

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

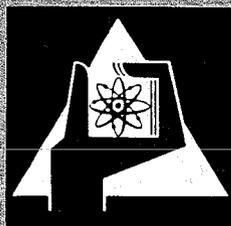
März 1972

KFK 1577

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

Anisotrope Diffusion
bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren

E. Eise mann



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

März 1972

KFY 1577

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik
Projekt Schneller Brüter

Anisotrope Diffusion bei gasgekühlten,
schnellen Brutreaktoren⁺

E. Eisemann

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

⁺Dissertation, genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Karlsruhe

K u r z f a s s u n g

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Berechnung anisotroper Diffusionseffekte (Streamingeffekte) in Zellgittern von gasgekühlten schnellen Brutreaktoren. Zu diesem Zweck werden im Rahmen eines Multigruppenformalismus Ausdrücke für die Komponenten einer richtungsabhängigen Diffusionskonstanten abgeleitet, wobei die Anisotropie der elastischen Streuquerschnitte exakt bis zum 1. Moment berücksichtigt wird. Weiter werden Verfahren entwickelt, um die abgeleiteten Ausdrücke für die Komponenten der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten numerisch berechnen zu können. Schließlich wird noch, um den Einfluß dieser Größen auf Reaktorkenngrößen demonstrieren zu können, für einige Reaktorkonzepte der effektive Multiplikationsfaktor sowie die Kritikalitätsänderung bei Kühlmittelvariation bestimmt.

Die Arbeit ist an der Universität Karlsruhe als Dissertation angenommen. Referenten sind Prof. Dr. K. Wirtz und Prof. Dr. W. Kofink.

A b s t r a c t

This report deals with the calculation of anisotropic diffusion effects (streaming effects) in gas cooled fast reactor lattices. For this purpose, expressions have been derived for the components of a homogenized direction dependent cell diffusion coefficient. This was done in a multigroup formalism taking into account the anisotropy of the elastic scattering cross sections up to the first moment. In addition, expressions for the components of the direction dependent diffusion coefficient have been developed which can be evaluated numerically. To demonstrate the influence of this diffusion coefficient calculations have been performed to determine the effective multiplication factor and the criticality change due to coolant variations for certain reactor concepts.

This work has been accepted as thesis at the University of Karlsruhe. Referees are Prof. Dr. K. Wirtz and Prof. Dr. W. Kofink.

I n h a l t

I.	Einleitung	1
II.	Herleitung des Ausdrucks für eine richtungsabhängige Diffusionskonstante	12
	II. 1 Vorbetrachtung	12
	II. 2 Ausgangsgleichungen	12
	II. 3 Multigruppennäherung	16
	II. 4 Produktansatz für Fluß- und Stromdichte	18
	II. 5 Entwicklung der makroskopischen Komponenten von Fluß- und Stromdichte	22
	II. 6 Die Größen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}$	28
	II. 7 Zellhomogenisierung	32
	II. 8 Mikrostrom und Mikrofluß	36
	II. 9 Umformung des Ausdrucks für \bar{D}_{χ}^g	41
	II.10 Spezielle Gittersymmetrien	44
	II.11 Grenzfall des homogenen Mediums	45
III.	Berechnung der gerichteten mittleren freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und der gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ vom Medium i zum Medium k	47
	III. 1 Allgemeine Eigenschaften	47
	III. 2 Zylindersymmetrie	53
	III. 3 Allgemeine Überlegungen zur Berechnung der gerichteten mittleren freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und der gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$	54
	III. 4 Bickleyfunktionen	56
	III. 5 Berechnung der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone der Referenzzelle	62

	III. 6 Berechnung der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone der Referenzzelle	71
	III. 7 Reihenentwicklung des Integranden in den Ausdrücken für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen	76
	III. 8 Das Programm SRIJ	83
	III. 9 Diskussion der verwendeten Näherungen und der numerischen Ungenauigkeiten	87
IV.	Ergebnisse	96
	IV. 1 Hexagonales Brennstabgitter ohne Kühlmittel	96
	IV. 2 Grenzwertbetrachtungen für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Kühlmittelzone	100
	IV. 3 Einfluß der heterogenen Gitterstruktur auf die Kritikalität gasgekühlter schneller Brutreaktoren	104
	IV. 4 Einfluß der Heterogenität auf den Kühlmittelverlustkoeffizienten bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren	112
	IV. 5 Änderung der Kritikalität beim Reaktor-entwurf des KFZ mit der Wasserdampfdichte im Primärkreislauf	115
V.	Zusammenfassung	119
	Literatur	126
	Anhang	128
	Abbildungen	

I. Einleitung

Die Berechnung der nuklearen Eigenschaften schneller Brutreaktoren geschieht meist unter der Annahme, daß die einzelnen Reaktorzonen, wie z.B. Corezonen, Brutmäntel, Reflektoren usw., als homogen angesehen werden können. Diese Annahme ist in erster Näherung zulässig, da die Wegstrecken der Neutronen im schnellen Brutreaktor, die zwischen zwei Reaktionen zurückgelegt werden, d.h. die freien Weglängen, meist groß gegenüber den geometrischen Abmessungen der heterogenen Feinstruktur der Reaktorzonen sind. In Wirklichkeit besitzen die aus Brennstäben aufgebauten Reaktoren - und nur solche sollen hier betrachtet werden - eine gitterartige Struktur, die durch eine regelmäßige, z.B. hexagonale Anordnung der Brennstäbe gegeben ist. Man kann sich dabei etwas vereinfacht eine Reaktorzone als periodisches Gitter denken, das aus identischen Zellen aufgebaut ist. Eine Zelle besteht bei schnellen Reaktoren im wesentlichen aus dem Brennstab und dem zugehörigen Kühlmittelanteil.

Will man bei der Berechnung der nuklearen Eigenschaften schneller Brutreaktoren die heterogene Feinstruktur der einzelnen Reaktorzonen berücksichtigen, so treten gegenüber den Verhältnissen bei Reaktoren mit homogenisierten Zonen, d.h. Zonen in denen die einzelnen Materialien als gleichmäßig über die gesamte Zone verteilt angesehen werden, noch folgende Effekte hinzu:

1. Da in den heterogenen Gebieten die Materialien und damit auch die Wirkungsquerschnitte unterschiedlich sind, variiert die Energieverteilung der Neutronen innerhalb der Gitterstruktur. Dies gilt insbesondere für den Resonanzbereich der Querschnitte.

Werden Rechnungen im Rahmen des Multigruppenkonzepts [1], [2] durchgeführt, so benötigt man Gruppenquerschnitte, zu deren Erzeugung die Energieverteilung der Neutronen, d.h. das Neutronenspektrum bekannt sein muß. Ändert sich nun das Spektrum innerhalb der heterogenen Gitterstruktur des Reaktors merklich, so muß dies bei der Berechnung der Gruppenkonstanten berücksichtigt werden. Dabei ist zu beachten, daß in den Fällen, in denen dasselbe Resonanznuklid in verschiedenen Zonen einer Gitterzelle auftritt, die Resonanzselbstabschirmung [17] örtlich variiert. D. Wintzer hat in einer Arbeit [3] besonders den letzteren Effekt eingehend diskutiert und gezeigt [4], daß er bei schnellen Reaktoren vernachlässigbar klein ist.

2. Die Wanderung der Neutronen einer bestimmten Energie in einer Reaktorzone und damit auch die Leckage dieser Neutronen aus der Zone hängt in erster Näherung vom mittleren Quadrat der freien Weglänge ab. Dieses mittlere Quadrat der freien Weglänge in einer heterogenen Reaktorzone ist aber verschieden von demjenigen, welches sich für die homogenisierte Zone ergibt. Man erhält also bei der Berücksichtigung der Heterogenität eine geänderte Leckage. Diesem Einfluß der Heterogenität kommt dann eine größere Bedeutung zu, wenn die Gitterabstände groß sind und das Kühlmittel die Neutronenbewegung nur wenig beeinträchtigt.

In der vorliegenden Arbeit soll ein bestimmter Typ von schnellen Reaktoren, der gasgekühlte schnelle Brutreaktor, betrachtet werden. Bei diesem Reaktor-

typ wird die durch die Kernspaltung erzeugte Wärme von einem Gas (Helium) abgeführt, das zwischen dem aus Brennstäben gebildeten Gitter hindurchströmt. Verglichen mit den Wirkungsquerschnitten und Teilchenzahldichten des Brennstoffs oder des Hüllmaterials sind die Wirkungsquerschnitte und besonders die im Reaktor vorhandene Teilchenzahldichte des Kühlgases Helium klein, so daß das Kühlgas nur einen sehr geringen Einfluß auf die nuklearen Daten eines heliumgekühlten schnellen Brutreaktors hat [5]. Deshalb ändert das Kühlgas die Energieverteilung der Neutronen praktisch nicht. Das Neutronspektrum wird im wesentlichen durch die Reaktionen der Neutronen mit dem Brennstoff bestimmt. (Das Hüllmaterial ist wegen der geringen Wandstärke ebenfalls nur von geringem Einfluß auf die Energieverteilung der Neutronen). Daraus ergibt sich, daß alle unter Punkt 1 angeführten Heterogenitätseffekte bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren vernachlässigt werden können.

Demgegenüber spielt der unter Punkt 2 angesprochene Heterogenitätseffekt, der die Leckage beeinflusst, bei derartigen Reaktoren eine gewisse Rolle. Die Unterschiede in der Leckage aus einer homogenisierten Reaktorzone und einer heterogenen Zone sind, wie bereits angedeutet, um so größer, je unterschiedlicher die totalen makroskopischen Querschnitte der Materialien sind, die die Heterogenität der Zonen bewirken, und je größer die geometrischen Abmessungen des Gitters verglichen mit der mittleren freien Weglänge der Neutronen sind. Auf Grund der oben erwähnten extremen Unterschiede zwischen Brennstab und Kühlgas hat trotz

der relativ großen freien Weglängen der Neutronen in einem gasgekühlten schnellen Reaktor die heterogene Struktur des Gitters einen merklichen Einfluß auf die Leckage. Hinzu kommt, daß bei gasgekühlten schnellen Reaktoren diejenigen Neutronen, deren Flugbahn annähernd parallel zu den Brennstäben verläuft, teilweise beträchtliche Wegstrecken längs der Brennstäbe im Kühlkanal zurücklegen können (Streamingeffekt). Aus den oben angeführten Gründen ist ja die mittlere freie Weglänge der Neutronen im Kühlgas sehr groß. Dieser Effekt wird noch dadurch verstärkt, daß, um eine ausreichende Wärmeabfuhr zu gewährleisten, der Brennstababstand im Gitter ziemlich groß und damit auch der Kühlmittelvolumenanteil ziemlich groß ist. Im Normalfall liegt der Kühlmittelvolumenanteil bei gasgekühlten schnellen Reaktoren zwischen 55 und 60 %. Das bedeutet aber, daß die Ausbreitungsbedingungen für Neutronen in einem solchen Gitter auf Grund der gerichteten Struktur quer und längs zu den Brennstäben verschieden sind. Das Medium (Reaktorzone) besitzt also Anisotropieeigenschaften.

