesser beeinflusst. Als letzter einflussreicher Parameter zeigt der Abbrand einen konstant negativen Einfluss auf die Spaltweite. Dies kann unter anderem über das in TESP-ROD implementierte,

abbrandabhängige, Modell zur Relokation des Brennstoffes erklärt werden. Hinsichtlich des Brennstoffdurchmessers zeigt sich ein starker positiver Einfluss des Hüllrohraußendurchmessers. Dieser Zusammenhang ist nicht direkt offensichtlich, lässt sich aber erneut über das Brennstoffrelokationsmodell erklären. Zum Beginn einer Simulation wird in TESP-ROD eine Abschätzung des Pellet-Hüllrohrspaltes durchgeführt. Anschließend wird, wenn der Abbrand des Pellets größer als 5 GWd/TSM ist, eine Relokation des Brennstoffes durchgeführt. Diese Relokation ist direkt abhängig von dem zur Verfügung stehenden Volumen und damit vom Pellet-Hüllrohrspalt. D. h. bei größerem Spalt kommt es zu stärkerer Zunahme des Pelletradius und die Relokation soll hierbei das Zerbrechen des Pellets simulieren. Zusätzlich zeigt sich ein starker positiver Einfluss des Pelletschwellens.

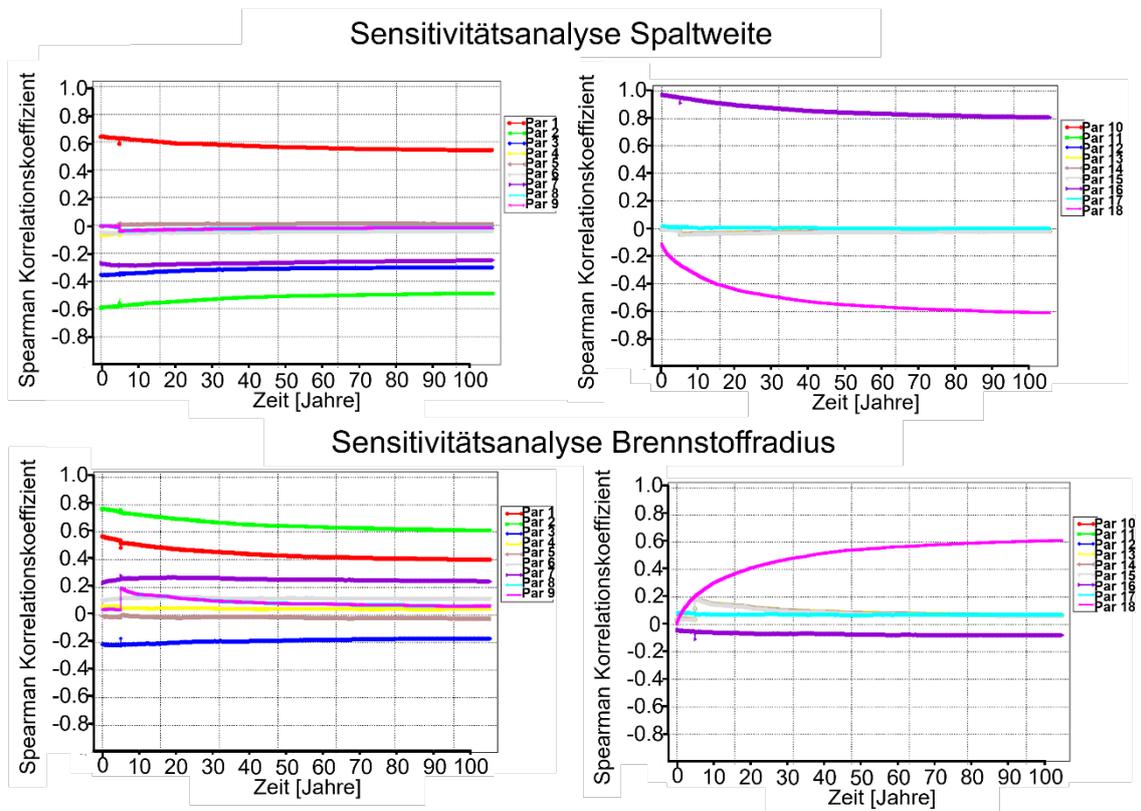


Abb. 5.8 Sensitivitätsanalyse der Spaltweite und des Brennstoffradius simuliert mit TESP-ROD für ein Zwischenlagerszenario

Hinsichtlich des Hydridverhaltens zeigt von den variierten Eingabeparametern lediglich die Temperatur einen signifikanten Einfluss. Zusätzliche Einflüsse sind erst bei höheren Umfangsspannungen zu erwarten, da sich erst dann ein Gleichgewicht aus radialen und umfangsgerichteten Hydriden einstellt.

Insgesamt zeigt sich, dass die TESPAs-ROD Modelle zur Beschreibung des Hüllrohrverhaltens in der Zwischenlagerung noch wenig komplex sind und stark von den Modellen des betrieblichen Brennstabverhaltens beeinflusst werden. Es ergeben sich daher leicht nachvollziehbare Unsicherheiten und Sensitivitäten. Als wichtigster Faktor zeigt sich hier, dass TESPAs-ROD Weiterentwicklungsbedarf in der Abschätzung des EOL-Zustands eines Brennstabs zu Beginn eines Zwischenlagerszenario aufweist.

6 Nationale und internationale Zusammenarbeit

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden sowohl nationale als auch internationale Zusammenarbeiten und Synergien genutzt. Hier ist zum einen das von der GRS in Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführte *SPIZWURZ*-Projekt zu nennen. In diesem Projekt wird der Einfluss sehr langsamer Kühlraten (1 °C/d) auf das Wasserstoffverhalten in hydrierten und nicht bestrahlten Hüllrohren untersucht. Die in diesen Experimenten erzielten Ergebnisse können hierbei direkt zur Validierung der Wasserstoffmodelle von TESP-ROD verwendet werden. Während des BREZL-II Vorhabens wurde die Planung und experimentelle Durchführung der SPIZWURZ-Versuche begleitet und beobachtet. Zusätzlich wurde während dieses Vorhabens aktiv am *Studs-vik Cladding Integrity Project* (SCIP) teilgenommen. Im aktuell laufenden SCIP-IV war hier vor allem die Task 1 *Backend* mit den Subtasks 1.1 (*Creep and hydride reorientation under simulated dry storage conditions*) und 1.2 (*Hydride reorientation*) von großem Interesse. In Subtask 1.1 zeigten sich Hinweise, dass aufgrund von *Pellet-Fuel-Bonding* auch schon bei Umfangsspannungen von 90 MPa lange, radial ausgerichtete Hydride entstehen können. Dies wurde auf Spannungskonzentrationen an der Grenzfläche zwischen Pellet und Hüllrohr zurückgeführt. Gerade bei Brennstäben mit hohen Abbränden ist mit einer ausgeprägten Bindung zwischen Pellet und Hüllrohr zu rechnen, welche basierend auf diesen Ergebnissen eine erhöhte Anfälligkeit für die Bildung von radialen Hydriden aufweisen könnten. In Subtask 1.2 wurde der Einfluss der Umfangsspannung auf die Hydridorientierung untersucht. In den Experimenten schieden sich für hohe Umfangsspannungen von 100 MPa nahezu ausschließlich radiale Hydride und für niedrige Umfangsspannungen von 70 MPa nahezu ausschließlich umfangsgerichtete Hydride aus. Für mittlere Spannungen von 85 MPa kam es zur Bildung von einer Mischung aus sowohl radialen und umfangsgerichteten Hydriden. Um den Einfluss der Kühlrate auf dieses Phänomen zu untersuchen, brachte die GRS einen Vorschlag für die Verringerung der Abkühlrate von 5 °C/h auf 0.5 °C/h und 0.1 °C/h ein. Durch unterschiedliche Interessen der anderen SCIP-Teilnehmer wurde sich in Reaktion auf den GRS-Vorschlag auf drei weitere Experimente mit Abkühlraten von 50, 5 und 0.5 °C/h geeinigt. Diese Experimente befinden sich aktuell in der Durchführung. Grundsätzlich sind die Ergebnisse der SCIP-Experimente direkt relevant für eine potenzielle Validierung von TESP-ROD als Analysecode für das Brennstabverhalten in der Zwischenlagerung. Zusätzlich beteiligte sich die GRS an der Definition der Experimente für das Nachfolgeprogramm SCIP-V. In diesem Vorhaben soll erneut starker Fokus auf die Untersuchung des Brennstabverhaltens unter Back-End und Zwischenlagerbedingungen gelegt werden. Zur

Vertiefung des internationalen Austauschs, wurden an mehreren *Electric Power Research Institute (EPRI)-ESCP Meetings* teilgenommen. Dadurch ermöglichte sich die Teilnahme am EPRI Thermal Modelling Benchmark. Dieser trug besonders zum Kompetenzaufbau hinsichtlich der Temperaturfeldsimulation von Transport- und Lagerbehältern innerhalb der GRS bei.

7 Benchmarkaktivitäten

7.1 GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten in der verlängerten Zwischenlagerung

Einer der wichtigsten Aspekte für die Sicherheit der verlängerten Zwischenlagerung von bestrahltem Kernbrennstoff in Transport- und Lagerbehältern ist die zuverlässige Vorhersage des Brennstabverhaltens. Dabei gilt es die gesamte Lebensdauer des Brennstabs zu berücksichtigen: den Einsatz im Reaktor und die damit verbundene Leistungshistorie, die Nasslagerung im Abklingbecken, die Beladung und Trocknung des Behälters und schließlich die trockene Lagerung im Behälter selbst. Um solche Vorhersagen zu ermöglichen, werden Brennstabcodes mit möglichst genauen Modellen zur Simulation der thermischen, chemischen und mechanischen Phänomene, welche während der trocknen Zwischenlagerung auftreten, benötigt. Die Verbesserung bestehender Brennstabcodes zur Berücksichtigung all dieser Faktoren wird aktuell von mehreren Gruppen und Institutionen aktiv verfolgt. Um die Kommunikation zwischen diesen Gruppen zu fördern, und Wissensaustausch zu ermöglichen wurde im Rahmen des „Safety of Extended Dry Storage (SEDS)“ Workshop 2019 von der GRS ein Code-zu-Code Vergleich initiiert. Dieser Vergleich wurde im Rahmen der Eigenforschungsvorhaben RS1552 BREZL-I und RS1588 BREZL-II geplant, durchgeführt und ausgewertet.

Im Rahmen dieses Benchmarks wurden vereinfachte Randbedingungen angenommen, die alle wichtigen Phasen des Brennstoffeinsatzes abdecken sollen. Als Reaktorhistorie wird dabei ein generischer Leistungsverlauf über fünf Zyklen mit Streckbetrieb am Ende eines jeden Zyklus angenommen. Im Anschluss an den Betrieb im Reaktor wird der Brennstab fünf Jahre lang in einem Nasslager gelagert. Während dieser Zeit wird die Zwangskühlung mit einer konstanten Temperatur von 40 °C und bei niedrigem Kühlmittdruck simuliert. Die Nasslagerung endet mit dem Einladen des Brennstoffs in den Behälter. Der Behälter wird nach der Beladung entwässert, vakuumgetrocknet und mit Heliumgas befüllt. In dieser Phase steigt die Hüllentemperatur auf ihre maximale Temperatur nach dem Betrieb. Die anschließende Trockenlagerung führt zu einer langsamen Abkühlung während einer angenommenen (verlängerten) Lagerzeit von 95 Jahren. Es ergibt sich dadurch ein gesamter Lagerzeitraum von 100 Jahren.

Für die Benchmark-Teilnehmern war die Simulation des Betriebsverhaltens optional, da sich der Vergleich auf das Lagerverhalten konzentrieren sollte. Nass- und

Trockenlagerung des bestrahlten Kernbrennstoffs (SNF) erfordern vergleichsweise große Rechenzeitschritte mit eher geringen Änderungen im Parameterverhalten. Die verwendeten Randbedingungen für Temperatur und Druck sind in Abb. 7.1 dargestellt, wobei die verschiedenen Zeitschritte in Tab. 7.1 aufgelistet sind.