Es ist das Ziel der vorliegenden Arbeit, den Einfluß dieser Heterogenitätseffekte, speziell die des Anisotropieeffekts, auf die nuklearen Eigenschaften heliumgekühlter schneller Brutreaktoren mit gitterartigem Aufbau zu untersuchen. Während im Bereich der thermischen Reaktoren diese Effekte schon relativ lange bekannt sind und auch Theorien existieren, die es gestatten sie zu berechnen, sind auf dem Gebiet der schnellen Reaktoren derartige Untersuchungen erst seit kurzem im Gange [18], [19]. Dies hat seine Ursache einmal in der Tatsache, daß die Hauptanstrengungen auf dem Gebiet der schnellen Reaktoren dem natrium-

gekühlten Reaktor gelten, für den die oben unter Punkt 2 beschriebenen Heterogenitäts- und Anisotropieeffekte im Normalbetrieb sicherlich nur von sehr untergeordneter Bedeutung sind. Zum anderen ist das Interesse für gasgekühlte schnelle Reaktoren, die einen deutlichen Anisotropieeffekt erwarten lassen, erst in den letzten Jahren stärker geworden, nachdem die technische Entwicklung - z.B. bei der Herstellung von Reaktordruckgefäßen aus Spannbeton - die Realisierbarkeit derartiger Reaktoren als möglich erscheinen läßt.

Für den Fall homogener Reaktorzonen ist die Diffusionsnäherung der Boltzmann-Gleichung [7] zur Berechnung der nuklearen Daten großer schneller Leistungsreaktoren gut geeignet. Genauere "SN-Methoden" [7] liefern Unterschiede von ca. 2 % beim effektiven Multiplikationsfaktor [8]. Da der Einfluß der unter Punkt 2 beschriebenen Heterogenitäts- und Anisotropieeffekte auf den effektiven Multiplikationsfaktor bei gasgekühlten schnellen Reaktoren wesentlich größer ist, bietet es sich an, diese Effekte im Rahmen einer modifizierten Diffusionsnäherung zu beschreiben. Nun wird bei homogenen Medien in der Diffusionsnäherung die Leckage von Neutronen mit Hilfe der Diffusionskonstanten beschrieben. Die Berücksichtigung der heterogenen, gerichteten Struktur der Reaktorzonen, die die Leckage beeinflußt, soll daher durch die Einführung einer modifizierten, richtungsabhängigen Diffusionskonstanten geschehen. Auf diese Weise wird meist auch im Falle der thermischen Reaktoren verfahren.

Um nun die in Rede stehenden Heterogenitätseffekte bei gasgekühlten schnellen Reaktoren zu untersuchen, geht man sinnvollerweise von den für thermische Reaktoren entwickelten theoretischen Methoden aus und überprüft ihre Anwendbarkeit auf gasgekühlte schnelle Reaktoren.

Da bei schnellen Reaktoren der Moderator fehlt, sind die Energien der Neutronen im schnellen Reaktor im Mittel beträchtlich größer als im thermischen. Außerdem sind die Durchmesser der Brennstäbe und ihre Abstände voneinander im schnellen Reaktor kleiner, so daß die geometrische Ausdehnung der Zellen, die das Gitter bilden, kleiner ist. Während daher beim thermischen Reaktor die mittleren freien Weglängen des größten Teils der Neutronen kleiner sind oder vergleichbar mit der Ausdehnung einer Zelle, gilt für einen schnellen Reaktor, daß ein Neutron im allgemeinen mehrere Zellen durchfliegt, ehe es eine Reaktion mit einem Atomkern der Reaktormaterialien eingeht.

Erste Arbeiten, die Heterogenitätseffekte der unter Punkt 2 beschriebenen Art im Rahmen der Diffusionstheorie behandeln, stammen von Behrens [9] und später dann von Shevelev [10] und Davison [11]. Alle diese Theorien zeigten bei thermischen Reaktoren nur in einem relativ engen Bereich gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen. Behrens z.B., der die Diffusionskonstante für ein Medium, das Hohlräume enthält, zu berechnen sucht - aus den weiter oben angeführten Gründen können Kühlkanäle bei gasgekühlten Reaktoren praktisch als Hohlräume angesehen werden - setzt unter anderem voraus, daß die einzelnen Neutronenflugstrecken im Hohlraum

nicht korreliert sind. Dies ist jedoch selbst bei isotropen Querschnitten nicht immer der Fall. Betrachtet man z.B. einen zylindrischen Hohlraum mit einem Brennstab im Zentrum, und durchfliegt ein von außen kommendes Neutron den Hohlraum und den zentralen Brennstab, ohne eine Reaktion zu erleiden, dann sind die beiden Flugstrecken vor und hinter dem Brennstab korreliert. Das heißt, diese Annahme ist nur dann gerechtfertigt, wenn ein Neutron im Brennstab mit hoher Wahrscheinlichkeit eine Reaktion erleidet. Dies ist für viele thermische Reaktoren durchaus zutreffend, aber sicher nicht für schnelle Reaktoren. Auch die beiden andern Autoren [10], [11] machen Einschränkungen, die die Anwendbarkeit ihrer Theorie begrenzt.

Von Benoist [12] wurde im Jahre 1959 eine Arbeit veröffentlicht, die den Streamingeffekt im Rahmen der Diffusionsnäherung beschreibt, wobei die notwendigen Korrekturen sich aus einer transporttheoretischen Untersuchung ergeben. Seine Methode besteht im wesentlichen darin, mit Hilfe einer Neumann-Liouvilleschen Reihenentwicklung die integrale Form der Boltzmann-Gleichung [7] zu lösen, wobei sich Ausdrücke für die Leckage in jeder der drei Raumrichtungen ergeben. Macht man nun für die Leckage in einer bestimmten Raumrichtung einen der Diffusionsnäherung in homogenen Medien entsprechenden Ansatz, so führt dies letztlich zur Definition richtungsabhängiger Diffusionskonstanten. Der Ausdruck für die richtungsabhängige Diffusionskonstante stellt sich bei Benoist als eine unendliche Reihe von "gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten" dar. Nun lassen sich die gerichteten Stoß-

wahrscheinlichkeiten 0-ter Ordnung noch relativ leicht bestimmen, aber schon bei den gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten erster Ordnung - sie beschreiben die Korrelation aufeinander folgender Neutronenflugstrecken - ist der Rechenaufwand beträchtlich. Die Terme mit noch höherer Ordnung sind nur noch mit unverhältnismäßig großem Aufwand zu bestimmen. Da die Reihe für die Diffusionskonstante in vielen Fällen nur sehr langsam konvergiert, kann der Rechenaufwand bei dieser Methode sehr groß sein. In späteren Arbeiten [13], [14] ist diese Theorie von Benoist noch verbessert worden, jedoch blieben die Schwierigkeiten bei der numerischen Berechnung der gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten bestehen. Darüber hinaus kann in dieser Theorie die Anisotropie der elastischen Streuquerschnitte nicht explizit berücksichtigt werden.

Um diese Schwierigkeiten zu umgehen, wurde von P.R. Barret [15] im Jahre 1969 der Versuch gemacht, den Diffusionskoeffizienten in einem thermischen Reaktor mit gitterartiger Struktur als eine Funktion von "gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten", "gerichteten mittleren freien Weglängen" und "gerichteten mittleren Quadraten der freien Weglängen" zu beschreiben, die in einfacherer Weise zu berechnen sind als die Ausdrücke bei Benoist. Dies geschieht in der Weise, daß die im Ort langsam veränderlichen Größen, die von der Feinstruktur des Mediums nicht beeinflußt sind, im Rahmen der Diffusionsnäherung behandelt werden, während die mit der Gitterstruktur zusammenhängenden Größen im Rahmen der Transporttheorie beschrieben werden.

Ein weiterer, großer Vorteil dieser Arbeit ist auch, daß die Anisotropie der elastischen Streuquerschnitte direkt berücksichtigt werden kann.

Diese Vorteile der Barrettschen Arbeit führten dazu, daß ihre Grundideen zum Ausgangspunkt der vorliegenden Untersuchung gemacht wurden. So wurde an der Konzeption festgehalten, daß man die Leckage aus einem Volumenelement in einem heterogenen Medium aus der integralen Form der Boltzmanngleichung ableiten und durch gerichtete mittlere freie Weglängen und gerichtete mittlere Quadrate der freien Weglängen beschreiben kann. Im wesentlichen beibehalten wurde auch die Annahme, daß im Ort langsam veränderliche Größen mit Hilfe der Diffusionstheorie für homogene Medien bestimmt werden können.

Um den Verhältnissen bei schnellen Reaktoren Rechnung tragen zu können, mußte dagegen die Annahme fallen gelassen werden, daß innerhalb einzelner Zonen der Zelle die Diffusionsnäherung gültig ist und insbesondere der Zellfluß und Zellstrom über das Ficksche Gesetz zusammenhängen. Weiter konnte nicht die Greuling-Goertzel-Approximation [16] zur Beschreibung der Neutronenbremsung verwendet werden. Vielmehr wurde die Neutronenbremsung exakt in einem Multigruppenformalismus durchgeführt, wobei die ersten Momente der elastischen Streuung voll berücksichtigt wurden. Zusätzlich mußten auch noch die inelastischen Stoßreaktionen in die Überlegungen mit einbezogen werden. Dies führte zu einem Ausdruck für die

richtungsabhängige Diffusionskonstante in einem Gitter, der von dem Barrettschen Ausdruck völlig verschieden ist. Für den Grenzfall des homogenen Mediums geht der abgeleitete Ausdruck über in den Ausdruck, der sich im Multigruppenbild für die Diffusionskonstante in der P1-Approximation ergibt. Um schließlich die richtungsabhängige Diffusionskonstante bei schnellen Reaktoren bestimmen zu können, mußten noch Verfahren zur numerischen Berechnung der gerichteten mittleren freien Weglängen und der gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen bei schnellen Reaktoren entwickelt werden.

Damit ist die Möglichkeit gegeben, die Auswirkung der unter Punkt 2 angesprochenen Heterogenitätseffekte bei schnellen Brutreaktoren zu untersuchen. Im einzelnen kann daran gedacht werden, bei gasgekühlten schnellen Reaktoren den Einfluß der heterogenen Gitterstruktur auf

1. den effektiven Multiplikationsfaktor,
2. den Kühlmittelverlustkoeffizienten [5],
3. das Kritikalitätsverhalten bei einem Wassereinbruch in den Primärkreislauf eines Reaktors mit sekundärem Dampfkreislauf [32],

4. die Strahlenbelastung der Trageplatte zu bestimmen. Darüber hinaus wäre es auch interessant, bei natriumgekühlten schnellen Brutreaktoren den Natrium-Void-Koeffizienten [6] unter Berücksichtigung des Heterogenitätseinflusses zu berechnen. In der vorliegenden Arbeit sollen jedoch nur die Punkte 1-3 behandelt werden.

Das II. Kapitel dieser Arbeit befaßt sich mit der Herleitung des Ausdrucks für eine richtungsabhängige Diffusionskonstante in einem schnellen Brutreaktor mit gitterartigem Aufbau. Im III. Kapitel werden für die gerichteten mittleren freien Weglängen und die gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen Ausdrücke abgeleitet, die sich numerisch auswerten lassen. Im IV. Kapitel schließlich werden mit den nach den Gleichungen des Kapitels II gewonnenen gerichteten Diffusionskoeffizienten eindimensionale Rechnungen durchgeführt, um den Einfluß der beschriebenen Heterogenitätseffekte auf die oben unter Punkt 1 - 3 angegebenen Größen zu bestimmen.

II. Herleitung des Ausdrucks für eine richtungsabhängige Diffusionskonstante

II.1 Vorbetrachtung

In diesem Kapitel soll in Anlehnung an eine Arbeit von P.R. Barret [15] die Leakage von Neutronen aus der Zelle eines regelmäßigen Gitters berechnet werden. Dies geschieht über eine Bilanzgleichung für die Zelle, die aus der integralen Form der Boltzmann-Gleichung abgeleitet werden kann. Für die Leakage wird ein der Diffusionsnäherung entsprechender Ansatz gemacht, der zur Definition einer richtungsabhängigen Diffusionskonstanten für das in Rede stehende Gitter führt.

II.2 Ausgangsgleichungen

Im stationären, kritischen Reaktor ist die totale Stoßrate im Volumenelement $\delta\vec{r}$ und im Lethargieintervall δu gegeben durch die integrale Form der Transportgleichung

$$\Sigma_t(\vec{r}, u) \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) \delta u \delta \vec{r} \delta \vec{\Omega}$$

$$= \int_0^\infty dR \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_0^u du' \Sigma_a(\vec{r}, u', \vec{\Omega}' \rightarrow u, \vec{\Omega}) \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}', u') e^{-\tilde{\Sigma}_t R} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta u \delta \vec{r} \delta \vec{\Omega}$$

$$+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dR \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_0^u du' \Sigma_{in}(\vec{r}, u' \rightarrow u) \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}', u') e^{-\tilde{\Sigma}_t R} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta u \delta \vec{r} \delta \vec{\Omega}$$

$$+ \frac{1}{4\pi} \chi(u) \int_0^{\infty} dR \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_0^{\infty} du' (v\Sigma_f)(\vec{r}', u') \mathcal{P}(\vec{r}', \vec{\Omega}' u').$$

$$e^{-\widetilde{\Sigma}_t R} \cdot \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta\vec{\Omega} \delta u \quad (2.2.1)$$

Dabei bedeutet:

$$R = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

den Abstand des Punktes \vec{r}' von einem Aufpunkt \vec{r}

$$\vec{\Omega}$$

den Einheitsvektor

$$\Sigma_{el}(\vec{r}, u', \vec{\Omega}' \rightarrow u, \vec{\Omega})$$

den makroskopischen Querschnitt für elastische Streuung von $u', \vec{\Omega}'$ nach $u, \vec{\Omega}$

$$\Sigma_{in}(\vec{r}, u' \rightarrow u)$$

den Querschnitt für inelastische Streuung von $u' \rightarrow u$ (wobei eine isotrope Winkelverteilung vorausgesetzt wurde)

$$\Sigma_f(\vec{r}, u)$$

den Spaltquerschnitt

$$v$$

die Zahl der pro Spaltung im Mittel freiwerdenden Neutronen (als unabhängig vom Ort angenommen)

$$\chi(u)$$

das Spaltspektrum ($\int_0^{\infty} \chi(u) du = 1$), es wird als ortsunabhängig angenommen

$$\Sigma_t(\vec{r}, u)$$

den totalen Querschnitt.

$$\widetilde{\Sigma}_t R = \int_0^R \Sigma_t(u, s) ds$$

stellt die optische Weglänge zwischen den Punkten \vec{r} und \vec{r}' dar.

$$\mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u)$$

ist die winkelabhängige Flußdichte

Entwickelt man die Flußdichte sowie den makroskopischen Querschnitt für elastische Streuung nach Kugelflächenfunktionen (siehe Anhang), wobei zu beachten ist, daß beim Querschnitt für elastische Streuung nur das skalare Produkt $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ auftritt, so ergibt sich:

$$\mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) = \sum_{l,m} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{P}_l^m(\vec{r}, u) Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (2.2.2)$$

$$\Sigma_{el}(\vec{r}, u, \vec{\Omega}' \rightarrow u, \vec{\Omega}) = \sum_{l,m} \Sigma_{el}(\vec{r}, u \rightarrow u) Y_l^m(\vec{\Omega}) Y_l^{m*}(\vec{\Omega}')$$

Setzt man Gleichung (2.2.2) in Gleichung (2.2.1) ein, so wird unter Berücksichtigung der Orthogonalitätsrelation für die Kugelflächenfunktionen:

$$\begin{aligned} & \Sigma_t(\vec{r}, u) \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) \delta\vec{r} \delta\vec{\Omega} \delta u \\ &= \int_0^\infty dR \int_0^u du' \sum_{l,m} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{P}_l^m(\vec{r}, u) \Sigma_{el}(\vec{r}, u' \rightarrow u) Y_l^m(\vec{\Omega}) e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta\vec{\Omega} \delta u \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dR \int_0^u du' \mathcal{P}_0^0(\vec{r}, u') \Sigma_{im}(\vec{r}, u' \rightarrow u) e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta\vec{\Omega} \delta u \\ &+ \frac{1}{4\pi} \chi(u) \int_0^\infty dR \int_0^u du' \mathcal{P}_0^0(\vec{r}, u') (\nu \Sigma_f)(\vec{r}, u') e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta\vec{\Omega} \delta u \quad (2.2.3) \end{aligned}$$

Integriert man weiter Gleichung (2.2.3) über $d\vec{\Omega}$, wobei $R^2 dR d\vec{\Omega} = d\vec{r}'$ ist und vernachlässigt beim

Streuterm auf der rechten Seite von Gleichung (2.2.3) alle Glieder mit $l > 1$, berücksichtigt also nur das 0. und 1. Moment der elastischen Streuung, so geht Gleichung (2.2.3) über in:

$$\begin{aligned}
 & \Sigma_t(\vec{r}, u) \phi(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta u \\
 &= \int_0^u du' \int_V d\vec{r}' \Sigma_{el}(\vec{r}', u' \rightarrow u) \phi(\vec{r}', u') \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta u \\
 &+ \int_0^u du' \int_V d\vec{r}' \Sigma_{el}(\vec{r}', u' \rightarrow u) 3 [\vec{\Omega} \cdot \vec{J}(\vec{r}', u')] \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta u \\
 &+ \int_0^u du' \int_V d\vec{r}' \Sigma_{in}(\vec{r}', u' \rightarrow u) \phi(\vec{r}', u') \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta u \\
 &+ \chi(u) \int_0^\infty du' \int_V d\vec{r}' (\nu \Sigma_f)(\vec{r}', u') \phi(\vec{r}', u') \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r}, u) \delta\vec{r} \delta u \quad (2.2.4)
 \end{aligned}$$

wobei

$$\phi(\vec{r}, u) = \mathcal{P}_0^\circ(\vec{r}, u) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u)$$

die skalare Flußdichte⁺ und

$$\vec{J}(\vec{r}, u) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \cdot \mathcal{P}(\vec{r}, \vec{\Omega}, u)$$

⁺ Im folgenden werden oft statt der exakten Bezeichnungen Fluß- und Stromdichte nur die Bezeichnungen Fluß und Strom verwendet.

die Stromdichte bezeichnet.

Außerdem wurden in Gleichung (2.2.4) noch die im Anhang angegebenen Beziehungen für die Komponenten des Stromes und des Einheitsvektors benützt.

II.3 Multigruppennäherung

Teilt man den gesamten Lethargiebereich von 0 bis ∞ in N Intervalle ein und definiert durch die Gleichungen

$$\phi^g(\vec{r}) = \int_{\Delta U_g} \phi(\vec{r}, u) du \quad (2.3.1)$$

$$\vec{J}^g(\vec{r}) = \int_{\Delta U_g} \vec{J}(\vec{r}, u) du$$

den Gruppenfluß $\phi^g(\vec{r})$ und den Gruppenstrom $\vec{J}^g(\vec{r})$ im Lethargieintervall ΔU_g , so geht Gleichung (2.2.4) über in

$$\begin{aligned} & \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) \delta\vec{r} \\ &= \int_V d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{h \rightarrow g}(\vec{r}') \phi^h(\vec{r}') \frac{e^{-\Sigma_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r}) \delta\vec{r} \\ &+ \int_V d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \cdot 3 [\vec{\Omega} \cdot \vec{J}^h(\vec{r}')] \frac{e^{-\Sigma_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r}) \delta\vec{r} \\ &+ \chi^g \int_V d\vec{r}' \sum_{l=1}^N (\nu \Sigma_f)^l(\vec{r}') \phi^l(\vec{r}') \frac{e^{-\Sigma_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r}) \delta\vec{r} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Dabei sind die auftretenden Gruppenkonstanten in der üblichen Weise [17] definiert, z.B.

$$(\nu \Sigma_f)^g(\vec{r}) = \frac{1}{\phi^g(\vec{r})} \int_{\Delta u_g} du (\nu \Sigma_f)(\vec{r}, u) \phi(\vec{r}, u)$$

$${}^o \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}) = \frac{1}{\phi^h(\vec{r})} \int_{\Delta u_g} du \int_{\Delta u_h} du' {}^o \Sigma_{el}(\vec{r}, u' \rightarrow u) \phi(\vec{r}, u')$$

als flußgewichtete Mittelwerte. In analoger Weise ergibt sich $\Sigma_{in}^{h \rightarrow g}(\vec{r})$, ${}^o \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r})$ und $\Sigma_{in}^{h \rightarrow g}(\vec{r})$

wurden zusammengefaßt zu

$${}^o \Sigma^{h \rightarrow g}(\vec{r}) = {}^o \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}) + \Sigma_{in}^{h \rightarrow g}(\vec{r})$$

Das erste Moment des elastischen Streuquerschnitts ist dagegen mit dem Strom gewichtet und χ^g ist definiert durch:

$$\chi^g = \int_{\Delta u_g} \chi(u) du$$

wobei

$$\sum_{g=1}^N \chi^g = 1$$

ist.