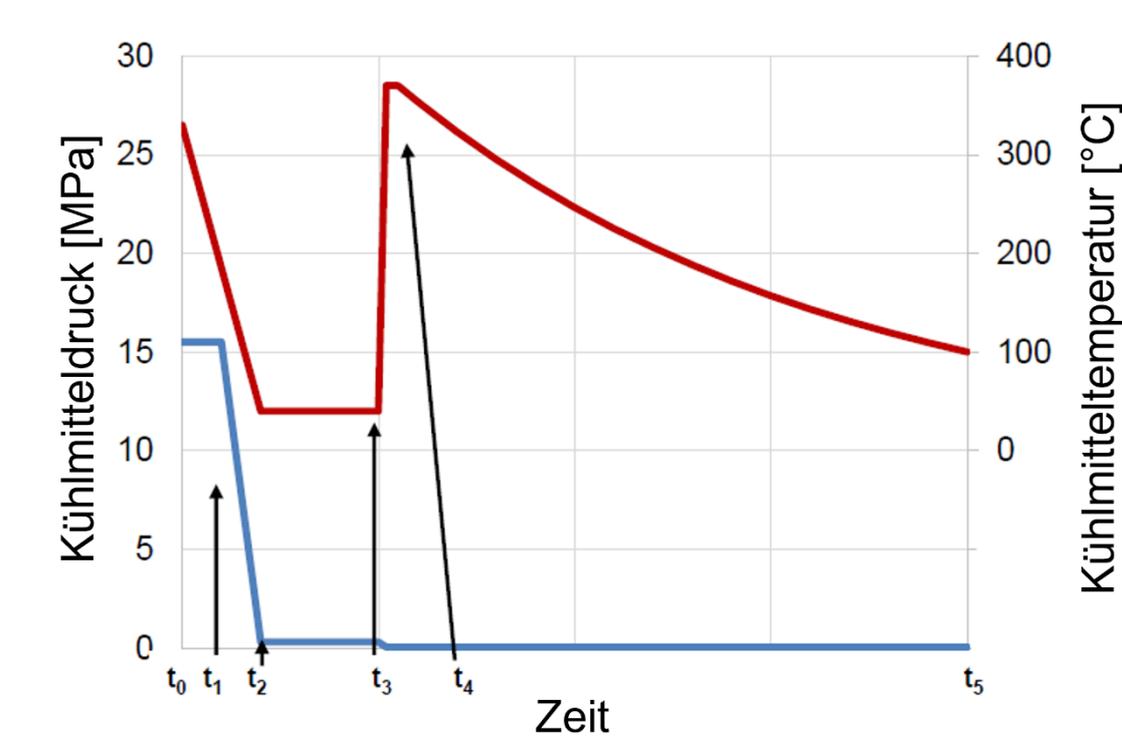


Abb. 7.1 Temperatur- und Druckrandbedingung für die Simulation des Brennstabverhaltens im Rahmen des GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten während der trockenen Zwischenlagerung

Tab. 7.1 Wichtige Zeitpunkte während der Simulation des Brennstabverhaltens im Rahmen des GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten während der trockenen Zwischenlagerung

Zeitschritt	Event
t 0	Reaktorabschaltung (Abkühlung)
t 1	Reaktorabschaltung (Druck)
t 2	Beginn der Nasslagerung
t 3	Beginn des Trocknungsprozesses
t 4	Beginn der Trockenlagerung
t 5	Ende der Simulation

Im Rahmen des Benchmarks wurden für die Langzeitsimulation sechs Beiträge mit insgesamt sechs verschiedenen Codes berücksichtigt. Abgesehen von Anpassungen beim Simulationszeitraum wurden die eingereichten Daten nicht manipuliert. Insgesamt waren nicht alle Teilnehmenden Codes in der Lage, alle verlangten Daten zu simulieren. Die Teilnehmer mit den jeweiligen Codes sind in Tab. 7.2 aufgeführt.

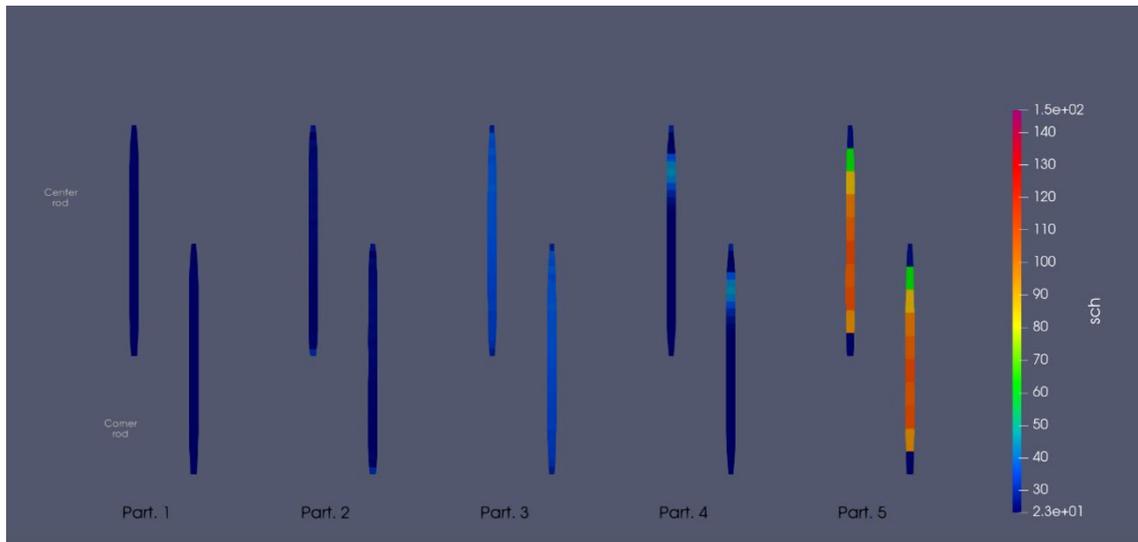
Tab. 7.2 Teilnehmer am GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten während der trockenen Zwischenlagerung

Teilnehmer	Code
Part 1: CIEMAT	FRAPCON-xt
Part 2: CNAT	FALCON
Part 3: PSI	FALCON
Part 4: ÚJV Řež	TRANSURANUS
Part 5: GRS	TESPA-ROD
Part 6: Framatome	CARO-E und CSAS
Part 7 TÜV NORD	TRANSURANUS

Die gesamte Auswertung des Benchmark wurde bereits veröffentlicht, daher soll hier nur eine kurze Zusammenfassung diskutiert werden /BOL 22/.

Die in diesen Benchmark angewendeten Codes wurden ursprünglich für den Reaktorbetrieb oder die Unfallanalyse entwickelt. Interessanterweise zeigen die Codes unter

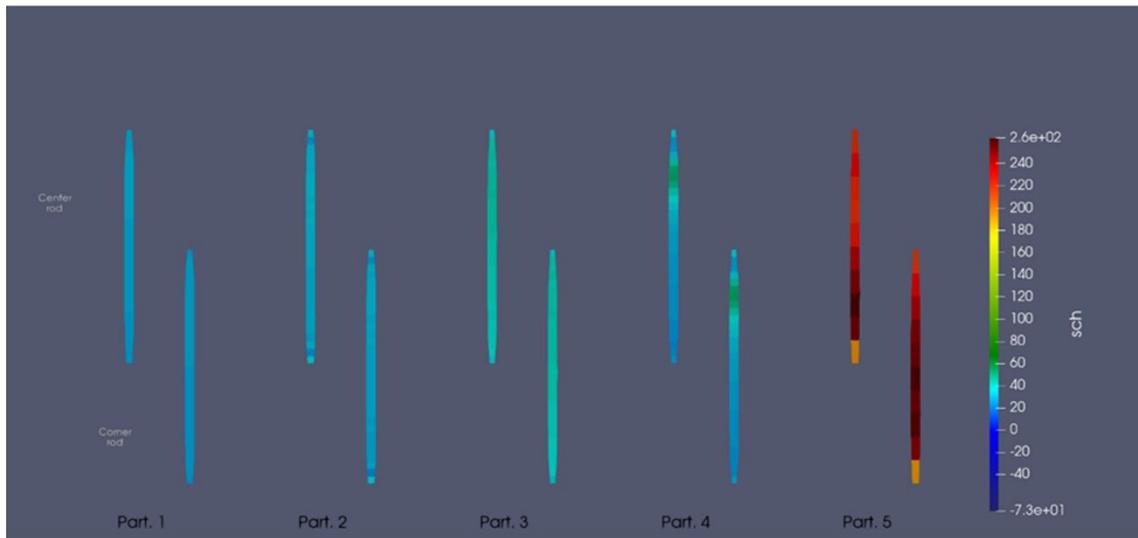
vorgegebenen Randbedingungen schon während der Betriebszeit einige größere Abweichungen auf. Abweichungen wurden hierbei sogar für dieselben Codetypen (z. B. FALCON und TRANSURANUS) beobachtet, welche jeweils in verschiedenen Versionen von zwei Teilnehmern verwendet wurden. Dies lässt darauf schließen, dass sowohl Unterschiede in den Modellierungsansätzen und ein Nutzereffekt bei der Analyse der Ergebnisse berücksichtigt werden.



Zeitpunkt: 10 Jahre

Abb. 7.2 Axiale Verteilung der Hüllrohrdehnung des Zry-4 Brennstabs 10 Jahre nach Ende der Nasslagerung

Exemplarisch werden hier nur die Vorhersagen der Brennstabumfangsspannung am Beispiel des Zry-4 Brennstabs gezeigt. Diese sind in Abb. 7.2 und Abb. 7.3 mit dem axialen Verlauf nach einer Simulationszeit von 10 und 100 Jahren dargestellt. Während die Teilnehmer 1, 2 und 3 geringe Umfangsspannungen vorhersagen, zeigt die Rechnung von Teilnehmer 4 erhöhte Spannungen im oberen Teil des Stabes. Die Spannungen liegen hier im Bereich von 30 MPa nach 10 Jahren und 40-60 MPa nach 100 Jahren. Teilnehmer 5 weicht von den Vorhersagen der anderen Teilnehmer ab und sagt über den gesamten Stab sehr hohe Umfangsspannungen vorher. Nach 10 Jahren Zwischenlagerung wird eine Spannung von bis zu 120 MPa vorhergesagt und nach 100 Jahren steigt die Umfangsspannung auf über 240 MPa an. Teilnehmer 5 ist die GRS mit dem Brennstab-Code TESP-ROD. Dieser Vergleich zeigt deutlich, dass TESP-ROD hinsichtlich der Vorhersage der Umfangsspannung weit von den anderen Teilnehmern abweicht. Als Grund hierfür konnte das Pelletschwellmodell identifiziert werden. In zukünftigen Arbeiten sollte dieses Modell auf unnötige Konservativitäten untersucht werden.



Zeitpunkt: 100 Jahre

Abb. 7.3 Axiale Verteilung der Hüllrohrdehnung des Zry-4 Brennstabs 100 Jahre nach Ende der Nasslagerung

Insgesamt zeigt dieser Benchmark, dass das Verhalten von abgebrannten Brennstäben in der Zwischenlagerung noch nicht ausreichend verstanden ist. Besonders die Dynamik von Wasserstoff und Hydrid in der Brennstabhülle ist nach wie vor ein intensiv diskutiertes Thema in der Nukleargemeinschaft. Neue experimentelle Erkenntnisse und mechanistische Modelle werden voraussichtlich mittelfristig veröffentlicht werden. Dies gibt Entwicklern und Nutzern von Codes die Möglichkeit ihre Modellierungskapazitäten zu erweitern. Dies ist besonders relevant, da zur Zeit des Benchmarks lediglich zwei Teilnehmer über ein Modell zur Beschreibung des Hydridverhaltens in der Zwischenlagerung verfügten. In diesem Benchmark zeigte sich auch die Schwierigkeit, Teilnehmern mit unterschiedlichen Simulationswerkzeugen eine vereinfachte, aber realistische Benchmarkaufgabe zu stellen. Darüber hinaus zeigten sich allgemeine Schwierigkeiten bei der Bewertung des Brennstabzustands zu Beginn der Trockenlagerung dem sogenannten „end-of-life Zustand“.

7.2 EPRI Thermal Modelling Benchmark

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde am EPRI thermal modelling Benchmark teilgenommen. Im Zuge dieser Teilnahme wurde anhand der Benchmark Spezifikationen ein COBRA-SFS Modell des TN32B Transport- und Lagerbehälters erstellt [EPRI 20]. Ziel dieses Benchmarks ist es die Vorhersagen von Thermohydraulik-Rechenmodellen

hinsichtlich Brennelement- und Behältertemperaturen mit den Messergebnissen des „high burnup demonstration project“ (HBU DEMO) zu vergleichen /EPRI 11/. Während dieses Projektes wurde in den USA ein TN23B Behälter mit bestrahlten Brennelementen beladen und so modifiziert, dass eine direkte Temperaturmessung an mehreren Stellen im Behälterinneren ermöglicht wurde.

Das entwickelte COBRA-SFS-Modell ist ein dreidimensionales Vollbehältermodell. Es besteht, wie in Abb. 7.4 dargestellt, aus 629 Nodes und 40 axialen Ebenen. Jede Ebene ist 4 Zoll stark, so dass die 40 Schichten 160 Zoll abdecken. Dies entspricht der Höhe der Behälterkavität des TN32B.

Die 629 Nodes sind wie folgt verteilt: 197 Nodes für die 32 Brennelementfächer aus Stahl und Aluminium, 180 Nodes für die Schienen aus Aluminium und 252 Nodes für den Behälterkörper. Die 252 Nodes des Behälterkörpers sind in sieben Ringe zu je 36 Nodes unterteilt, die nacheinander der inneren Behälterwand, dem Gammaschild, der Innenseite der Neutronenschildkästen, dem Neutronenschildharz, der Außenseite der Neutronenschildkästen, der Außenhülle und der Behälteroberfläche (Zur Abnahme der Oberflächentemperatur; Schichtdicke = 0) entsprechen.

Das Modell umfasst 17x17 DWR-Brennelemente (Westinghouse-Design) die Einzelstab-aufgelöst modelliert sind. Somit liefert das Modell Temperaturwerte für jeden der 17x17 Brennstäbe aus allen 32 Brennelementen und in jeder der 40 axialen Schichten. Für alle Brennstäbe wird der gleiche Hüllrohrtyp mit einer Wärmeleitfähigkeit von Wärmeleitfähigkeit $\lambda = 15,6 \text{ W/m.K}$ ($9 \text{ Btu/h.ft.}^\circ\text{F}$) angenommen. Da es sich bei allen Berechnungen um „steady-state“ Simulationen handelt, wird der Einfluss des Brennstoffes als gering eingeschätzt, weshalb für alle Brennstäbe der Brennstoff vernachlässigt und lediglich das Hüllrohr simuliert wird. Die Nachzerfallsleistung wird daher als Randbedingung an der Innenfläche der des Hüllrohres angesetzt. Die Abstandshaltergitter in den Brennelementen werden nicht direkt modelliert, sondern werden lediglich als Verlustkoeffizienten an den jeweiligen axialen Positionen angesetzt.

Die Behälterkavität ist mit Helium bei einem Druck von 2,2 bar gefüllt. Innerhalb jedes Brennelements werden 18x18 Heliumkanäle modelliert, wobei jeweils vier Brennstäbe die Ecken eines Kanals definieren. Innerhalb der Tragkorbschienen werden 32 weitere Heliumkanäle (viel größer als die Brennelementkanäle) modelliert.