Beim Übergang von Gleichung (2.2.4) auf Gleichung (2.3.2) wurde die Annahme gemacht, daß innerhalb eines Lethargieintervalls Δu_g der totale makroskopische Querschnitt $\Sigma_t(\vec{r}, u)$ im Exponenten der einzelnen Terme in Gleichung (2.2.4) nur schwach von der Lethargie abhängt, so daß er durch den Mittelwert $\Sigma_t^0(\vec{r}, u)$ ersetzt werden kann. Die Gültigkeit dieser Annahme kann durch die Wahl genügend schmaler Lethargiegruppen immer gewährleistet werden, jedoch ist sie bei den Gruppennzahlen, die hier in Betracht gezogen werden (26), im Resonanzbereich der schweren Kerne problematisch. Um die Gleichung (2.3.2) zu erhalten, könnte man auch von der differentiellen Form der Boltzmann-Gleichung ausgehen, zum Multigruppenbild übergehen und anschließend die differentielle Multigruppen-Transportgleichung integrieren. Dadurch würde man die obige Annahme umgehen, könnte aber auch zu anderen Wichtungsvorschriften gelangen. Eine eindeutige Wichtungsvorschrift für die Multigruppenquerschnitte, die zur Berechnung der hier interessierenden Leckageeffekte benötigt wird, ergibt sich später in Abschnitt II.11. Doch es soll schon an dieser Stelle bemerkt werden, daß die Art der Wichtung für die im IV. Kapitel untersuchten Beispiele nur eine geringe Bedeutung besitzt, da die in Rede stehenden Leckageeffekte hauptsächlich oberhalb des Resonanzgebiets der schweren Kerne eine Rolle spielen.

II.4 Produktansatz für Fluß- und Stromdichte

Das Gebiet, über dem die räumliche Integration in Gleichung (2.3.2) durchzuführen ist (z.B. das Reaktorkern), sei entsprechend den Voraussetzungen für die

Gültigkeit der Diffusionsnäherung groß gegen die mittlere freie Weglänge der Neutronen, so daß im Inneren des Gebiets, d.h. in einer Entfernung von wenigen freien Weglängen von der Grenzfläche, keine Neutronen zur Stoßrate an einem beliebigen Aufpunkt \vec{r} (Gl. 2.3.2) mehr beitragen, die aus dem Grenzbe- reich kommen. Außerdem wird vorausgesetzt, daß das Gebiet aus einer regelmäßigen Anordnung von Brenn- stäben (Gitter) besteht. Da im allgemeinen die Brennstäbe in schnellen Reaktoren hexagonal ange- ordnet sind, wird im folgenden von dieser geometrischen Konfiguration ausgegangen. Diese Einschränkung ist jedoch völlig unwesentlich. Das Brennstabgitter läßt sich aus einzelnen Elementarzellen aufbauen (siehe Fig.II.4.1)

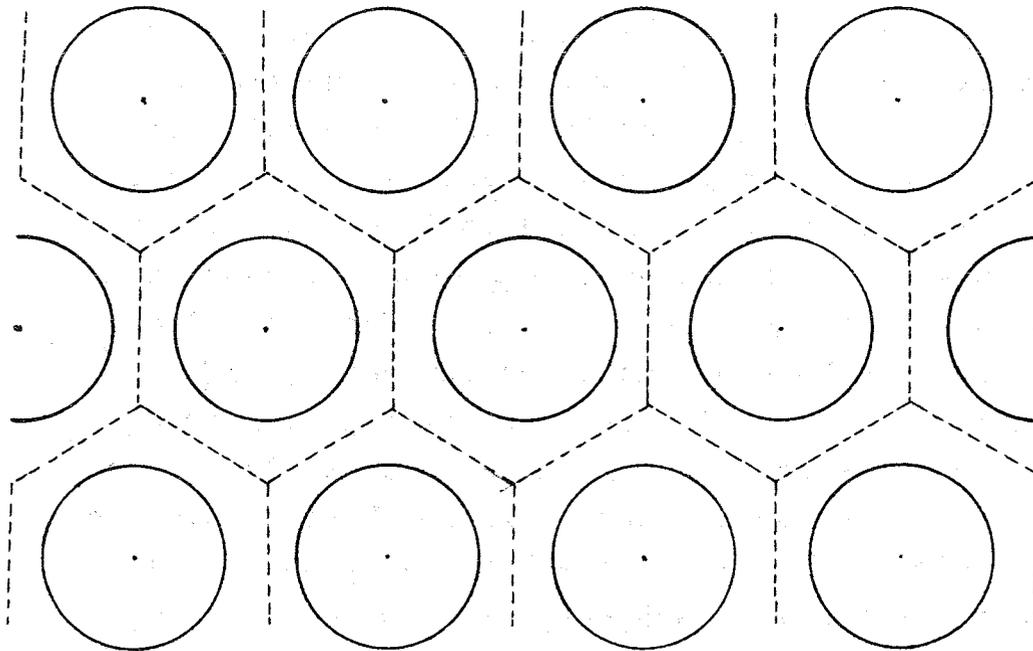


Fig.II.4.1: Hexagonales Brennstabgitter und Elementarzelle

die durch den Brennstab und das zugehörige Kühlmittelvolumen gegeben sind. Strukturmaterialien des Reaktors, deren Volumenanteil ca. 7 - 8 % beträgt, können durch eine entsprechende Erhöhung des Hüllmaterialvolumenanteils annähernd berücksichtigt werden. In der horizontalen (x-y) Ebene stellt sich also das Integrationsgebiet dar als eine periodische Folge von Zellen mit hexagonaler äußerer Berandung. Die inneren Zellzonen (Hüllmaterialzone, Brennstoffzone) sollen jedoch einen zylindrischen Querschnitt besitzen. Weiter sollen innerhalb einer Zone der Zelle die Querschnitte unabhängig vom Ort sein, insbesondere also auch in axialer (z-) Richtung.

In einer so definierten Zelle soll der Gesamtfluß innerhalb der Zelle darstellbar sein als das Produkt zweier Funktionen. Die eine Funktion sei im Ort schwach veränderlich, d.h. innerhalb der durch die Zelle gegebenen geometrischen Dimensionen praktisch konstant. Sie wird im folgenden als die makroskopische Komponente $\phi_m(\vec{r})$ des Flusses bezeichnet. Dagegen kann die zweite Funktion, die mikroskopische Komponente des Flusses $\phi_c(\vec{r})$, innerhalb einer Zelle stark variieren. Weiter soll in einem aus Zellen aufgebauten Gebiet (Zellgitter) die mikroskopische Funktion in der Horizontalebene periodisch sein, wobei die Periode durch die Dimension der Zelle festgelegt ist. Da außerdem die Zellen bis auf die äußerste Zone rotationssymmetrisch sind, ist ϕ_c ebenfalls "im wesentlichen" rotationssymmetrisch. Von der makroskopischen Komponente des Flusses wird angenommen, daß sie dem Fluß entspricht,

der sich in dem dem Zellgitter äquivalenten homogenen Medium (homogenisiertes Zellgitter) ausbildet und daß sie im Rahmen der Diffusionsnäherung beschrieben werden kann.

Die mikroskopische Komponente $\phi_c(\vec{r})$ des Flusses ist dimensionslos und soll mit dem Fluß $\phi_c^*(\vec{r})$, der sich in einem unendlich ausgedehnten Gitter ausbildet über die Beziehung

$$\phi_c(\vec{r}) = \alpha \phi_c^*(\vec{r})$$

zusammenhängen, wobei der Faktor α die reziproke Dimension des Flusses besitzt. Weiter soll der Mittelwert der mikroskopischen Komponente in der Zelle gleich 1 sein, also:

$$1 = \frac{1}{V_z} \int_{V_z} \phi_c^g(\vec{r}') d\vec{r}'$$

für alle g
 V_z Zellvolumen

Man erhält damit für den Fluß in der g-ten Lethargiegruppe:

$$\phi_c^g(\vec{r}) = \phi_c^g(\vec{r}) \phi_m^g(\vec{r}) \quad (2.4.1)$$

Außerdem soll, da keine axiale Veränderung im Gitter angenommen wird (konstante Querschnitte in z-Richtung), die mikroskopische Komponente ϕ_c in dieser Richtung konstant (= 1) sein, also:

$$\frac{\partial}{\partial z} \phi_c^g(\vec{r}) = 0 \quad (2.4.2)$$

für alle g

Für die einzelnen Komponenten des Stromes wird der analoge Ansatz gemacht:

$$J_{\chi}^g(\vec{r}) = J_{\chi c}^g(\vec{r}) \cdot J_{\chi m}^g(\vec{r}) \quad (2.4.3)$$

$\chi = x, y, z$

wobei für die beiden Faktoren $J_{\chi c}^g$ und $J_{\chi m}^g$ die beim Fluß angestellten Überlegungen in entsprechender Weise zu übertragen sind.

Insbesondere gilt auch:

$$J_{z c}^g(\vec{r}) = 1 \quad (2.4.4)$$

II.5 Entwicklung der makroskopischen Komponenten von Fluß- und Stromdichte

Es soll nun die makroskopische Komponente des Flusses in eine Taylorreihe um den Punkt \vec{r} entwickelt werden. Da - wie schon erwähnt - die Voraussetzung für die Gültigkeit der Diffusionsnäherung im homogenisierten Gitter gegeben sein soll, kann die Taylorreihe nach 3 Gliedern abgebrochen werden.

$$\phi_m^g(\vec{r}) = \phi_m^g(\vec{r}) - R(\vec{\Omega} \cdot \nabla) \phi_m^g(\vec{r}) + \frac{1}{2} R^2 (\vec{\Omega} \cdot \nabla)^2 \phi_m^g(\vec{r}) \quad (2.5.1)$$

Diese Aussage ist äquivalent zu derjenigen bei der differentiellen Form der Transportgleichung, daß der winkelabhängige Fluß, falls die Diffusionsnäherung gültig ist, durch das 0. und 1. Glied einer Reihenentwicklung nach Legendre-Polynomen darstellbar sein muß.

Für die makroskopischen Komponenten der Stromdichte wird der entsprechende Ansatz gemacht:

$$J_{xm}^g(\vec{r}') = J_{xm}^g(\vec{r}) - R(\vec{n} \cdot \nabla) J_{xm}^g(\vec{r}) \quad (2.5.2)$$

Da in der Diffusionsnäherung Fluß- und Stromdichte über das Ficksche Gesetz zusammenhängen, wird bei der Stromdichte die Entwicklung sinnvollerweise schon nach dem 2. Term abgebrochen.