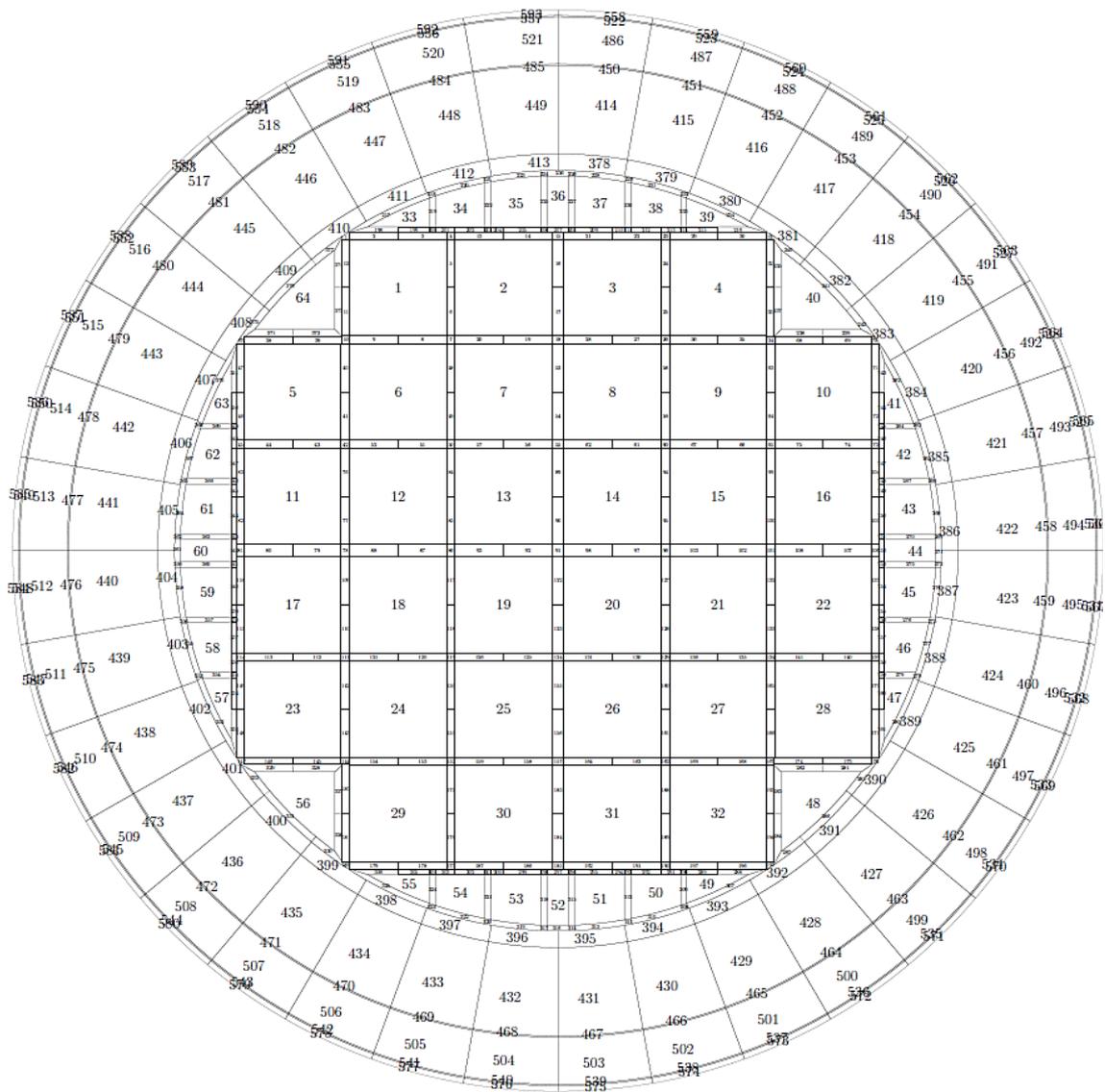


Abb. 7.4 Schema des Behältermodells, das die Nodalisierung der verschiedenen Strukturen zeigt

Im Rahmen des Benchmarks wurden drei verschiedene Kategorien von Thermohydraulik-Codes verwendet:

1. Finite Volumen Codes
2. Finite Elemente Codes
3. Finite Differenzen Codes

Zusätzlich kamen aus diesen Kategorien sowohl kommerzielle als auch nicht-kommerzielle Codes zum Einsatz. Insgesamt wurde zehn verschiedene Modelle von acht Organisationen verteilt auf sieben verschiedene Codes verglichen. Die wichtigsten Ergebnisse der Phase I des Benchmarks sind:

1. Trotz der Verwendung eines einzigen Datensets für die Modellerstellung zeigten sich zwischen den Teilnehmern und den Temperaturmessdaten teilweise signifikante Abweichungen. Während sich die durchschnittliche Abweichung der Simulationsergebnisse von den Messungen der Hüllrohrtemperatur im Bereich von ungefähr ± 20 K bewegt, zeigte sich an einzelnen Messpunkten Abweichungen von bis zu 70 K.
2. Zwischen Nutzern derselben Codes zeigten sich teilweise große Unterschiede in den Temperaturergebnissen, weshalb von einem großen Einfluss des Code-Anwenders auf die Simulationsergebnisse ausgegangen werden kann.
3. Moderne Finite-Element- oder Finite-Volumen-Codes wie ANSYS Mechanical oder ANSYS Fluent zeigten keinen Vorteil in der Simulationsgenauigkeit gegenüber Finite-Differenzen- oder spezialisierter Codes wie COBRA-SFS.

Im Anschluss werden die Ergebnisse des GRS-Modells im Vergleich zu den gemessenen Temperaturen im HBU DEMO Behälter vorgestellt. Für alle weiteren Ergebnisse des Benchmarks wird auf den Phase-I Abschlussbericht verwiesen /EPRI 22/. Abb. 7.5 zeigt die axialen Temperaturprofile simuliert durch das GRS COBRA-SFS TN32B-Modell. Die berechneten Hüllrohrtemperaturen bewegen im Bereich von 127 bis 226 °C. Wobei sich die maximale Hüllrohrtemperatur von 226 °C für das, im Zentrum gelegene, Brennelement 14 ergeben.

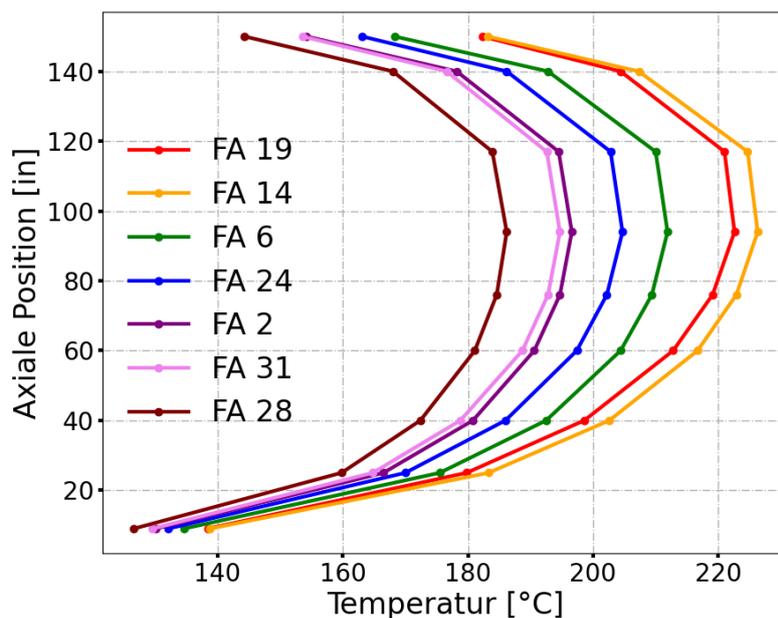


Abb. 7.5 Vergleich der axialen Temperaturprofile der Brennstäbe an den Positionen der Thermoelemente im HBU DEMO Behälter

Betrachtet man die Abweichungen zwischen den von COBRA-SFS simulierten Temperaturdaten sowie den Messungen im HBU DEMO Behälter so zeigt sich, dass sich die Temperaturunterschiede zum Großteil im Bereich von ± 5 K bewegen (Abb. 7.6). Deutlich größere, und durchweg positive, Abweichungen von knapp 10 K zeigen sich allerdings für alle Brennelemente in den axialen Positionen oberhalb von 120 in. Der Grund dafür könnte in der Modellierung des oberen Plenums liegen. Vermutlich bildet der im GRS-Modell gewählte Modellierungsansatz die reelle Plenumsituation des TN32B Behälters nicht ausreichend ab. Besonders auffallend ist das Brennelement 28, welches über alle axialen Zonen weit von den gemessenen Temperaturen abweicht. Der Grund dafür könnte eine ungenaue Modellierung der Tragkorbumgebung dieses Brennelements sein. Interessanterweise zeigt sich eine ähnlich ungenaue Simulation dieses Brennelements auch für das im Benchmark vorgestellte COBRA-SFS Modell des Pacific Northwest National Laboratory (PNNL). Es könnte sich also auch um eine codebedingte Ungenauigkeit handeln, welche dazu führt, dass COBRA-SFS das Temperaturfeld im Bereich dieses Brennelementes nur unzureichend beschreibt.

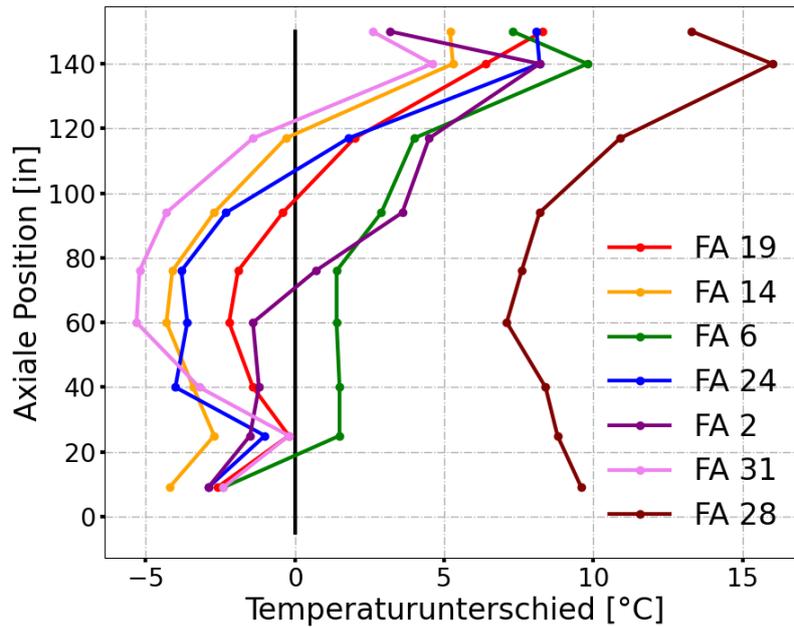


Abb. 7.6 Vergleich der Temperaturunterschiede zu den Messungen im HBU DEMO Behälter

Aktuell läuft die zweite Phase des Benchmarks, in welcher die Sensitivität der einzelnen Modelle hinsichtlich verschiedener Modellparameter analysiert werden soll. Die ausgewählten Parameter sind:

1. Umgebungstemperatur: ± 15 °F (um die Normalwert 75 °F)
2. Festgelegte Oberflächentemperatur als äußere Grenzbedingung
3. Nachzerfallsleistung: ± 5 %
4. Spaltabstand zwischen Tragkorb und Tragkorbschiene: ± 0.05 in
5. Spaltabstand zwischen innerem Liner und Gammaschild: ± 0.025 in
6. Emissivität der Aluminiumkomponenten: ± 0.1

Die Ergebnisse für diese Phase des Benchmarks werden gegen Ende 2023 erwartet.

8 **Arbeitspaket 3 Schnittstellen und Benutzeroberfläche**

8.1 **BUTTERBREZN**

Zur Untersuchung des Verhaltens von Brennstäben während der Zwischenlagerung und der damit verbundenen Sicherheitsaspekte hat die GRS eine Rechenkette aus Abbrand- (GRS: MOTIVE) /HAN 17/, Thermohydraulik- (PNNL¹: COBRA-SFS) /MIC 17/ und Thermomechanik-Simulationen (GRS: TESPА-ROD) etabliert. Weil insbesondere das Aufsetzen der thermohydraulischen Modelle nicht nur für Anfänger und Gelegenheitsnutzer sondern auch für Experten fehleranfällig und zeitaufwendig ist, wurde eine grafische Benutzeroberfläche (GUI), BUTTERBREZN (*Bedienelemente zur Unterstützung von Thermohydraulischen und Thermomechanischen Einzelstab aufgelösten Rechnungen zum Brennelementverhalten in Zwischenlagerbehältern für Nuklearabfälle*), erstellt, die dem Anwender das Einstellen häufig verwendeter Programmparameter erleichtert und, soweit möglich, fehlerhafte Eingaben abfängt.

BUTTERBREZN ist in Python² geschrieben und verwendet die Fensterbibliothek wxPython³. Das Programm arbeitet unter der Annahme, dass die zeitliche Entwicklung eines Brennelementbehälters durch statische COBRA-SFS-Rechnungen verfolgt wird, auf denen jeweils mehrere dynamische TESPА-ROD-Rechnungen zur Untersuchung ausgewählter Brennstäbe aufsetzen. Dabei müssen die Brennelemente alle die gleiche Anzahl von Brennstäben beinhalten. Weiterhin wird angenommen, dass sich die Temperaturverteilung durch drei axiale Werte am Boden, in der Mitte und am oberen Ende des Behälters approximieren lässt, die für jeden Drehwinkel um die Längsachse des Behälters konstant ist.