Bei der weiteren Behandlung von Gleichung (2.3.2) ist also zu berücksichtigen, daß der Integrationsbereich in der horizontalen x-y-Ebene eine periodische Zellstruktur besitzt. Weiter sollen die Querschnitte innerhalb einer Zone der Zelle konstant sein, insbesondere also auch unabhängig von der Koordinate z. Der Aufpunkt \vec{r} liege im Inneren des Integrationsbereiches und so weit von allen Grenzflächen entfernt - damit sind äußere Grenzflächen und nicht etwa Grenzflächen zwischen den einzelnen Zellen oder Zellzonen gemeint - daß von dort keine Neutronen direkt, d.h. ohne vorherigen Stoß nach \vec{r} gelangen können. Die Gültigkeit der Diffusionsnäherung im homogenisierten Gitter bedeutet dann, daß innerhalb des Gebiets um den Aufpunkt, aus dem Neutronen noch zur Stoßrate beitragen können und über das die Integration in Gleichung (2.3.2) zu erstrecken ist, sich die makroskopischen Komponenten der Fluß- und Stromdichte durch eine Taylorentwicklung im Ort mit 3 bzw. 2 Gliedern darstellen lassen. Außerdem kann die Integration dann formal über den unendlichen Raum ausgedehnt werden.

Setzt man die Gleichungen (2.4.1), (2.4.3), (2.5.1) und (2.5.2) in (2.3.2) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \sum_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) \delta \vec{r} &= \int d\vec{r}' \sum_{h \leq g}^0 \sum^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \phi_c^h(\vec{r}') \left[\phi_m^h(\vec{r}') \right. \\
 &- R(\vec{\Omega} \cdot \nabla) \phi_m^h(\vec{r}') + \frac{1}{2} R^2 (\vec{\Omega} \cdot \nabla)^2 \phi_m^h(\vec{r}') \left. \right] \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \sum_t^g \delta \vec{r} \\
 &+ \int d\vec{r}' \sum_{h \leq g}^1 \sum_{\ell}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \left\{ \left[\sum_x \Omega_x J_{x_c}^h(\vec{r}') \right] \left(J_{x_m}^h(\vec{r}') \right. \right. \\
 &- R(\vec{\Omega} \cdot \nabla) J_{x_m}^h(\vec{r}') \left. \left. \right] \right\} \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \sum_t^g(\vec{r}) \delta \vec{r} + \chi^g \int_{\infty} d\vec{r}' \\
 &\sum_{\ell=1}^N (\nu \widetilde{\Sigma}_f)^\ell(\vec{r}') \phi_c^\ell(\vec{r}') \left[\phi_\ell^m(\vec{r}') - R(\vec{\Omega} \cdot \nabla) \phi_\ell^m(\vec{r}') + \right. \\
 &\left. \frac{1}{2} R^2 (\vec{\Omega} \cdot \nabla)^2 \phi_\ell^m(\vec{r}') \right] \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \sum_t^g(\vec{r}) \delta \vec{r} \quad (2.5.3)
 \end{aligned}$$

Zunächst sollen folgende Ausdrücke betrachtet werden:

$$I_1 = \int_{\infty} d\vec{r}' \sum(\vec{r}') \phi_c(\vec{r}') R \Omega_x \frac{\partial}{\partial \chi} \phi_m(\vec{r}') \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \sum_t(\vec{r}')$$

$$I_2 = \int_{\infty} d\vec{r}' \sum (\vec{r}') \phi_c(\vec{r}') R^2 (\vec{\Omega} \cdot \nabla)^2 \phi_m \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r})$$

wobei Σ für $(\nu \Sigma_f)$ bzw. $\Sigma^{h \rightarrow g}$ steht.

Von der Integrationsvariablen hängen nur der jeweilige makroskopische Querschnitt, der Mikrofluß, R und $e^{-\vec{\Sigma}_t R}$ ab. Da der Mikrofluß und die Querschnitte nicht von der z-Koordinate abhängen, verschwinden alle Ausdrücke in I_1 und I_2 , in denen Ω_z erscheint (Beiträge von oberhalb und unterhalb der horizontalen Ebene durch den Aufpunkt \vec{r} sind gleich groß aber mit verschiedenem Vorzeichen behaftet).

Dieselbe Überlegung gilt auch für die Integrale:

$$I_3 = \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \Omega_z J_{zc}^h(\vec{r}') J_{zm}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r})$$

und

$$I_4 = \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') R \Omega_z J_{zc}^h(\vec{r}') \Omega_x \frac{\partial}{\partial x} J_{zm}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r})$$

bzw.

$$I_4' = \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') R \Omega_x J_{xc}^h(\vec{r}') \Omega_z \frac{\partial}{\partial z} J_{zm}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t R}}{4\pi R} \Sigma_t^g(\vec{r})$$

mit $x \neq z$

Integriert man I_1 und I_2 noch über den Zellquerschnitt F_z (Zellvolumen $V_z = F_z \cdot 1$), so existiert zu jedem

Aufpunkt in der Zelle ein dazu symmetrisch gelegener Aufpunkt der Art, daß die Integrale

$$\tilde{I}_1 = \int_{F_2} d\vec{r} \int_{\infty}^{\infty} d\vec{r}' \Sigma(\vec{r}') \phi_c(\vec{r}') R \Omega_x \frac{\partial}{\partial \chi} \phi_m(\vec{r}) \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r})$$

und

$$\tilde{I}_2 = \int_{F_2} d\vec{r} \int_{\infty}^{\infty} d\vec{r}' \Sigma(\vec{r}') \phi_c(\vec{r}') R^2 \Omega_x \Omega_x \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \chi} \phi_m(\vec{r}) \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t(\vec{r})$$

$x \neq \chi$

verschwinden, da die Beiträge zu den beiden Aufpunkten jeweils gleich groß, aber mit verschiedenem Vorzeichen versehen sind. Denn der Mikrofluß und die Querschnitte sind nach Voraussetzung unabhängig von der Koordinaten z' , periodisch mit der Zelle und symmetrisch zum Zellmittelpunkt. Außerdem soll ϕ_m und damit auch $\frac{\partial}{\partial \chi} \phi_m$ innerhalb einer Zelle praktisch konstant sein. Weiter wird das Integral

$$\tilde{I}_3 = \int_{F_2} d\vec{r} \int_{\infty}^{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \leq g} \Sigma_{xg}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \Omega_x \mathcal{J}_{x_c}^h(\vec{r}') \mathcal{J}_{x_m}^h(\vec{r}) \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r})$$

betrachtet. $\mathcal{J}_{x_c}^h(\vec{r}')$ ist antisymmetrisch zur Zellachse. Denkt man sich $\mathcal{J}_{x_c}^h(\vec{r}')$ in eine Fourierreihe entwickelt, so wird das Doppelintegral mit dem konstanten Anteil (0-tes Moment) aus Symmetriegründen 0. Die übrigen Momente ergeben, wenn die Integration über \vec{r}' in \tilde{I}_3 ausgeführt wird, eine periodische Funktion von \vec{r} mit dem Mittelwert 0.

Deshalb verschwindet auch das Integral dieser Funktion über den Zellquerschnitt.

Schließlich sollen noch die Integrale

$$\tilde{I}_4 = \int_{F_z} d\vec{r} \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') R \Omega_x J_{\chi_c}^h(\vec{r}') \Omega_x \frac{\partial}{\partial x} J_{\chi_m}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r})$$

betrachtet werden, wobei $\chi = x, y$
 $x = x, y$ und
 $x \neq \chi$

sein soll. Auch diese Integrale sind aus Symmetriegründen gleich 0. Da später (Gl. 2.5.5) die Integration über das Zellvolumen ausgeführt wird und die angeführten Terme dann wegfallen würden, sollen sie schon hier, um überflüssige Schreibarbeit zu vermeiden, weggelassen werden. Die Gleichung (2.5.3) vereinfacht sich daher zu:

$$\begin{aligned} \Sigma_t^g(\vec{r}) \phi^g(\vec{r}) \delta(\vec{r}) &= \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') \phi_c^h(\vec{r}') \left[\phi_m^h(\vec{r}') \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} R^2 \sum_x \Omega_x^2 \frac{\partial^2 \phi_m^h(\vec{r}')}{\partial x^2} \right] \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r}) \delta(\vec{r}) - \int_{\infty} d\vec{r}' \\ &\sum_{h \neq g} \Sigma_{el}^{h \rightarrow g}(\vec{r}') 3R \sum_x \Omega_x^2 J_{\chi_c}^h(\vec{r}') \frac{\partial J_{\chi_m}^h(\vec{r}')}{\partial x} \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \\ &\Sigma_t^g(\vec{r}) \delta\vec{r} + \chi^g \int_{\infty} d\vec{r}' \sum_{\ell=1}^N (\nu \Sigma_f)^\ell(\vec{r}') \phi_c^\ell(\vec{r}') \left[\phi_m^\ell(\vec{r}') \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2} R^2 \sum_x \Omega_x^2 \frac{\partial^2 \phi_m^\ell(\vec{r}')}{\partial x^2} \right] \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t^g R}}{4\pi R^2} \Sigma_t^g(\vec{r}) \delta\vec{r} \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

Die totale Stoßrate in einer Zelle, die in der Höhe $z = z_0$ (Horizontalebene) liegt und aus I-Zonen besteht, ergibt sich durch Integration von Gleichung (2.5.4) über das Zellvolumen V_z . Spaltet man gleichzeitig die Integration über den gesamten Raum in eine Summe von Teilintegrationen über die einzelnen Zellzonen auf, so wird:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^I V_i \sum_{ti}^g \phi_{ci}^g \phi_m^g(\vec{r}) &= \sum_i \sum_k \sum_{h \neq g} \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' \sum_k^{h \rightarrow g} \phi_{ck}^h(\vec{r}'). \\
 \left[\phi_m^h(\vec{r}) + \frac{1}{2} R^2 \sum_x \Omega_x^2 \frac{\partial^2 \phi_m^h(\vec{r})}{\partial \chi^2} \right] \frac{e^{-\sum_i^g R}}{4\pi R^2} \sum_{ti}^g &- \sum_i \sum_k \sum_{h \neq g} \\
 \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' \sum_{d,k}^{h \rightarrow g} 3R \sum_x \Omega_x^2 J_{xc}^h(\vec{r}') \frac{\partial J_{xm}^h(\vec{r})}{\partial \chi} \frac{e^{-\sum_i^g R}}{4\pi R^2} \sum_{ti}^g & \\
 + \chi^g \sum_i \sum_k \sum_{l=1}^N \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' (v \sum_f) (\vec{r}') \phi_{ck}^l(\vec{r}') \left[\phi_m^l(\vec{r}) \right. & \\
 \left. + \frac{1}{2} R^2 \sum_x \Omega_x^2 \frac{\partial^2 \phi_m^l(\vec{r})}{\partial \chi^2} \right] \frac{e^{-\sum_i^g R}}{4\pi R^2} \sum_{ti}^g (\vec{r}) & \quad (2.5.5)
 \end{aligned}$$

II.6 Die Größen $R_{i \rightarrow k, x}^2$ und $R_{i \rightarrow k, x}$

Es sollen nun in Anlehnung an die Ausdrücke für Stoßwahrscheinlichkeiten [1]

$$P_{i \rightarrow k}^g = \frac{\sum_{t \neq k}^g \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' \phi^g(\vec{r}') \frac{e^{-\sum_t^g R}}{4\pi R^2}}{\int_{V_i} d\vec{r}' \phi^g(\vec{r}')} \quad (2.6.1)$$

die Größen $R_{i \rightarrow k, x}^{h, g}$ und $R_{i \rightarrow k, x}^{2h, g}$ durch folgende Gleichungen definiert werden:

$$R_{k \rightarrow i, x}^{h, g} = \frac{\sum_{t \neq i}^g \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' 3 \Omega_x^2 R J_{x_c}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\sum_t^g R}}{4\pi R^2}}{\int_{V_k} d\vec{r}' J_{x_c}^h(\vec{r}')} \quad (2.6.2)$$

und

$$R_{k \rightarrow i, x}^{2h, g} = \frac{\sum_{t \neq i}^g \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' 3 \Omega_x^2 R^2 \phi_c^h(\vec{r}') \frac{e^{-\sum_t^g R}}{4\pi R^2}}{\int_{V_k} d\vec{r}' \phi_c^h(\vec{r}')} \quad (2.6.3)$$

Wählt man die einzelnen Gebiete V_k so klein, daß sich der Mikrofluß innerhalb dieser Gebiete nur wenig ändert (flat flux approximation), so kann $\phi_c^h(\vec{r}')$ durch den Zonenmittelwert

$$\phi_{ck}^h(\vec{r}') = \frac{1}{V_k} \int_{V_k} d\vec{r}' \phi_c^h(\vec{r}')$$

ersetzt werden. Dann vereinfacht sich die Gleichung (2.6.3) zu:

$$R_{K \rightarrow i, x}^{2g} = \frac{\sum_{ti}^g}{V_K} \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_K} d\vec{r}' 3 \Omega_x^2 R^2 \frac{e^{-\sum_{ti}^g R}}{4\pi R^2} \quad (2.6.4)$$

Da im Realfall die Gebiete V_K die einzelnen Zonen der Zellen darstellen, könnte diese Aussage unter Umständen bedeuten, daß man die in einer Zelle auf Grund ihres Aufbaus auf natürliche Art vorgegebene Zonenzahl durch Unterteilung der Zonen vergrößern muß, um die obige Annahme zu rechtfertigen. Wie jedoch später noch gezeigt wird (Abschnitt II.8), ist dies bei gasgekühlten schnellen Reaktoren nicht erforderlich.

Für $R_{K \rightarrow i, x}^{g,h}$ gilt dagegen nur

$$R_{K \rightarrow i, x}^{g,h} = \frac{\sum_{ti}^g}{V_K J_{xc}^h(\xi_K)} \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_K} d\vec{r}' 3 \Omega_x^2 R J_{xc}^h(\vec{r}') \frac{e^{-\sum_{ti}^g R}}{4\pi R^2} \quad (2.6.5)$$

wobei ξ_K nach dem Mittelwertsatz irgend ein Punkt aus V_K ist.

Damit geht Gleichung (2.5.5) über in

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_{ti}^g V_i \phi_{ci}^g \phi_m^g &= \sum_{h \leq g} \phi_m^h \sum_i \sum_K \sum_k^{h \rightarrow g} \phi_{ck}^h P_{K \rightarrow i}^g V_K \\ &+ \chi^g \sum_{e=1}^N \phi_e^m \sum_i \sum_K (\nu \sum_{s,K}^e) \phi_{ck}^e P_{K \rightarrow i}^g V_K \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{6} \sum_x \sum_{h \leq g} \frac{\partial^2 \phi_m^h}{\partial \chi^2} \sum_i \sum_k \sum_{\sigma} \sum_{\kappa}^{h \rightarrow g} \phi_{ck}^h R_{\kappa \rightarrow i, \chi}^{2g} V_k \\
 & - \sum_x \sum_{h \leq g} \frac{\partial J_{\chi m}^h}{\partial \chi} \sum_i \sum_k \sum_{\sigma} \sum_{\kappa}^{h \rightarrow g} J_{\chi c}^h \left(\frac{\vec{\xi}}{\xi} \right) R_{\kappa \rightarrow i, \chi}^{g, h} V_k \\
 & + \chi^g \frac{1}{6} \sum_x \sum_{\ell=1}^N \frac{\partial^2 \phi_m^\ell}{\partial \chi^2} \sum_i \sum_k (\nu \Sigma_s)_k^\ell \phi_{ck}^\ell R_{\kappa \rightarrow i, \chi}^{2g} V_k
 \end{aligned} \tag{2.6.6}$$

wobei das Argument \vec{r} bei ϕ_m und \vec{J}_m weggelassen wurde. Beachtet man den Aufbau des Integrationsgebiets aus Zellen (eine Zelle bestehe aus I Zonen) und berücksichtigt, daß einander entsprechende Zonen in verschiedenen Zellen dieselben Querschnitte und denselben Mikrofluß besitzen, so folgt weiter:

$$\sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^{\infty} \Sigma_{tk} \phi_{ck} V_k P_{k \rightarrow i} = \sum_i \sum_{k=1}^{\infty} \Sigma_{ti} \phi_{ci} V_i P_{i \rightarrow k} = \sum_i V_i \Sigma_{ti} \phi_{ci}$$

da $\sum_{k=1}^{\infty} P_{k \rightarrow i} = 1$ (s. Abschnitt III.1)

$$\sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^{\infty} \Sigma_{tk} \phi_{ck} V_k R_{k \rightarrow i, \chi}^2 = \sum_i \sum_k \Sigma_{ti} \phi_{ci} V_i R_{i \rightarrow k, \chi}^2 \tag{2.6.7}$$

$$\sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^{\infty} \Sigma_{tk} J_{\chi c} \left(\frac{\vec{\xi}}{\xi} \right) V_k R_{k \rightarrow i, \chi} = \sum_i \sum_k \Sigma_{ti} V_i J_{\chi c} \left(\frac{\vec{\xi}}{\xi} \right) R_{i \rightarrow k, \chi}$$

Damit läßt sich Gleichung (2.6.6) in die Form bringen:

$$\begin{aligned}
 & \int_i \Sigma_{ti}^g \phi_{ci}^g \phi_{cm}^g V_i \\
 &= \int_{h \leq g} \phi_{cm}^h \int_i \Sigma_i^{h \rightarrow g} \phi_{ci}^h V_i + \chi^g \sum_{l=1}^N \phi_{cm}^l \int_i (\nu \Sigma_f)_i^l \phi_{ci}^l V_i \\
 &+ \frac{1}{6} \int_{\chi} \int_{h \leq g} \frac{\partial^2 \phi_{cm}^h}{\partial \chi^2} \int_i \int_k \Sigma_i^{h \rightarrow g} \phi_{ci}^h R_{i \rightarrow k, \chi}^{2g} V_i \\
 &+ \chi^g \frac{1}{6} \int_{\chi} \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 \phi_{cm}^l}{\partial \chi^2} \int_i \int_k (\nu \Sigma_f)_i^l \phi_{ci}^l R_{i \rightarrow k, \chi}^{2g} V_i \\
 &- \int_{\chi} \int_{h \leq g} \frac{\partial J_{xm}^h}{\partial \chi} \int_i \int_k \Sigma_{d,i}^{h \rightarrow g} J_{xc}(\vec{\Sigma}_i) R_{i \rightarrow k, \chi}^{g,h}
 \end{aligned} \tag{2.6.8}$$

$$\chi = x, y, z$$

II.7 Zellhomogenisierung

Aus der Forderung nach der Erhaltung der Neutronenzahl in der Zelle läßt sich ein mittlerer Zellfluß definieren durch:

$$\phi_z V_z = \sum_i V_i \phi_i = \phi_m \sum_i \phi_{ci} V_i = \phi_m V_z$$

wobei

$$V_z = \sum_i V_i$$

ist.

Weiter gilt für die Reaktion R (mittlere Reaktionsrate in der Zelle):

$$\bar{\Sigma}_R \phi_z V_z = \sum_i \Sigma_{Ri} \phi_i V_i = \phi_m \sum_i \Sigma_{Ri} \phi_{ci} V_i$$

und damit ergibt sich ein über die Zelle gemittelter Querschnitt:

$$\bar{\Sigma}_R = \frac{\sum_i \Sigma_{Ri} \phi_{ci} V_i}{\sum_i \phi_{ci} V_i} \quad (2.7.1)$$

Analog gilt:

$$\sum_{h \neq g} \phi_z^h \bar{\Sigma}^{h \rightarrow g} V_z = \sum_{h \neq g} \sum_i \Sigma_i^{h \rightarrow g} \phi_m^h \phi_{ci}^h V_i$$

$$\bar{\Sigma}^{h \rightarrow g} = \frac{\sum_i \Sigma_i^{h \rightarrow g} \phi_{ci}^h V_i}{\sum_i \phi_{ci}^h V_i} \quad (2.7.2)$$

Man erhält also über die Zelle gemittelte Querschnitte, die sowohl mit dem Fluß als auch mit dem Volumen gewichtet werden müssen.

Damit schreibt sich Gleichung (2.6.8) in homogenisierter Form:

$$\bar{\Sigma}_t^g \phi_z^g V_z = \sum_{h \leq g} \bar{\Sigma}^{h \rightarrow g} \phi_z^h V_z + \chi^g \sum_{l=1}^N (\bar{\Sigma}_f^g)^l \phi_z^l V_z + L^g \quad (2.7.3)$$

mit L^g als Abkürzung für die letzten 3 Terme auf der rechten Seite von Gleichung (2.6.8). Diese Gleichung stellt eine Bilanz dar, wobei L^g den Leakage-Term repräsentiert.