Beim Anlegen eines neuen BUTTERBREZN-Projekts (Abb. 8.1) wählt der Benutzer einen Behältertyp mit einer bestimmten Brennstabanordnung aus. Zurzeit stehen die von der GRS erstellten generischen Modelle des CASTOR[®] V/19-Behälters (16x16 und 18x18 Brennelemente), des CASTOR[®] V/52 (10x10) und des TN-32b (17x17) zur Verfügung. Zu jedem eingebauten Modell existiert eine Abbildung des geometrischen

¹ <https://www.pnnl.gov>

² <https://www.python.org>

³ <https://wxpython.org/>

Modells in Form einer SVG⁴-Bilddatei (Scalable Vector Graphics). Weitere Einstellmöglichkeiten in diesem Dialog sind die Anzahl der axialen Rechenknoten, die verwendete Temperatureinheit, sowie das Projektverzeichnis unter dem alle Simulationen angelegt und durchgeführt werden.

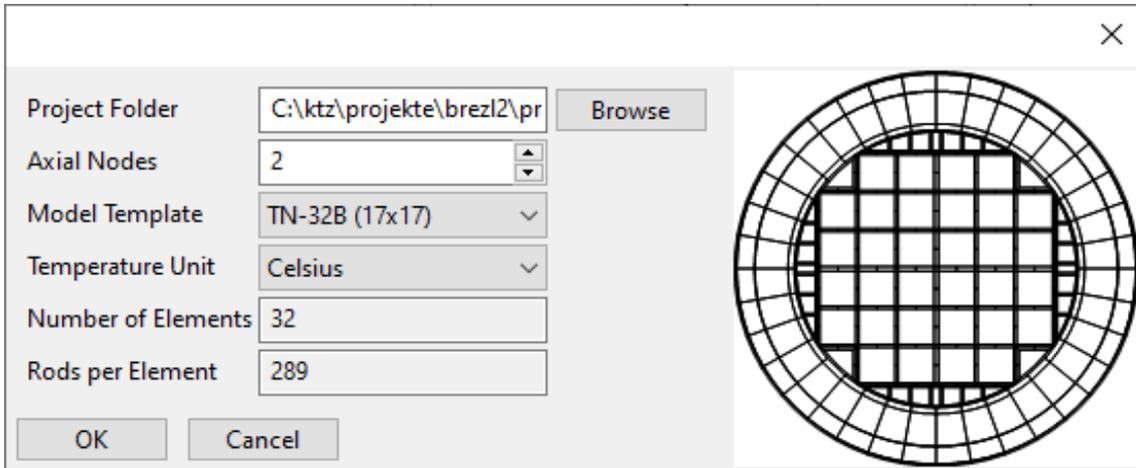


Abb. 8.1 BUTTERBREZN: Dialog zur Erstellung eines neuen Projekts

Die GUI erlaubt es, benannte axiale Leistungsprofile anzulegen und zu löschen (Abb. 8.2). Diese können zusammen mit absoluten Leistungswerten in einer Tabelle den einzelnen Brennelementen zugeordnet werden (Abb. 8.3). Mehrere Brennelemente lassen sich interaktiv in einer grafischen Ansicht des Containers oder über das Anklicken von Tabellenzeilen auswählen. Dadurch ist es möglich, dieselben Parameterwerte mehrfach mit einer Aktion zu vergeben. In einer weiteren Ansicht gibt der Benutzer Werte für die Außentemperatur am Boden, in der Mitte und am oberen Ende des Brennelementbehälters vor.

⁴ <https://www.w3.org/TR/SVG/>

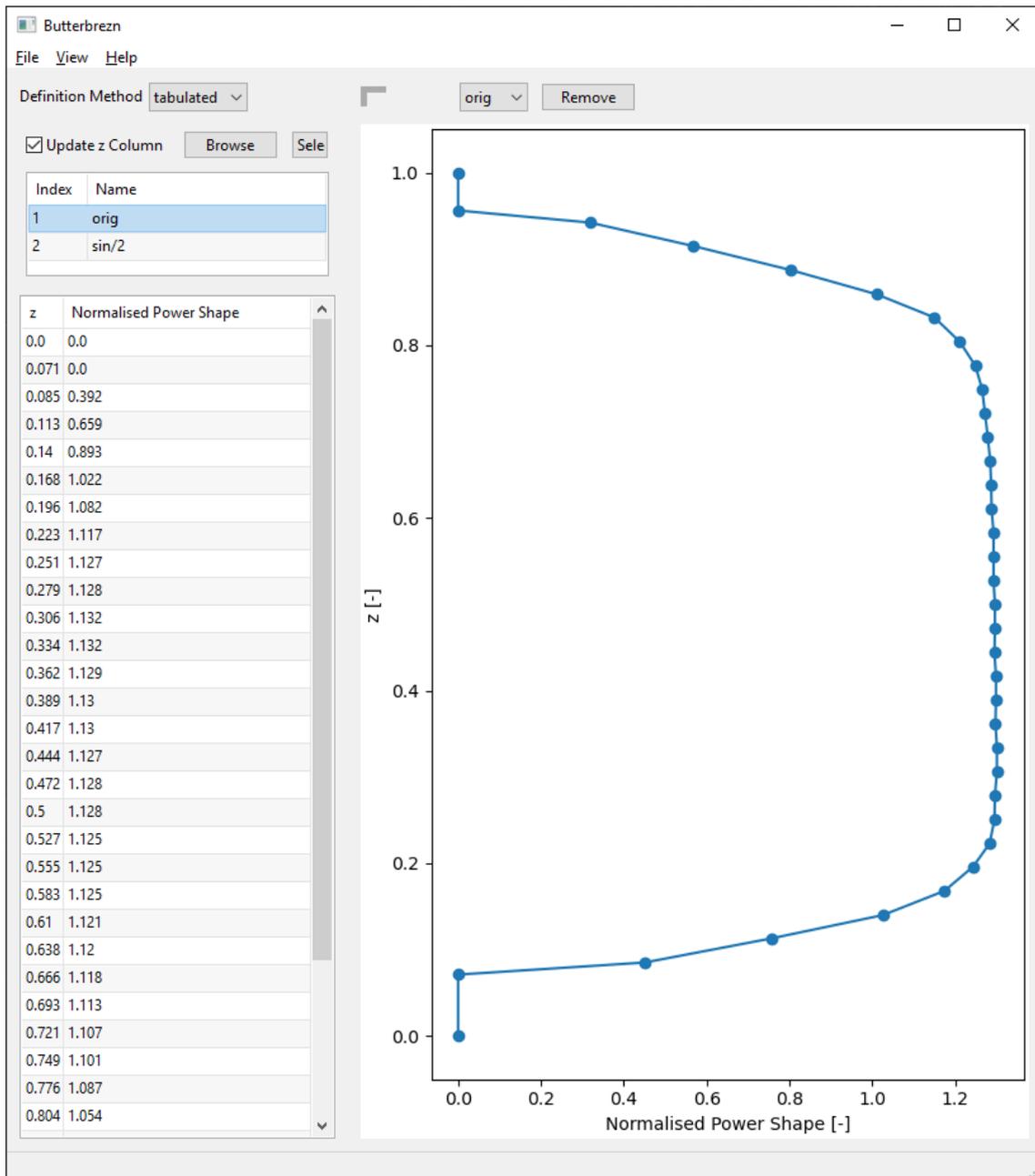


Abb. 8.2 BUTTERBREZN: Erstellen, Einlesen und Verwalten von Leistungsprofilen

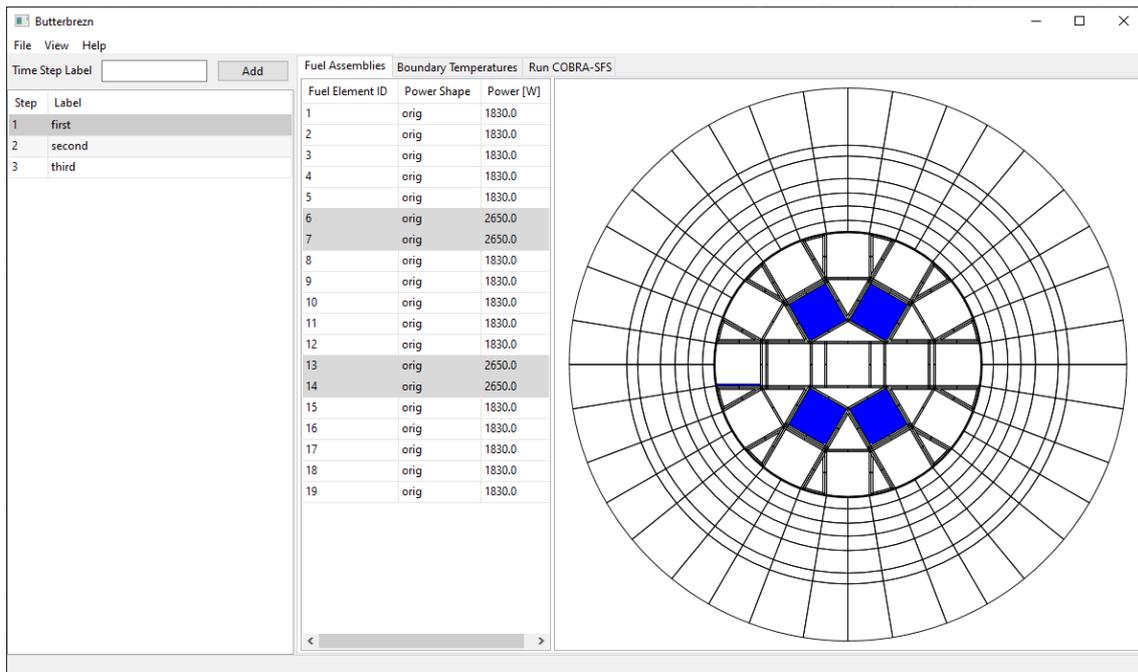


Abb. 8.3 BUTTERBREZN: Konfiguration der Leistung der Brennelemente

Die genannten Parameter sind einem benannten Zeitschritt zugeordnet, von denen beliebig viele angelegt und parametrisiert werden können. Das Programm speichert sämtliche Projekteinstellungen bei Auswahl eines entsprechenden Menüeintrags in einer Textdatei, aus der sich ein Projekt umgekehrt wiederherstellen lässt. Per Knopfdruck erzeugt der Benutzer für jeden Zeitpunkt bei abgeschlossener Zeitschrittkonfiguration eine COBRA-SFS Eingabedatei in einem nach dem Zeitschritt benannten Unterverzeichnis des Projektordners, wo dann die Simulation zurzeit noch manuell gestartet werden muss.

BUTTERBREZN kann per Kommandozeilenoption dazu veranlasst werden, anstelle der oben beschriebenen Projektdialoge eine Benutzeroberfläche zur tabellarischen Ansicht der Parameter der Eingabedatei anzuzeigen (Abb. 8.4). Diese Tabelle lässt sich durch Angabe von beliebigen Kombinationen von Gruppe, Eintrag-Identifikationsnummer und Parametername dynamisch filtern. Der Benutzer hat außerdem die Option, zu einem ausgewählten Parameter die Anzeige des jeweiligen aus der Dokumentation entnommenen Hilfstextes aktivieren.

Search Show Variable Help

Group	Record	Name	Value
bdry	11	areacp11	[[[], [], [], [], []], [[], [], [], [], []]]
bdry	11	areacp12	[[[], [], [], [], [None, None, None, No...e, None, None, None, None, None], []]]
bdry	11	dxplen11	[[[], [], [], [], [13.9, 13.9, 13.9], []], [[], [15.6, 15.6, 15.6], [], [25.7, 25.7, 25.7], []]]
bdry	11	dxplen12	[[[], [], [], [], [13.9, 13.9, 13.9, 13.9, 13.9...5.7, 25.7, 25.7, 25.7, 25.7, 25.7], []]]
bdry	11	i11	[[1, 2, 3, 4, 5, 6], [1, 2, 3, 4, 5]]
bdry	11	ipintp11	[[[], [], [], [], [317, 318, 319], []], [[], [317, 318, 319], [], [389, 390, 391], []]]
bdry	11	ipintp12	[[[], [], [], [], [320, 321, 322, 323, 324, ...417, 418, 419, 420, 421, 422, 423, 424], []]]
bdry	11	matypp11	[[[], [], [], [], [3, 3, 3], []], [[], [3, 3, 3], [], [3, 3, 3], []]]
bdry	11	matypp12	[[[], [], [], [], [3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, ... 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3], []]]
bdry	11	nptyp11	[[2, 3, 4, 5, 6, 7], [8, 9, 10, 11, 12]]
bdry	11	npwn11	[[0, 0, 0, 0, 72, 0], [0, 36, 0, 36, 0]]
bdry	11	sperp11	[[1.0, 1.0, 1.0, 1.17, 1.17, 1.42], [1.0, 1.38, 1.38, 1.77, 2.45]]

Identification number of the Jth solid node connected to plenum axial region I.
 (NOTE: Must correspond to a node entered on SLAB.3.)
 Warning: Do NOT attempt to connect boundary nodes (defined by input on BDRY.5) to plenum regions. This is fatal.

Abb. 8.4 BUTTERBREZN: Interaktive Darstellung der COBRA-SFS-Eingabedatei

8.2 cobrasfsio

Neben externen Bibliotheken beruht BUTTERBREZN auch auf einem im Rahmen dieses Projektes entstandenen Python-Paket, `cobrasfsio`, das es ermöglicht COBRA-SFS-Eingabedateien (bislang bis auf die Gruppen "radg" und "view") zu lesen, zu editieren und wieder herauszuschreiben. Die Einträge der Datei werden beim Schreiben auf Anforderung mit ihrer Gruppe und Nummer annotiert.

Der programmatische Zugriff auf die Eingabedaten ermöglicht es, diese im Zuge der COBRA-SFS-Modellentwicklung zu validieren. Unter dieser Zielsetzung entstanden die beiden Programme "lc2dot" (Abb. 8.5) und "kwaldot" (Abb. 8.6), die es ermöglichen, grafische Darstellungen der Verknüpfungen von Kühlmittelkanälen und Wärmeleitobjekten zu erstellen und so die visuelle Überprüfung durch den Anwender zur Fehlersuche zu erlauben.

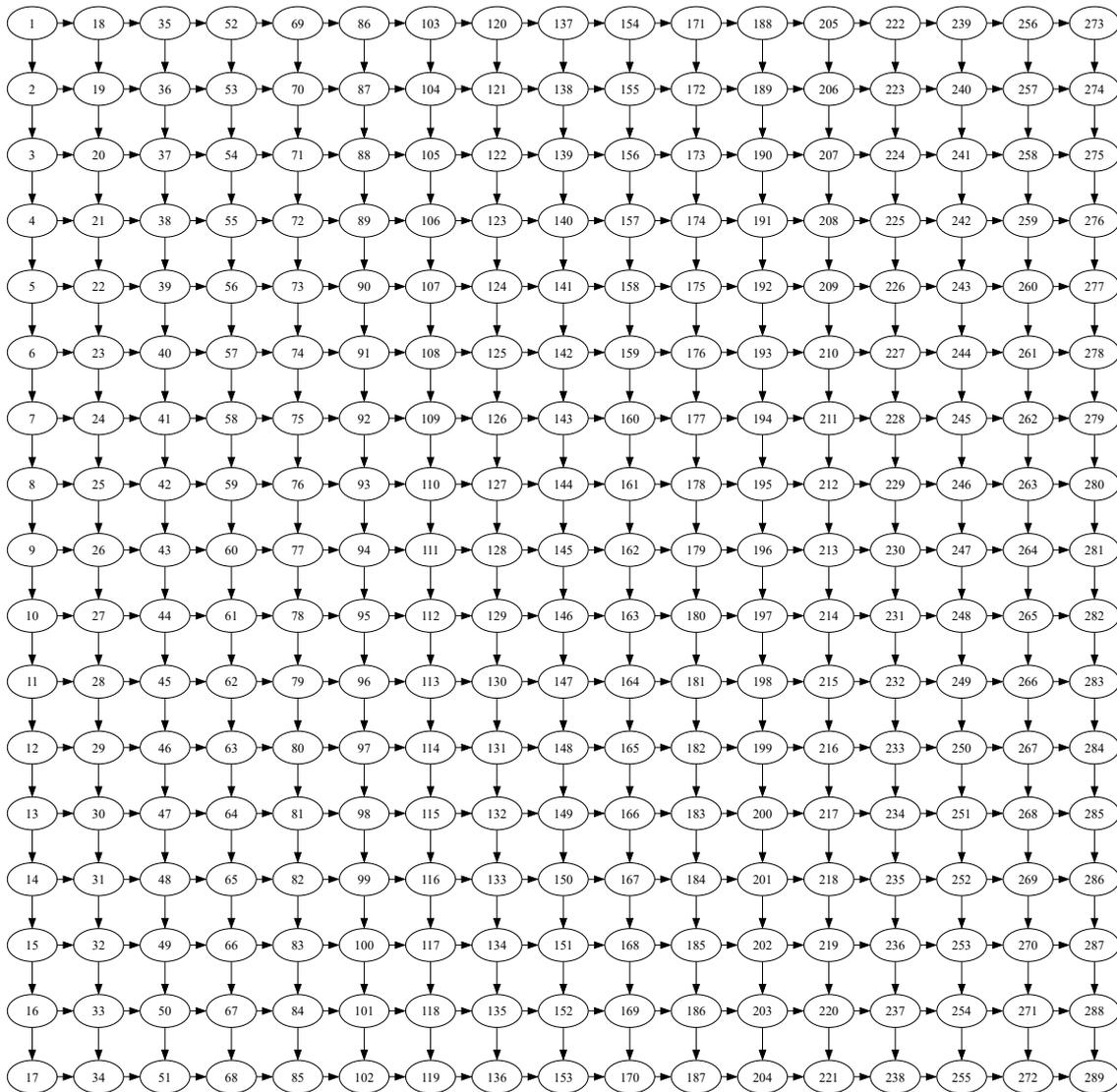


Abb. 8.5 cobrasfsio: Darstellung der Topologie der Kühlmittelkanäle in einem Brennelement mit lc2dot

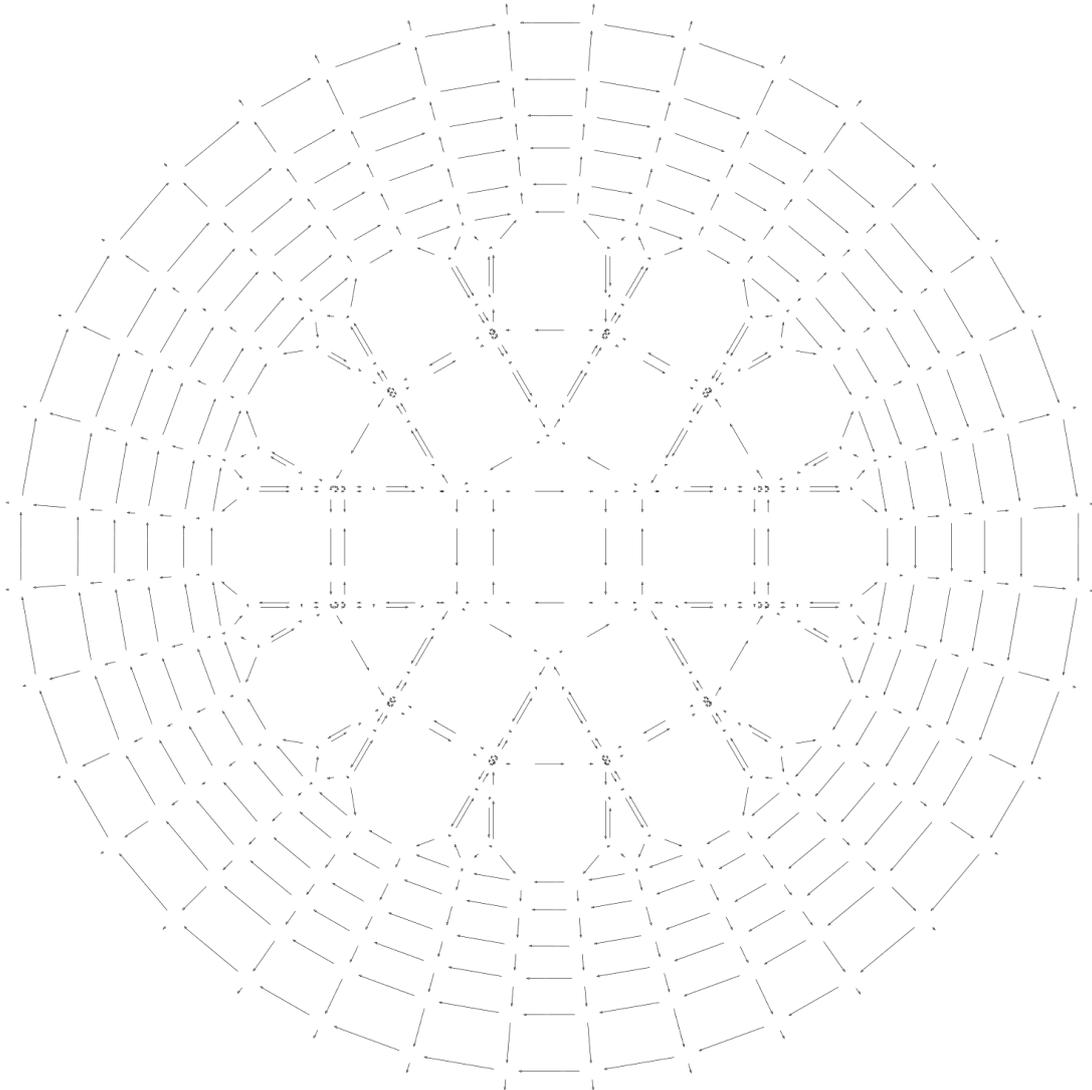


Abb. 8.6 cobrasfsio: Darstellung der Topologie der Wärmeleitelemente mit kwal2dot

Außer dem Eingabemodul beinhaltet cobrasfsio eine verbesserte Version des Python-Moduls aus dem früheren Eigenforschungsvorhaben RS1552 BREZL /STU 20/, zum Lesen der COBRA-SFS-Ausgabedatei. So wurde dessen Parser um das Auslesen der potenziell in der Ausgabe gespeicherten Eingabedatei, der Programmversion und noch fehlender Brennstabvariablen erweitert. Das auf dem Ausgabemodul basierende, neu entstandene Kommandozeilenwerkzeug cobrasfs2npz konvertiert COBRA-SFS-Ausgabedateien in ein binäres, weit verbreitetes programmunabhängiges Datenformat. Des Weiteren stellt das Paket eine Programmierschnittstelle (API) zum Zugriff auf per IDs spezifizierte Untermengen der Daten bereit, die in Zukunft in Analyse- und Plot-Werkzeugen Verwendung finden soll.

8.3 br3zl

Das im Vorgängerprojekt entstandene Python-Paket "br3zl" zur Erzeugung von Eingabedateien für 3D-Visualisierer aus COBRA-SFS-Ausgabedateien, zuvor beschränkt auf das generische CASTOR® V/19 Modell, wurde überarbeitet, um die Auswahl unterschiedlicher Containertypen zuzulassen. Das Paket stellt jetzt bei der Installation ein gleichnamiges Programm zur Verfügung, mit dem eingebaute Container per Namen auf der Kommandozeile spezifiziert werden können und benutzerdefinierte Modelle per Pfadangabe zu einer entsprechenden Geometriedatei. Durch die Verbesserungen in cobrasfsio ist außerdem die Angabe der bisher obligatorischen Konfigurationsdatei mit COBRA-SFS-Parametern und Einheiten-Einstellungen nun optional.

Für die 3D-Visualisierung und zur Verwendung in BUTTERBREZN wurden die bisher nur als manuell erstellte Skizzen verfügbaren geometrischen Modelle der generischen Containermodelle für TN-32B (Abb. 8.7) und CASTOR® V/52 (Abb. 8.8) durch Übertragung in Vektorgrafiken digitalisiert und aus ihnen Geometriedateien für br3zl abgeleitet. Für TN-32b erfolgte das in der bereits für CASTOR® V/19 angewandten Form mit dem Programm Asymptote⁵. Für CASTOR® V/52 kam ein neu entwickelter Ansatz auf der Basis des Vektorgrafik-Editors Inkscape⁶ in Kombination mit einem Python-Skript zum Einsatz, um eine Alternative zur Programmierung in Asymptote zu schaffen.

⁵ <https://asymptote.sourceforge.io/>

⁶ <https://inkscape.org/>

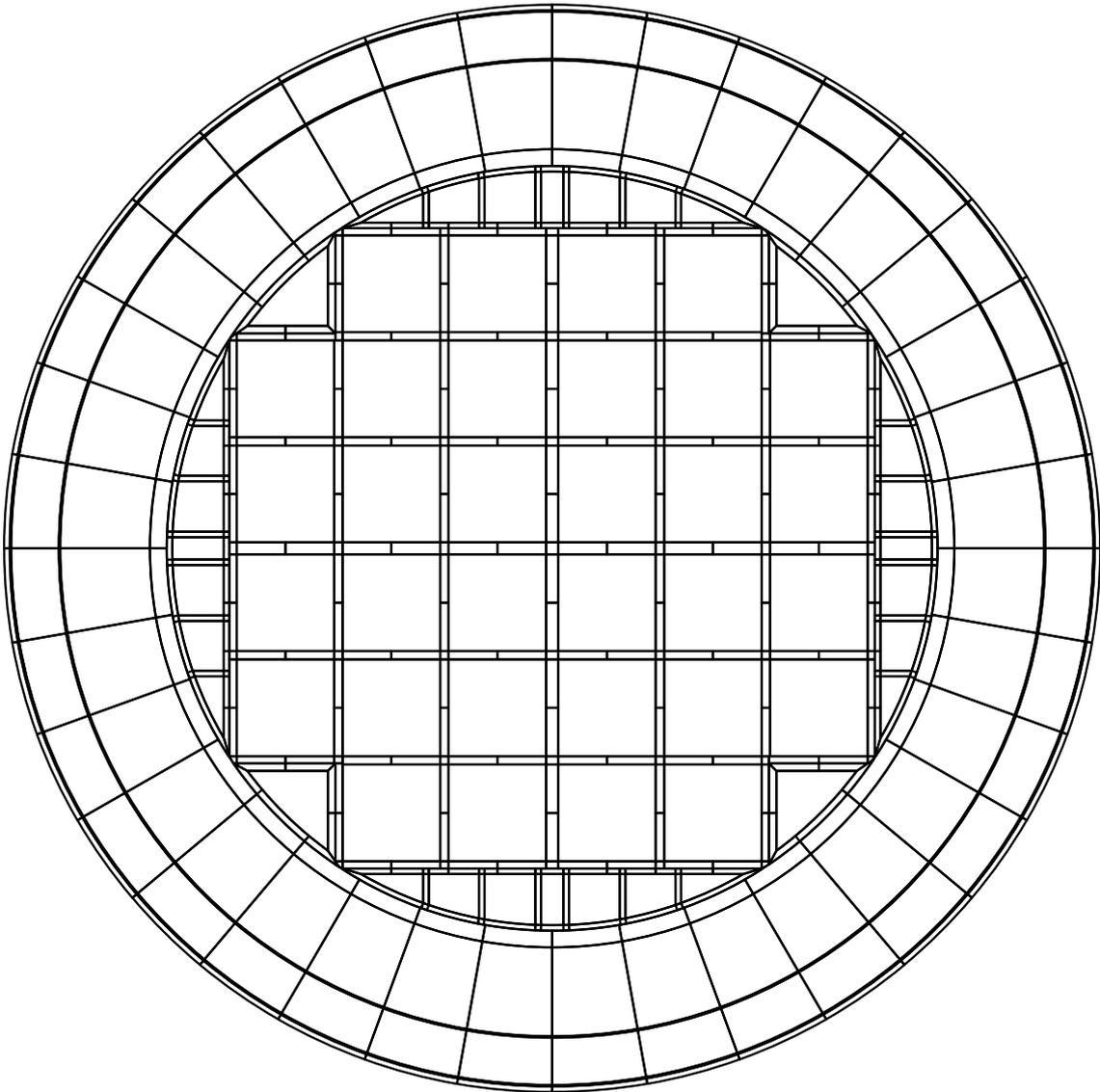


Abb. 8.7 Grafische Darstellung des Modells eines generischen Brennelementbehälters TN-32B