Gilt:

$$\bar{\Sigma}_{rem}^g = \bar{\Sigma}_t^g - \bar{\Sigma}^{g \rightarrow g}$$

und beschreibt man die Leakage in der g-ten Lethargiegruppe durch den Ansatz

$$L^g = \sum_x \bar{D}_x^g \frac{\partial^2 \phi_z^g}{\partial \chi^2} V_z \quad (2.7.4)$$

$$\chi = x, y, z$$

so wird

$$\bar{\Sigma}_{rem}^g \phi_z^g V_z = \sum_{h \leq g} \bar{\Sigma}^{h \rightarrow g} \phi_z^h V_z + \chi^g \sum_{l=1}^N (\bar{\Sigma}_f^g)^l \phi_z^l V_z + \sum_x \bar{D}_x^g \frac{\partial^2 \phi_z^g}{\partial \chi^2} V_z \quad (2.7.5)$$

wobei

$$\sum_x \bar{D}_x^g \frac{\partial^2 \phi_z^g}{\partial \chi^2} V_z = \sum_x \left\{ \frac{1}{6} \sum_{h \leq g} \frac{\partial^2 \phi^h}{\partial \chi^2} \sum_i \sum_k \bar{\Sigma}^{h \rightarrow g} \phi_{ci}^h V_i R_{i \rightarrow k, \chi}^{2g} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{6} \chi^g \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 \phi^l}{\partial \chi^2} \sum_i \sum_k (\bar{\Sigma}_f^g)^l \phi_{ci}^l V_i R_{i \rightarrow k, \chi}^{g^2} \right.$$

$$-\sum_{h \neq g} \frac{\partial J_x^h}{\partial x} \sum_i \sum_k \sum_{\ell, i}^{h \rightarrow g} J_{xc}^h(\vec{\xi}_i) V_i R_{i \rightarrow k, x}^{g, h} \quad (2.7.6)$$

ist, und der Index m bei den makroskopischen Komponenten weggelassen wurde. Auf diese Weise ist eine von der Richtung abhängige Diffusionskonstante für ein heterogenes Medium definiert. Die Richtungsabhängigkeit wird dabei im wesentlichen von den Größen $R_{i \rightarrow k, x}^{g, h}$ und $R_{i \rightarrow k, x}^{2g}$ verursacht.

$$\begin{aligned} \bar{D}_x^g &= \frac{1}{6} \sum_{h \neq g} \frac{\frac{\partial^2 \phi^h}{\partial x^2}}{\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2}} \sum_i \sum_k \sum_{\ell, i}^{h \rightarrow g} \phi_{ci}^h \omega_i R_{i \rightarrow k, x}^{2g} \\ &+ \frac{1}{6} \chi^g \sum_{\ell=1}^N \frac{\frac{\partial^2 \phi^\ell}{\partial x^2}}{\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2}} \sum_i \sum_k (\nu \bar{L}_f)_i^\ell \phi_{ci}^\ell \omega_i R_{i \rightarrow k, x}^{2g} \\ &-\sum_{h \neq g} \frac{\frac{\partial J_x^h}{\partial x}}{\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2}} \sum_i \sum_k \sum_{\ell, i}^{h \rightarrow g} J_{xc}^h(\vec{\xi}_i) \omega_i R_{i \rightarrow k, x}^{g, h} \quad (2.7.7) \end{aligned}$$

mit $\omega_i = \frac{V_i}{V_z}$

Der Ansatz in Gleichung (2.7.4) impliziert, daß \bar{D}_x^g eine Konstante ist. Auf der rechten Seite der Gleichung (2.7.7) treten jedoch die makroskopischen Komponenten der Fluß- und Stromdichte auf, die an sich ortsabhängig sind. Da jedoch höhere Ableitungen dieser Größen nach dem Ort als die, die in Gleichung (2.7.7) erscheinen, vernachlässigt werden sollen (Abschnitt II.5), ist die rechte Seite von Gleichung (2.7.7) dann in guter Näherung ortsunabhängig, wenn die Bedingungen für die Gültigkeit der Diffusionsnäherung für die makroskopischen Komponenten erfüllt sind.

II.8 Mikrostrom und Mikrofluß

In Gleichung (2.7.7) für die homogenisierte richtungsabhängige Diffusionskonstante sind die Mikrokomponenten von Fluß und Strom enthalten. Um zu untersuchen, inwieweit diese Größen bei schnellen gasgekühlten Reaktoren von Bedeutung sind, wurde mit verschiedenen Rechenprogrammen versucht, den Mikrofluß im Gitter eines gasgekühlten schnellen Reaktors - im vorliegenden Fall wurden die Daten des Reaktorentwurfs des Kernforschungszentrums Karlsruhe aus dem Gasbrütermemorandum [20] verwendet - zu berechnen. Die betrachtete zylindrisierte Zelle des Gitters ist in Figur II.8.1 skizziert.

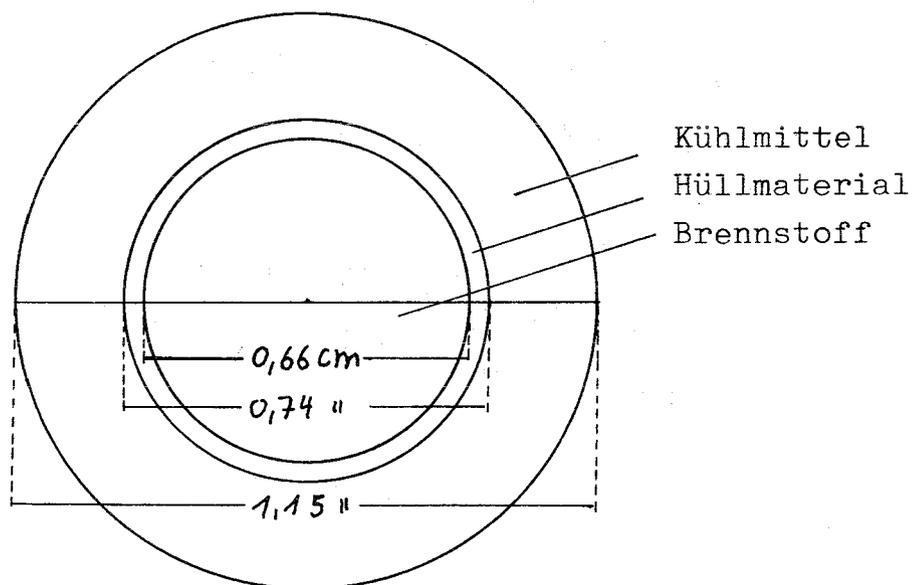


Fig. II.8.1: Gitterzelle im Reaktorentwurf des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KFZ)

Zunächst wurden mit dem Programmsystem WIMS [21], das für Zellrechnungen entwickelt worden ist, Rechnungen zur Bestimmung des Flusses in der in Figur II.8.1 skizzierten Zelle durchgeführt. Die Zahl der bei der Rechnung verwendeten Lethargiegruppen betrug 26. Sie entsprachen in etwa denen des ABN-Gruppenkonstantensatzes [22]. Die Gruppenkonstanten für die einzelnen Zellzonen wurden im Rahmen von WIMS mit den dort vorhandenen Hilfsmitteln berechnet. Das Transport-Programm DSN lieferte bei einer vorgegebenen Toleranz des Eigenwerts von 10^{-4} ($N = 16$) die in Tabelle II.8.1 angeführten Resultate für den maximalen Flußunterschied in der Zelle. Bei Vorgabe einer kleineren Fehlerschranke für den Eigenwert konnte keine Konvergenz mehr erzielt werden. Deshalb wurde noch mit dem ebenfalls in WIMS vorhandenen Programm PERSEUS, das auf der Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten beruht, der Mikrofluß berechnet. Die vorgegebene Genauigkeit des Eigenwerts betrug in diesem Fall jedoch 10^{-6} . Die Ergebnisse dieser Rechnung sind auch in Tabelle II.8.1 enthalten und stimmen mit den vom Programm DSN gelieferten Werten ungefähr überein. Der Flußverlauf in der Zelle, der sich aus der Rechnung mit dem Programm PERSEUS ergab, ist für einige Lethargiegruppen in Abbildung I gezeichnet. Wie man erkennt, ändert sich die Gestalt der Kurven für die einzelnen Lethargiegruppen sehr stark. Weiter geht aus Abbildung I und den Werten der Tabelle II.8.1 hervor, daß die Flußvariation in den ersten drei Lethargiegruppen größer ist, und zwar ergibt sich eine Flußabsenkung im Hüllmaterial von maximal 1,5 % in der ersten Gruppe (PERSEUS), bezogen auf das Flußmaximum im Zentrum der Zelle. In den darauf folgenden Lethargiegruppen,

Lethargie- Gruppe	Zylindergeometrie		Platten- geometrie
	WIMS (PERS.)	WIMS (DSN)	DTK
1	1.49	1.14	0.36
2	1.47	1.12	0.40
3	0.93	0.72	0.32
4	0.21	0.17	0.13
5	0.12	0.11	0.02
6	0.03	0.02	-0.09
7	-0.05	-0.05	-0.01
8	-0.16	-0.13	-0.01
9	+0.02	-0.02	+0.003
10	-0.19	-0.17	-0.09
11	+0.08	+0.06	+0.13
12	+0.17	+0.15	-0.21
13	-0.62	-0.51	-0.27
14	-0.22	-0.19	-0.17
15	-0.54	-0.47	-0.42
16	-0.75	-0.63	-0.79
18	-1.59	-1.38	-2.52
22	-0.86	-0.79	-0.74
24	-8.61	-8.77	-10.96

Tab. II.8.1: Maximaler Flußunterschied (in %) in der Zelle des Reaktorentwurfs des Kernforschungszentrums Karlsruhe. Berechnet mit den Programmen PERSEUS und DSN für die zylindrisierte Zelle, mit dem Programm DTK für die ebene Zelle

insbesondere in den Gruppen 4 - 10, die für die Leckage von Neutronen von Bedeutung sind, ist die Flußänderung in der Zelle jedoch wesentlich geringer.

Um diese Ergebnisse noch zu untermauern, wurde mit dem eindimensionalen SN-Programm DTK [23] der Mikrofluß in einer ebenen Zelle (Plattengeometrie) berechnet, wobei die Volumenanteile der einzelnen Zellzonen denen der zylindrischen Zelle entsprachen (reflektorische bzw. periodische Randbedingungen können mit der im Kernforschungszentrum Karlsruhe vorhandenen Version in Zylindergeometrie nicht verwendet werden). Die Multigruppenquerschnitte für die Zellzonen wurden zuvor mit dem Programmsystem NUSYS [24] bestimmt. Die Rechnung wurde ebenfalls in 26 Gruppen durchgeführt. Die Gruppeneinteilung entsprach der des ABN-Satzes, d.h. sie stimmt nur näherungsweise mit der Gruppeneinteilung in WIMS überein. Außerdem sind die Kerndaten etwas unterschiedlich. Die Zahl der Richtungen für den winkelabhängigen Fluß betrug 17. Der relative Fehler des Eigenwertes wurde zu 10^{-5} , der des Flusses zu 10^{-3} festgelegt. Die Ergebnisse dieser Rechnung sind ebenfalls in Tabelle II.8.1 enthalten. Die Flußvariation ist in der ebenen Zelle bei den einzelnen Lethargiegruppen geringer, jedoch zeigt sich dieselbe Tendenz. Auch bei Plattengeometrie ergibt sich der maximale Flußunterschied in den ersten drei Lethargiegruppen; er beträgt hier jedoch maximal 3.6 %. Kleine Unterschiede, z.B. in den Gruppen 6 und 12 (Tabelle II.8.1), erklären sich durch die Unterschiede in der Lethargiegruppeneinteilung bzw. durch unterschiedliche Kerndaten.