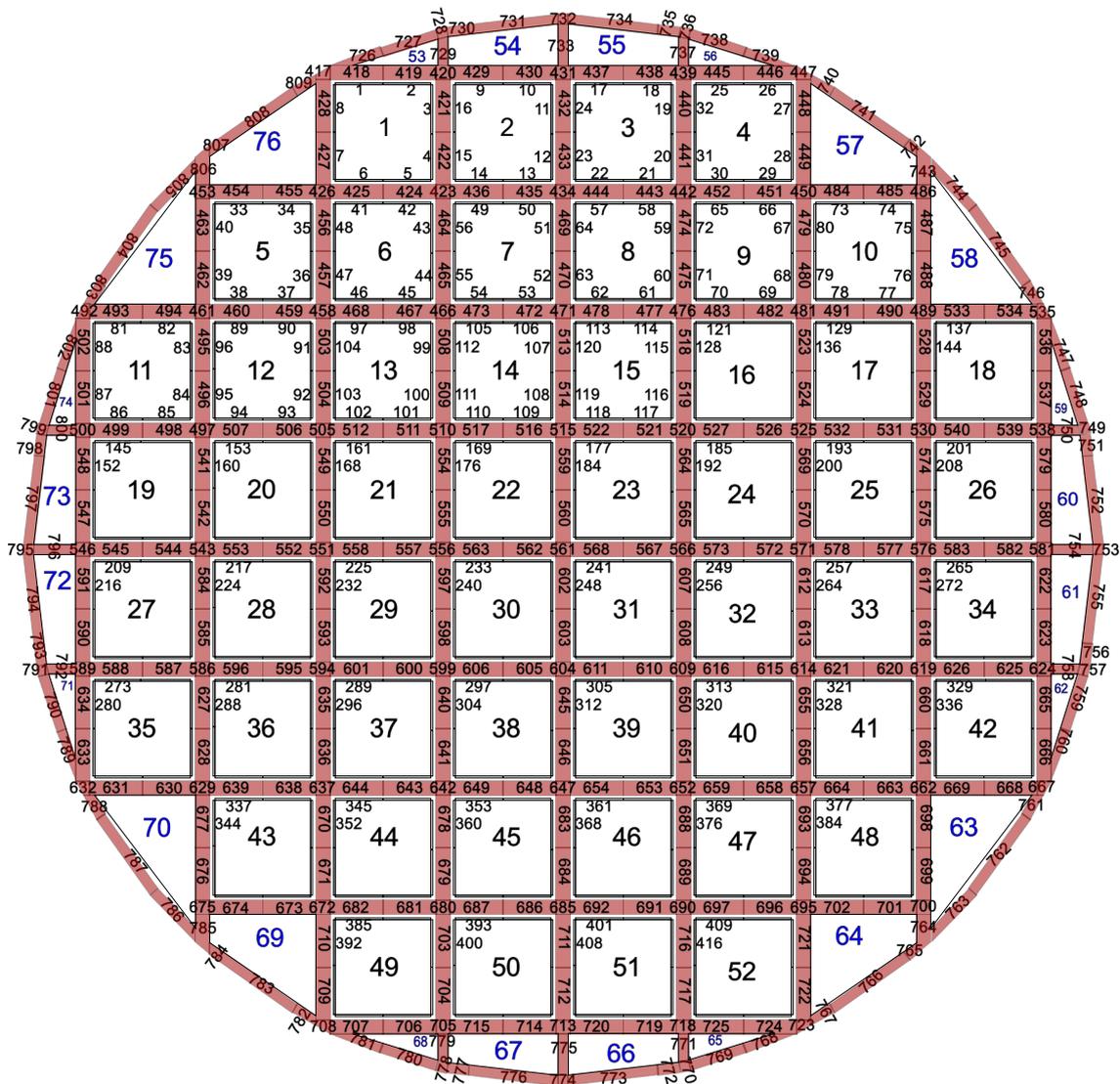


Abb. 8.8 Grafische Darstellung des Modells eines generischen Brennelementbehälters CASTOR® V/52

8.4 Entwicklungsstand

Mit dem Entwicklungszustand von BUTTERBREZN bei Projektabschluss werden die anvisierten Ziele nicht vollständig erreicht. So fehlt ein Auswahldialog für die mit TESPA-ROD zu rechnenden Brennstäbe, die Möglichkeit, diese Simulationen mit Parametern zu versehen und die Erzeugung der entsprechenden Konfigurationsdateien. Das liegt unter anderem daran, dass sich das programmatische Editieren von COBRA-SFS-Dateien als deutlich komplexer und zeitaufwendiger als erwartet herausgestellt hat. Außerdem befindet sich TESPA-ROD zurzeit in einem tieferegreifenden Wandel und hat während des Projekts sein Eingabeformat geändert. Zudem kann es aktuell nicht mehr von der

Kommandozeile gestartet werden. Andere Ziele, wie die 3D-Ergebnisvisualisierung von TESPА-ROD-Ergebnissen zur gleichzeitigen Darstellung mit COBRA-SFS-Simulationswerten wurden als nicht mehr sinnvoll erachtet, weil sich herausstellte, dass typischerweise nur wenige Stäbe gerechnet werden und damit der Sinn einer integrierten 3D-Ansicht fragwürdig erscheint.

Andererseits wurden durch die Programmierung von cobrasfsio generische Grundlagen geschaffen, auf deren Basis in Zukunft auch weitere COBRA-SFS-Parameter über die GUI zugänglich gemacht werden können. Außerdem bietet die geschaffene API einen schnellen Zugang zu den Ergebnisdaten, so dass ein 1D-Plotmodul zur einfachen Erzeugung von Abbildungen mit relativ geringem Aufwand geschaffen werden könnte. Über das Projektziel hinaus gehen auch die Kommandozeilenprogramme zur Fehlervermeidung bei der Datensatzerstellung und zur Konvertierung der Ausgabedaten, sowie die interaktive Eingabedatenansicht von BUTTERBREZN.

9 Zusammenfassung

Die noch andauernde Suche nach einem geeigneten Endlager machen eine Verlängerung der trockenen Zwischenlagerung von hochradioaktiven Abfällen zunehmend wahrscheinlich /BEC 22/. Die ab Einlagerungsbeginn über 40 Jahre erteilten Aufbewahrungsgenehmigungen beginnen im Zeitraum 2034 bis 2047 auszulaufen. Als Folge daraus muss die Einhaltung der Schutzziele der Transport- und Lagerbehälter nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik erneut nachgewiesen werden.

Dies erfordert eine Weiterentwicklung der wissenschaftlichen Grundlagen zur Bewertung des Langzeitverhaltens sowie die Bereitstellung entsprechend angepassten Analyse- und Bewertungsmethoden, da für Hüllrohre bestrahlter Brennelemente eine erhöhte Sprödbruchempfindlichkeit bei mechanischen Belastungen bis zu nachfolgendem Hüllrohrversagen bei Handhabungsvorgängen bzw. Transporten nicht ausgeschlossen werden kann. Ein wichtiger potenzieller Degradationsmechanismus ist die Versprödung der Hüllrohre durch Umorientierung und Wachstum von Zirkoniumhydriden. Im Laufe der längerfristigen Zwischenlagerung kann dies zum Versagen der Brennstabhüllrohre führen, wodurch eine wesentliche radiologische Schutzbarriere verlorengeht. Für eine Erneuerung der Aufbewahrungsgenehmigung ergeben sich daher Fragen hinsichtlich der Kritikalitätssicherheit sowie der Verhinderung der Freisetzung von radioaktivem Material (sicherer Einschluss) sowohl während der Zwischenlagerung als auch mit Blick auf eine potenzielle Konditionierung der Abfälle in Vorbereitung auf die Endlagerung.

Das vorliegende Eigenforschungsvorhaben verfolgte das Ziel, die GRS-Methoden zur Vorhersage des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung weiterzuentwickeln. Hierzu wurden die Modellierungsmöglichkeiten hinsichtlich der Simulation der Brennstabtemperaturen und des Brennstabverhaltens im Rahmen der GRS-Rechenkette zur Zwischenlagerung ausgebaut. Unter anderem wurde das GRS-Behälterrepertoire um ein generisches Modell ähnlich einem CASTOR® V/52 mit 10x10 oder 9x9 Brennelementen erweitert. Zusätzlich wurde das DWR-Behältermodell um 16x16 Brennelemente erweitert. Im Rahmen dieser Erweiterung, wurde der Einfluss der Brennelementedetailierung auf die Temperaturfeldsimulationen genauer untersucht. Hinsichtlich des SWR-Behältermodells wurden über einen fachlichen Austausch mit Experten anderer Organisationen ein *best-estimate* und ein konservativer Modellierungsansatz entwickelt. So konnte der Einfluss einzelner Modellierungsparameter im Detail erarbeitet werden. Anschließend wurden sowohl für das DWR- als auch das SWR-Behältermodell transiente Trocknungsprozesse simuliert und ausgewertet. Durch diese Arbeiten wurde wichtiges

Expertenwissen hinsichtlich der Handhabung und Modellerstellung für den Fremdcode COBRA-SFS gesammelt. Zusätzlich konnte die GRS-Aussagefähigkeit hinsichtlich der Simulation von Temperaturfeldern in Transport- und Lagerbehälter signifikant ausgebaut werden.

Hinsichtlich des Wasserstoffverhaltens in Brennstabhüllrohren wurde die im Vorgängervorhaben aufgestellte Datenbank der "terminalen Feststofflöslichkeit" (eng: terminal solid solubility (TSS)) ausgewertet und der Einfluss der Fitunsicherheiten auf die Vorhersage des Hydridverhaltens mit TESP-ROD näher untersucht. Es zeigte sich hier, dass die Unsicherheiten großen Einfluss auf den Zeitpunkt der Hydridausscheidung haben.

Um detailliertere Simulationen zu ermöglichen, wurde das TESP-ROD Hüllrohrmodell um radiale Zonen erweitert. Dies erlaubt die Auflösung der Hydridausscheidung innerhalb einer axialen Hüllrohrzone. Dadurch können potenzielle radiale Gradienten in der Hydridkonzentration, wie sie zum Beispiel in Hüllrohren mit Beschichtung auftreten, vorhergesagt werden. Hinsichtlich der Hydridynamik in Zirkoniumhüllrohren wurde zudem ein Hydridmodell nach Kampmann-Wagner aufgestellt, welches vorerst jedoch nicht weiterverfolgt wird, und ein Werkzeug zur Analyse von Hydridmorphologien in Hüllrohrschliffbildern entwickelt.

Um verlässlichere Vorhersagen des Einflusses von Zirkoniumhydriden auf die Bruchspannung von einem Hüllrohr zu ermöglichen, wurde ein FEM-Modell zur Simulation von Ringkompressionstests erstellt. Anschließend wurden mit dem Modell Ringkompressionen unter verschiedenen Hydridorientierungen simuliert und mit experimentellen Daten verglichen. Es zeigte sich, dass mit dem gewählten kontinuumsmechanischen Modellierungsansatz keine Aussagen über den Versagensmechanismus möglich waren. Daher sollten im nächsten Schritt Modellierungen der Delamination und der bruchmechanischen Effekte, wie sie beispielsweise in /SIM 22/ entwickelt wurden, durchgeführt werden.

Um eine bessere Einschätzung über die Verlässlichkeit der GRS-Rechenkette zur Zwischenlagerung zu erhalten, wurden mit COBRA-SFS und TESP-ROD detaillierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt. Für die COBRA-SFS Behältermodelle konnten so zahlreiche einflussreiche Parameter identifiziert werden. Interessanterweise zeigten sich hier deutliche Unterschiede zwischen dem DWR- und SWR-Behältermodell.

Um die GRS-Zwischenlagerrechenkette zugänglicher zu machen, wurde eine graphische Benutzeroberfläche geschaffen. Der aktuelle Funktionsumfang ermöglicht unter anderem die Manipulation von COBRA-SFS Eingabedaten. So können beispielsweise die Umgebungstemperatur, die Nachzerfallswärmeleitung oder das axiale Leistungsprofil einfach und ohne potentielle Fehler auch von Personen ohne Expertenwissen abgeändert werden.

Insgesamt zeigt sich zudem, dass der Brennstab-Code TESPА-ROD weiteren Entwicklungsbedarf hat, um den Anforderungen von Zwischenlagersimulationen vollständig gerecht zu werden. TESPА-ROD wurde ursprünglich zur Simulation von betrieblichen Transienten und Störfällen entwickelt. Diese Phänomene spielen sich alle in Zeiträumen von Sekunden bis Minuten ab. Zur Vorhersage des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung müssen jedoch Zeiträume von Jahren bis Jahrhunderten betrachtet werden. Viele der derzeit in TESPА-ROD implementierten Modelle sowie die allgemeine Zeitschrittbeziehung zeigen jedoch Schwächen bzw. Ineffizienzen bei Berechnungen über solche lange Zeiträume.

Eine effiziente Implementierung eines ausreichend detaillierten Hybridmodells in TESPА-ROD gestaltet sich schwierig und es sind kontinuierlich weitere Arbeiten erforderlich, damit die Modelle des Brennstabcodes TESPА-ROD auch zukünftig den aktuellen und internationalen Stand von Wissenstand und Technik beschreiben. Für die Entwicklung von Modellen zur Simulation der Zwischenlagerung wichtige Experimente (zum Beispiel bei (sehr) niedrigen Abkühlraten), befinden sich in der Durchführung (zum Beispiel im Rahmen des Eigenforschungsvorhabens RS1586A SPIZWURZ) oder sind in der Planung. Diese Experimente werden teilweise von der GRS begleitet und ausgewertet. Die hieraus gewonnenen Erkenntnisse fließen umgehend in die Modelle von TESPА-ROD ein.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	GRS-Rechenkette zur Vorhersage des Brennstabverhaltens in der Zwischenlagerung.....	5
Abb. 3.2	Schematische Darstellung der Hydrid-Reorientierung.....	8
Abb. 3.3	Lösungsverhalten des Wasserstoffs im Hüllrohr in Abhängigkeit der Temperatur.....	9
Abb. 3.4	Links: Vergleich der berechneten Hüllrohrtemperaturen. Rechts: Visualisierung der COBRA-SFS Ergebnisse mit ParaView	12
Abb. 3.5	Auswertung des Blind-Benchmarks zur Nachrechnung experimentell bestimmter Temperaturen eines beladenen TN-32 Behälters	13
Abb. 4.1	Schematische Darstellung der verschiedenen, an dem generischen GRS DWR-Behältermodell variierten Plenumsmodellansätze.....	15
Abb. 4.2	Schematische Darstellung der Modellierung des Behältermantels.....	17
Abb. 4.3	Axiale Hüllrohrtemperaturen der Brennelemente 10 und 1 im generischen CASTOR®-V/19 Modell für fünf verschiedene Plenumstypen.....	18
Abb. 4.4	Axiale Behälteroberflächentemperatur im generischen CASTOR®-V/19 Modell für fünf verschiedene Plenumstypen	18
Abb. 4.5	Schematische Darstellung eines horizontalen Ausschnitts aus dem generischen COBRA-SFS CASTOR® V/52 Behältermodell	21
Abb. 4.6	Schematische Darstellung eines horizontalen Ausschnitts aus einem generischen 10x10 SWR-Brennelement (links).....	22
Abb. 4.7	Nachzerfallsleistung (a) und axiales Leistungsprofil (b)) eines generischen 10x10 SWR-Brennelement mit einem Abbrand von 55 GWd/tSM.....	22
Abb. 4.8	Axiale Temperaturprofile aus drei Brennelementen an den gekennzeichneten Positionen aus dem generischen CASTOR® V/52 Modell (homogene Beladung 40 kW).....	23
Abb. 4.9	Radiale Temperaturprofile aus dem Brennelement 22 an drei verschieden axialen Positionen im generischen CASTOR® V/52 Modell (homogene Beladung 40 kW).....	24
Abb. 4.10	Schematische Darstellung der drei variierten SWR-Brennelementtypen. Die in dunkelblau Positionen haben jeweils keine Nachzerfallsleistung	26

Abb. 4.11	Axiale Temperaturprofile des jeweils heißesten Brennstabs für drei verschiedene Brennelementtypen.....	27
Abb. 4.12	Falschfarbendarstellung der Heliumflussgeschwindigkeit in den Unterkanälen der Brennelementtypen 1 und 2.....	27
Abb. 4.13	Schematische Darstellung der zwei DWR-Brennelementtypen.....	28
Abb. 4.14	Radiales Temperaturprofil des zentralen Brennelements im DWR-Behältermodell für die Brennelementtypen 4 (DWR-18x18) und Typ 5 (DWR-16x16).....	29
Abb. 4.15	Radiales Temperaturprofil des zentralen Brennelements im DWR-Behältermodell für die Brennelementtypen 4 und Typ 5.....	30
Abb. 4.16	Schematische Darstellung vier verschiedener SWR-Behälterszenarien mit unterschiedlicher Tragkorbposition	31
Abb. 4.17	Axiale Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für vier verschiedene Tragkorbpositionen	32
Abb. 4.18	Axiale Temperaturprofile der Behälteroberfläche an der heißesten Position für vier verschiedene Tragkorbpositionen.....	33
Abb. 4.19	Axiale Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für das <i>best-estimate</i> Modell	34
Abb. 4.20	Vergleich der axialen Temperaturprofile des heißesten Brennstabs für das <i>best estimate</i> Modell und die konservativen Modelle mit 9x9 und 10x10 SWR-Brennelementen	36
Abb. 4.21	Axiale Temperaturprofile der Behälteroberfläche an der heißesten Position für das <i>best-estimate</i> Modell und die konservativen Modelle mit 9x9 und 10x10 SWR-Brennelementen	36
Abb. 4.22	Maximale Hüllrohrtemperatur für die einfache Trocknungstransiente in einem DWR-Behälter Szenario	39
Abb. 4.23	Maximale Hüllrohrtemperatur für die einfache Trocknungstransiente in einem SWR-Behälter Szenario	40
Abb. 4.24	Maximale Hüllrohrtemperatur für die mehrstufige Trocknungstransiente in einem DWR-Behälter Szenario	41
Abb. 4.25	Darstellung aller TSS Daten aus der GRS Datenbank mit Messfehlern. Eine Arrhenius-Gleichung wurde mittels orthogonaler Regression an die Daten gefittet.....	43

Abb. 4.26	Darstellung der besten TSSd und TSSp Fits mit den jeweiligen Unsicherheiten für Zircaloy-4	45
Abb. 4.27	Simulation des Hydridverhaltens mit TESP-ROD für verschiedene TSSd und TSSp Fits	46
Abb. 4.28	Vergleich der TSS-Fits selektiert nach dem Hüllrohrmaterial Zircaloy-2 (links) und nach der verwendeten Analyseverfahren (rechts)	47
Abb. 4.29	Axiale Wasserstoffverteilung des Beispiels A, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)	50
Abb. 4.30	Axiale Wasserstoffverteilung des Beispiels B, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)	52
Abb. 4.31	Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels C, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)	54
Abb. 4.32	Zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels C in Level 1	55
Abb. 4.33	Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels D, nach Leveln aufgelöst. Beginnend mit Level 1 (links oben) und endend mit Level 4 (rechts unten)	57
Abb. 4.34	Zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels D in Level 1	58
Abb. 4.35	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E	59
Abb. 4.36	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E für einen Zeitraum von 30 Minuten	60
Abb. 4.37	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel E für einen Zeitraum von 30 Minuten gemittelt über alle radialen Zonen	61
Abb. 4.38	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel F	62
Abb. 4.39	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel F für einen Zeitraum von 30 Minuten	63
Abb. 4.40	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel G	64

Abb. 4.41	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Zeit basierend auf dem Beispiel G für einen Zeitraum von 30 Minuten	65
Abb. 4.42	Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels H für den gesamten Zeitraum von etwa 1750 Tagen, nach Leveln aufgelöst.....	67
Abb. 4.43	Axiale und zonale Wasserstoffverteilung des Beispiels H für einen ausgewählten Zeitraum, nach Leveln aufgelöst	68
Abb. 4.44	Differentialgleichungen zur Beschreibung der Hydridkeimbildung und des Hydridwachstums nach Kampmann-Wagner.....	69
Abb. 4.45	Schematische Darstellung der Hydridverteilung auf die Größenklassen sowie der Hydridynamik durch Keimbildung, Wachstum und Schrumpfung.....	70
Abb. 4.46	Vergleich des KWN-Modells mit den Hydridmodellen der Brennstabcodes TESPА-ROD und BISON	72
Abb. 4.47	Durch das KWN-Modell vorhergesagte Hydridgrößenverteilung und Hydridichte.....	73
Abb. 4.48	Darstellung des Arbeitsablaufes zur Bildbearbeitung in Vorbereitung auf die Hydridanalyse	75
Abb. 4.49	Darstellung des aus der Skeletanalyse entstandenen Vektorsystems (oben). Darstellung des Vektorsystems nach Reduzierung auf jeweils einen Anfangs- und Endpunkt (unten).....	76
Abb. 4.50	Darstellung des Ergebnisses der „nächsten Nachbar“ Analyse und der daraus erzeugten verbundenen Skelettstruktur.....	77
Abb. 4.51	Darstellung der Hydridstruktur des ausgewerteten Schliiffbilds als Balkendiagramm.....	78
Abb. 4.52	Prinzipieller experimenteller Aufbau der Ringdrucktests	79
Abb. 4.53	Schichtstruktur von oxidiertem Zry-4 und M5 /BIL 08/	80
Abb. 4.54	Geometrie und Randbedingungen des ANSYS Modells (links), Gitternetz des ANSYS Modells (mittig) und ADINA Modells (rechts).....	80
Abb. 4.55	Spannungs-Dehnungskurve für Zry-4 mit ECR = 10 %, oxidiert bei 1200 °C, E-Modul: 94,2 GPa	81
Abb. 4.56	Vergleich der Last-Verformungs-Funktion zwischen ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts).....	82
Abb. 4.57	Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrensweg 0,4 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts).....	82

Abb. 4.58	Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrweg 0,8 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts).....	82
Abb. 4.59	Verteilung der Vergleichsspannungen bei Verfahrweg 1,2 mm im ADINA Modell (links) und ANSYS Modell (rechts).....	83
Abb. 4.60	Geometrie und Randbedingungen der Modellvarianten mit einem Hydrid in Umfangsrichtung (oben links) und neun radialen Hydriden und Netzverfeinerung (oben rechts), Nodalisierung im Hydridbereich (jeweils darunter)	84
Abb. 4.61	Spannungs-Dehnungs-Verhalten der verwendeten Werkstoffmodelle	85
Abb. 4.62	Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation ohne und mit elastisch modellierten Hydriden zusammen mit experimentell ermittelten Kurven für ein Hüllrohr aus M5 ohne und mit Hydriden /BIL 11, BIL 12/.....	86
Abb. 4.63	Spannungsniveau im elastisch modellierten Hydrid nahe der Platte im Modell mit neun radialen Hydriden und Hüllrohrwerkstoff M5 zum Zeitpunkt des Versagens im Experiment.....	87
Abb. 4.64	Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation mit verschiedenartig modellierten Hydriden und experimentell ermittelte Kurve für ein Hüllrohr aus M5 mit Hydriden /BIL 11/	88
Abb. 4.65	Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids als „Lücke“ im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus M5 bei Verfahrweg 0,4 mm	89
Abb. 4.66	Ausgewählte Last-Verformungs-Kurven der Simulation mit verschiedenartig modellierten Hydriden Hüllrohre aus M5 und Zry-4	89
Abb. 4.67	Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids mit begrenzter Tragfähigkeit im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus Zr-4 bei Verfahrweg 0,43 mm, Tragfähigkeit des Hydrids am unteren Ende erreicht	91
Abb. 4.68	Spannungsniveau bei Modellierung des Hydrids mit begrenzter Tragfähigkeit im Modell mit neun radialen Hydriden für ein Hüllrohr aus Zr-4 bei Verfahrweg 1,04 mm, Tragfähigkeit von Hydrids und Restligament überschritten	91
Abb. 5.1	Positionen der Temperaturbestimmungen zur Unsicherheitsanalyse in den generischen DWR und SWR-Behältern.....	94
Abb. 5.2	Auswertung der Unsicherheitsanalyse der generischen DWR- und SWR-Behältermodelle	97

Abb. 5.3	Sensitivitätsanalyse des generischen DWR-Behältermodell hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur (oben) und der Oberflächentemperatur (unten).....	99
Abb. 5.4	Sensitivitätsanalyse des generischen SWR-Behältermodell hinsichtlich der maximalen Hüllrohrtemperatur (oben) und der Oberflächentemperatur (unten).....	101
Abb. 5.5	Sensitivitätsanalyse der generischen SWR- und DWR-Behältermodelle hinsichtlich der Hüllrohrtemperatur in den äußeren Brennelementen	102
Abb. 5.6	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse in 200 Zwischenlagerszenarien für sechs verschiedene Parameter	108
Abb. 5.7	Sensitivitätsanalyse der Umfangsspannung und des Hüllrohrinnendruck simuliert mit TESP-ROD für ein Zwischenlagerszenario	110
Abb. 5.8	Sensitivitätsanalyse der Spaltweite und des Brennstoffradius simuliert mit TESP-ROD für ein Zwischenlagerszenario	111
Abb. 7.1	Temperatur- und Druckrandbedingung für die Simulation des Brennstabverhaltens im Rahmen des GRS-Benchmark zum Brennstabverhalten während der trockenen Zwischenlagerung	116
Abb. 7.2	Axiale Verteilung der Hüllrohrdehnung des Zry-4 Brennstabs 10 Jahre nach Ende der Nasslagerung.....	118
Abb. 7.3	Axiale Verteilung der Hüllrohrdehnung des Zry-4 Brennstabs 100 Jahre nach Ende der Nasslagerung.....	119
Abb. 7.4	Schema des Behältermodells, das die Nodalisierung der verschiedenen Strukturen zeigt.....	121
Abb. 7.5	Vergleich der axialen Temperaturprofile der Brennstäbe an den Positionen der Thermoelemente im HBU DEMO Behälter	123
Abb. 7.6	Vergleich der Temperaturunterschiede zu den Messungen im HBU DEMO Behälter	124
Abb. 8.1	BUTTERBREZN: Dialog zur Erstellung eines neuen Projekts.....	126
Abb. 8.2	BUTTERBREZN: Erstellen, Einlesen und Verwalten von Leistungsprofilen.....	127
Abb. 8.3	BUTTERBREZN: Konfiguration der Leistung der Brennelemente	128

Abb. 8.4	BUTTERBREZN: Interaktive Darstellung der COBRA-SFS- Eingabedatei.....	129
Abb. 8.5	cobrasfsio: Darstellung der Topologie der Kühlmittelkanäle in einem Brennelement mit lc2dot	130
Abb. 8.6	cobrasfsio: Darstellung der Topologie der Wärmeleitelemente mit kwal2dot	131
Abb. 8.7	Grafische Darstellung des Modells eines generischen Brennelementbehälters TN-32B.....	133
Abb. 8.8	Grafische Darstellung des Modells eines generischen Brennelementbehälters CASTOR® V/52	134

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1	Vergleich potenziell einflussreiche Unterschiede in einem <i>best-estimate</i> und einem konservativen Modellierungsansatz für das generische CASTOR® V/52 Modell der GRS	31
Tab. 4.2	Startbedingungen für die Beispielrechnung: Beispiel A.....	49
Tab. 4.3	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel B.....	51
Tab. 4.4	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel C.....	53
Tab. 4.5	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel D.....	56
Tab. 4.6	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel E.....	59
Tab. 4.7	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel F	62
Tab. 4.8	Startbedingung für die Beispielrechnung: Beispiel H.....	66
Tab. 4.9	Übersicht zu den untersuchten Modellvarianten	85

Literaturverzeichnis

- /AHR 05/ Ahrens, J, Geveci, B, Law, C: ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization. Energy, Nr. 836, S. 717–732, 2005.
- /AUZ 22/ Auzoux, Q., Bouffieux, P., Machiels, A., Yagnik, S., Bourdilliau, B., Mallet, C., Mozzani, N., Colas, K.: Hydride reorientation and its impact on mechanical properties of high burn-up and unirradiated cold-worked stress-relieved Zircaloy-4 and Zirlo™ fuel cladding. Journal of Nuclear Materials, Bd. 568, S. 153893, DOI 10.1016/j.jnucmat.2022.153893, 2022.
- /BEC 22/ Becker, J., Schneider-Eickhoff, R., Stuke, M.: Das Forschungsprogramm der BGZ. Hrsg.: BGZ, 2022.
- /BEH 14/ Behler, M., Bock, M., Rowold, F., Stuke, M.: SUnCISTT - A Generic Code Interface for Uncertainty and Sensitivity Analysis. In: PSAM 12. Probabilistic Safety Assessment and Management, Honolulu, Hawaii, USA, 22. - 27. Juni 2014, 2014.
- /BEN 18/ Bengtsson, M.: Blind Test— Code Comparison Exercise. Hrsg.: OECD/NEA: Paris, Frankreich, 6. April 2018.
- /BIL 13/ Billone, M. C., Burtseva, T. A., Einziger, R. E.: Ductile-to-brittle transition temperature for high-burnup cladding alloys exposed to simulated drying-storage conditions. Journal of Nuclear Materials, Bd. 433, Nr. 1-3, S. 431–448, DOI 10.1016/j.jnucmat.2012.10.002, 2013.
- /BOL 19a/ Boldt, F.: Implementation of Hydrogen Solid Solubility Data and Precipitation Threshold Stresses in the Fuel Rod Code TESP-ROD. Nuclear Engineering and Radiation Science, DOI 10.1115/1.4042118, 2019.
- /BOL 19b/ Boldt, F., Sonnenburg, H.-G.: Transient MOX fuel swelling in TESP-ROD code applied at CABRI RIA tests. Proceedings of GLOBAL/TOPFUEL 2019, 2019.

- /BOL 20/ Boldt, F., Sonnenburg, H.-G.: Brennstabverhalten im Betrieb und bei Störfällen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS-609, 85 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, September 2020.
- /BOL 22/ Boldt, F., Stuke, M., Péridis, M.: Benchmark on Thermomechanical Fuel Rod Behaviour, Phase I Report. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS -, Nr. 671: Garching b. München, April 2022.
- /CHR 23/ Christian Götz: Längerfristige Zwischenlagerung von hochradioaktiven Abfällen. Hrsg.: Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Reaktorsicherheit und Verbraucherschutz (BMUV): Hannover, 2023.
- /CSO 18/ Csontos, A. A., Renshaw, J.: Thermal Modeling: A Benchmark Study, Regcon, 12. Dezember 2018.
- /ENT 23/ Entsorgungskommission (ESK): Verlängerte Zwischenlagerung bestrahlter Brennelemente und sonstiger hochradioaktiver Abfälle in Abhängigkeit von der Auswahl des Endlagerstandorts, POSITIONSPAPIER. 2023.
- /EPRI 11/ Electric Power Research Institute (EPRI): Extended Storage Collaboration Program (ESCP) Progress Report and Review of Gap Analysis, Technical Report. Nr. 1022914: Palo Alto, California, 2011.
- /EPRI 20/ J. Fort, B. Hanson, D. Richmond: International Thermal Modeling Benchmark Description for a High Burnup Used Fuel Dry Storage System, An Extended Storage Collaboration Program Activity. Electric Power Research Institute (EPRI), Nr. 3002018498, 2020.
- /EPRI 21/ Electric Power Research Institute (EPRI): Evaluation of Fuel-Cladding Debonding Conditions on the Response of High Burnup Spent PWR Fuel Subjected to Dry Storage and Transportation Accidents, Technical Report. Nr. 3002020527, 2021.

- /EPRI 22/ Electric Power Research Institute (EPRI): International Thermal Modeling Benchmark Project – Phase I Results: An Extended Storage Collaboration Program Activity, Technical Report. Nr. 3002023976, 2022.
- /GNS 22/ GNS: Produktinformation CASTOR V/19. Erreichbar unter <https://www.gns.de/language=de/21523/castor-v-19>, abgerufen am 10. Januar 2022.
- /HAN 17/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: MOTIVE - A New Modular Burn-up Code. In: American Nuclear Society (ANS): International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. M&C 2017, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017, ISBN 978-1-5108-5645-5, Curran Associates, Inc.: Red Hook, NY, USA, 2017.
- /HÖH 72/ Höhle, B.: Die physikalischen Eigenschaften von Gasgemischen mit H₂, CH₄, H₂O, N₂, CO und CO₂. Kernforschungsanlage Jülich, Verlag, Berichte der Kernforschungsanlage Jülich, Bd. 847, Juel-0847-RB, 44, [24], p: Jülich, 1972.
- /ILA 21/ Ila, G., Burns, J. R.: SCALE 6.2.4 Validation for Light Water Reactor Decay Heat Analysis. Nuclear Technology, S. 1–11, DOI 10.1080/00295450.2021.1935165, 2021.
- /IVA 18/ Ivanov, K.: Three Dimensional Fuel Pin Model Validation by Prediction of Hydrogen Distribution in Cladding and Comparison with Experiment, Final Report, Project Nr. 13-5180. Hrsg.: Nuclear Energy University Programs (NEUP), U.S. Department of Energy (DOE), 13-5180 NEUP, 139 S., 2018.
- /KAU 18/ Kaufholz, P., Stuke, M., Boldt, F., Péridis, M.: Influence of kinetic Effects on Terminal Solid Solubility of Hydrogen in Zirconium Alloys. Journal of Nuclear Materials, Bd. 510, S. 277–281, DOI 10.1016/j.jnucmat.2018.08.011, 2018.
- /KON 21/ Konarski, P., Cozzo, C., Khvostov, G., Ferroukhi, H.: Spent nuclear fuel in dry storage conditions – current trends in fuel performance modeling. Journal of Nuclear Materials, Bd. 555, S. 153138, DOI 10.1016/j.jnucmat.2021.153138, 2021.

- /LEB 09/ A. Leber, D. Hoffmann: Berechnungsmethoden für den Nachweis der Hüllrohrintegrität bei der trockenen Langzeitzwischenlagerung von Brennelementen in CASTOR V-Behältern. In: Kerntechnische Gesellschaft e.V. (KTG) (Hrsg.): Jahrestagung Kerntechnik 2009. Nr. 408, 2009.
- /MAR 22/ Maric, M., Thomas, R., Nunez-Iglesias, J., Atkinson, M., Bertsch, J., Frankel, P., Race, C., Barberis, P., Bourlier, F., Preuss, M., Shanthraj, P.: A novel method for radial hydride analysis in zirconium alloys: HAPPy. *Journal of Nuclear Materials*, Bd. 559, S. 153442, DOI 10.1016/j.jnucmat.2021.153442, 2022.
- /MIC 17/ Michener, T. E., Rector, D. R., Cuta, J. M., Atkins, H. E., JR.: COBRA-Sfs: A Thermal-Hydraulic Analysis Code for Spent Fuel Storage and Transportation Casks Cycle 4a. Pacific Northwest National Laboratory (PNNL), PNNL-24841, Oktober 2017.
- /MOT 19/ Motta, A. T., Capolungo, L., Chen, L.-Q., Cinbiz, M. N., Daymond, M. R., Koss, D. A., Lacroix, E., Pastore, G., Simon, P.-C. A., Tonks, M. R., Wirth, B. D., Zikry, M. A.: Hydrogen in zirconium alloys: A review. *Journal of Nuclear Materials*, Bd. 518, S. 440–460, DOI 10.1016/j.jnucmat.2019.02.042, 2019.
- /PAS 20/ Passelaigue, F., Lacroix, E., Pastore, G., Motta, A. T.: Implementation and Validation of the Hydride Nucleation-Growth-Dissolution (HNGD) model in BISON. *Journal of Nuclear Materials*, DOI 10.1016/j.jnucmat.2020.152683, 2020.
- /PER 08/ Perez, M., Dumont, M., Acevedo-Reyes, D.: Implementation of classical nucleation and growth theories for precipitation. *Acta Materialia*, Bd. 56, Nr. 9, S. 2119–2132, DOI 10.1016/j.actamat.2007.12.050, 2008.
- /PÉR 19a/ Péridis, M., Küntzel, M., Stuke, M.: Temperature fields of loaded spent fuel cask. In: Stuke, M. (Hrsg.): SEDS2019 - 3rd Workshop on Safety of Extended Dry Storage of Spent Nuclear Fuel. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Garching, 5. - Juni 2019, 2019.

- /PÉR 19b/ Péridis, M., Sentuc, F., Sonnenkalb, M., Stewering, J., Stuke, M.: Analysis of 3-dimensional Temperature Fields of Loaded Dry Storage Casks. In: PATRAM 2019 (Hrsg.): Proceedings of the 19th International Symposium on the Packaging and Transportation of Radioactive Materials, PATRAM 2019. 4. - 9. August 2019: New Orleans, LA, USA, 2019.
- /PIO 21/ Piotr, K.: Extension of Falcon's modelling capabilities to dry storage: development of a new model for hydrogen behavior in duplex claddings. In: European Nuclear Society: Brussels (Hrsg.): TopFuel2021. Santander, Spain, 24. - 28. Oktober 2021, S. 10 pp, 2021.
- /PUL 12/ Puls, M. P.: The effect of hydrogen and hydrides on the integrity of zirconium alloy components, Delayed hydride cracking / Manfred P. Puls. Engineering materials, 1612-1317, ISBN 9781447141945, DOI 10.1007/978-1-4471-4195-2, Springer: London, 2012.
- /REA 17/ Rearden, B. T., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.2, 2747 S.: Oak Ridge, Tennessee, Februar 2017.
- /ROB 23/ Robin K Andersson: SCIP IV Subtask 1.1 - Creep and hydride reorientation of fuel rods under simulated dry storage conditions - Update and Discussion, Statusreport. Studsvik, 3. Februar 2023.
- /ROM 15/ Romano, P. K., Horelik, N. E., Herman, B. R., Nelson, A. G., Forget, B., Smith, K.: OpenMC, A state-of-the-art Monte Carlo code for research and development. Annals of Nuclear Energy, Bd. 82, S. 90–97, DOI 10.1016/j.anucene.2014.07.048, 2015.
- /SIM 21/ Simon, P.-C. A., Frank, C., Chen, L.-Q., Daymond, M. R., Tonks, M. R., Motta, A. T.: Quantifying the effect of hydride microstructure on zirconium alloys embrittlement using image analysis. Journal of Nuclear Materials, Bd. 547, S. 152817, DOI 10.1016/j.jnucmat.2021.152817, 2021.

- /SPY 18/ Spykman, G.: Dry storage of spent nuclear fuel and high active waste in Germany—Current situation and technical aspects on inventories integrity for a prolonged storage time. *Nuclear Engineering and Technology*, Bd. 50, Nr. 2, S. 313–317, DOI 10.1016/j.net.2018.01.009, 2018.
- /STE 20/ Steinhoff, T., Jacht, V.: Weiterentwicklung und Ausbau numerischer Strukturen in den AC2-Programmen ATHLET und COCOSYS. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-, Bd. 600, 108 S., ISBN 9783947685868, August 2020.
- /STE 21/ T. Stegmüller, F. Boldt, D. Nahm: Approaches to Modelling Hydride Precipitation in Zirconium Cladding Materials. In: 5th Safety of Extended Dry Storage of Used Nuclear Fuel, SEDS workshop. Garching, Germany, 2021.
- /STU 20/ Stuke, M., Arndt, J., Boldt, F., Hannstein, V., Kaufholz, P., Péridis, M., Sievers, J., Sommer, F.: Langzeitverhalten zwischengelagerter Brennelemente bei deutlich längerer Zwischenlagerung. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-554, GRS-554, ISBN 978-3-947685-39-4, Juni 2020.
- /VAN 14/ van der Walt, S., Schönberger, J. L., Nunez-Iglesias, J., Boulogne, F., Warner, J. D., Yager, N., Gouillart, E., Yu, T., the scikit-image contributors: scikit-image: image processing in Python. *PeerJ*, Bd. 2, S. E453, DOI 10.7717/peerj.453, 2014.
- /WIL 12/ Williamson, R. L., Hales, J. D., Novascone, S. R., Tonks, M. R., Gaston, D. R., Permann, C. J., Andrs, D., Martineau, R. C.: Multidimensional multiphysics simulation of nuclear fuel behavior. *Journal of Nuclear Materials*, Bd. 423, Nr. 1, S. 149–163, DOI 10.1016/j.jnucmat.2012.01.012, 2012.
- /WIL 18/ William Lyon, Anh Mai, Wenfeng Lui, Nathan Capps, Joa Rashid, Albert Machiels, Keith Waldrop: Impact of Fuel-Cladding Bonding on the Response of High-Burnup Spent PWR Fuel Subjected to Dry Storage and Transportation Accidents. In: *European Nuclear Society: Brussels* (Hrsg.): TopFuel 2018. Prague, Czech Republic, 2018.

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de