Für die 1. Gruppe ist der Verlauf des skalaren Flusses in der ebenen Zelle, wie er sich aus den Rechnungen mit DTK ergab, ebenfalls in Abbildung I dargestellt (gestrichelte Linie; die ebene Zelle hat andere geometrische Abmessungen und es soll hier nur der Verlauf qualitativ gezeigt werden). Man erkennt deutliche Unterschiede zu den mit dem Programm PERSEUS berechneten Zellflüssen. Diese Unterschiede erklären sich aus der verschiedenartigen Geometrie. Im Falle der ebenen Zelle sinkt der Fluß in den ersten Lethargiegruppen im Hüllmaterial etwas ab, da Neutronen, die von der Brennstoffzone in die Hüllmaterialzone eintreten, zur Teil zu niedrigeren Energien gestreut oder absorbiert werden. Die Kühlmittelzone ist nahezu mit einer Vakuumzone vergleichbar, und deshalb ergibt sich in dieser Zone ein praktisch konstanter Fluß, dessen Betrag gleich dem des Flusses am äußeren Rande der Hüllmaterialzone ist. Zu diesem Effekt kommt in der zylindersymmetrischen Zelle außerdem noch hinzu, daß ein gewisser Teil von Neutronen aus Nachbarzellen den Brennstab der Referenzzelle nahezu tangential trifft und dadurch große Wegstrecken im Hüllmaterial zurücklegt, wobei eine Ausstreuung aus den oder auch Einstreuung in die einzelnen Lethargiegruppen in stärkerem Maße erfolgt als in der ebenen Zelle. Damit erklärt sich auch, daß in der Kühlmittelzone einer zylindrischen Zelle der Fluß wieder ansteigt.

Das Ergebnis der Rechnungen zeigt, daß in Gleichung (2.7.7) für die richtungsabhängige Diffusionskonstante die Mikrokomponenten von Fluß und Strom vernachlässigt werden können, insbesondere auch in den Ausdrücken für die mittleren freien Weglängen. Der

Fehler in \bar{D}_x bzw. \bar{D}_y , der dadurch hervorgerufen wird, ist in den ersten 3 Lethargiegruppen kleiner als 1,5 % und in allen anderen Gruppen wesentlich kleiner. Da in z-Richtung die Mikrokomponenten nach Voraussetzung konstant sind, wird bei \bar{D}_z keine Vernachlässigung gemacht.

Weiter ist noch anzumerken, daß die über die Zelle homogenisierten übrigen Querschnitte aus Abschnitt II.7 dann ebenfalls nur durch Volumenmittelung erzeugt werden. Da die für ein heterogenes Zellgitter nach den Gleichungen dieses Kapitels berechnete richtungsabhängige Diffusionskonstante zur Berechnung der Kritikalität von gasgekühlten schnellen Reaktoren verwendet werden soll und die dazu benötigten übrigen Gruppenkonstanten mit den im Kernforschungszentrum Karlsruhe vorhandenen Programmen nur als mit dem Volumen gewichtete Größen berechnet werden, besitzt die Vernachlässigung der Mikrokomponenten von Fluß und Strom auch noch den praktischen Vorteil, daß sich alle Querschnitte außer der Diffusionskonstanten mit vorhandenen Hilfsmitteln bestimmen lassen.

II.9 Umformung des Ausdrucks für \bar{D}_i^g

Vernachlässigt man die Mikrokomponenten von Fluß und Strom, dann wird

$$R_{i \rightarrow k, x}^{g, h} = \frac{\sum_k \tau_k}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\sqrt{\Sigma_t^g} R}}{4\pi R^2} = R_{i \rightarrow k, x}^g \quad (2.9.1)$$

und Gleichung (2.7.7) läßt sich in der Form schreiben:

$$\bar{D}_x^g \frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2} = \sum_i \frac{\partial^2 q_i^g}{\partial x^2} \frac{1}{6} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^{2g} - \sum_i \sum_{h \neq g} \frac{\partial J_x^h}{\partial x} \sum_{\ell, i}^{h \rightarrow g} \omega_i R_{i \rightarrow k, x}^g \quad (2.9.2)$$

mit q_i^g als Abkürzung für den Quellterm

$$q_i^g = \sum_{h \neq g} \sum_i^{h \rightarrow g} \phi^h + \chi^g \sum_{\ell=1}^N (\nu \Sigma_f)_i^\ell \phi^\ell$$

Mit Hilfe der Bilanzgleichung

$$\sum_i q_i^g = \sum_i \sum_{t_i}^g \phi^g + L^g$$

wobei L^g die Leckage aus der Zelle in der g-ten Lethargiegruppe bedeuten soll - proportional zur 2. Ableitung des Flusses - und unter Berücksichtigung der Tatsache, daß Ableitungen des Flusses von höherer als der 2. Ordnung vernachlässigt werden können, vereinfacht sich die Gleichung (2.7.7) für die richtungsabhängige Diffusionskonstante zu:

$$\begin{aligned} \bar{D}_x^g &= \sum_i \sum_{t_i}^g \omega_i \cdot \frac{1}{6} \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^{2g} \\ &\quad - \sum_i \sum_{h \neq g} \frac{\frac{\partial J_x^h}{\partial x}}{\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2}} \sum_{\ell, i}^{h \rightarrow g} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^g \end{aligned} \quad (2.9.3)$$

Macht man nun noch für den Zusammenhang zwischen makroskopischer Fluß- und Stromkomponente den durch das Ficksche Gesetz gegebenen Ansatz, schreibt also:

$$\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2} = - \frac{1}{\bar{D}_x^g} \frac{\partial J_x^g}{\partial x}$$

so geht Gleichung (2.9.3) über in:

$$\bar{D}_x^g = \frac{\frac{1}{6} \sum_i \Sigma_{ti}^g \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^{2g}}{1 - \sum_{h \neq g} \frac{\partial J_x^h / \partial x}{\partial J_x^g / \partial x} \sum_i \sum_{e, i}^{h \rightarrow g} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^g} \quad (2.9.4)$$

Dies ist die endgültige Form für die richtungsabhängige Diffusionskonstante, die im weiteren verwendet werden soll. Falls die ersten Momente der elastischen Streuung mit $g \neq h$ vernachlässigt werden können - und dies ist bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren meist in guter Näherung der Fall - dann ergibt sich aus Gleichung (2.9.4) die einfachere Form, die nicht mehr von der makroskopischen Komponente des Stroms abhängt:

$$\bar{D}_x^g = \frac{\frac{1}{6} \sum_i \Sigma_{ti}^g \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^{2g}}{1 - \sum_i \sum_{e, i}^{g \rightarrow g} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, x}^g} \quad (2.9.5)$$

Beim Vorhandensein von Wasserstoff ist obige Vereinfachung jedoch nicht zulässig. Dann muß zur Berechnung von \bar{D}_x^g die Gleichung (2.9.4) verwendet werden. Bei allen in dieser Arbeit behandelten Rechnungen wurde immer die Form (2.9.4) benützt.

Eine mittlere Diffusionskonstante für das heterogene Zellgitter ist definiert durch die Gleichung:

$$\bar{D}_0^g = \frac{1}{3}(\bar{D}_x^g + \bar{D}_y^g + \bar{D}_z^g)$$

II.10 Spezielle Gittersymmetrien

Ist das Brennstoffgitter zylindersymmetrisch oder besitzt es wie im vorliegenden Fall in zwei zueinander senkrechten Richtungen x und y dieselben mikroskopischen Eigenschaften (quadratisches oder hexagonales Brennstabgitter), so gilt für die x-y-Ebene:

$$\frac{\partial^2 \phi^g}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \phi^g}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 \phi^g}{\partial r^2}$$

$$R_{i \rightarrow k, x}^{(2)g} = R_{i \rightarrow k, y}^{(2)g} = R_{i \rightarrow k, r}^{(2)g} \quad (2.10.1)$$

$$\bar{D}_x^g = \bar{D}_y^g = \bar{D}_r^g$$

$$\bar{D}_0^g = \frac{1}{3}(2\bar{D}_r^g + \bar{D}_z^g) \quad (2.10.2)$$

II.11 Grenzfall des homogenen Mediums

Die Richtigkeit des Ausdrucks für die richtungsabhängige Diffusionskonstante läßt sich an Hand des Grenzfalls eines homogenen, unendlich ausgedehnten Mediums überprüfen. In diesem Fall sind die Mikrokomponenten exakt gleich 1 und mit $i = 1$ ist $\omega_i = 1$. Weiter lassen sich die Ausdrücke für $R_{i \rightarrow k, \gamma}^2$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}$ in diesem Fall analytisch ausrechnen. Es gilt:

$$\int_{k=1}^{\infty} R_{i \rightarrow k, \chi}^{2g} = \int_{k=1}^{\infty} R_{l \rightarrow k, \gamma}^{2g} = \int_{k=1}^{\infty} R_{i \rightarrow k, z}^{2g} = \frac{2}{\sum_t^{2g}}$$

$$\int_{k=1}^{\infty} R_{i \rightarrow k, \chi}^g = \int_{k=1}^{\infty} R_{i \rightarrow k, \gamma}^g = \int_{k=1}^{\infty} R_{i \rightarrow k, z}^g = \frac{1}{\sum_t^g}$$

Wenn man einmal von dem Term mit $\frac{\partial J_x^h}{\partial x} / \frac{\partial J_x^g}{\partial x}$

in Gleichung (2.9.4) absieht, sind nur die Größen $R_{i \rightarrow k, z}^{2g}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^g$ für die Richtungsabhängigkeit der Diffusionskonstanten verantwortlich. Diese Richtungsabhängigkeit verschwindet also erwartungsgemäß im Fall des homogenen Mediums. Setzt man weiter die Werte für $R_{i \rightarrow k, z}^{2g}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^g$ in die Gleichung (2.9.4) ein, so ergibt sich z.B. für \bar{D}_x :

$$\bar{D}_x^g = \frac{1}{3 \left[\sum_t^g - \sum_{h \neq g} \frac{\partial J_x^h / \partial x}{\partial J_x^g / \partial x} \sum_{el}^{h \rightarrow g} \right]} \quad (2.11.1)$$

Falls
$$\frac{\partial J_x^h}{\partial x} = \frac{\partial J_y^h}{\partial y} = \frac{\partial J_z^h}{\partial z} = \frac{1}{3} \operatorname{div} \vec{J}^h \quad \text{ist,}$$

wird

$$\bar{D}_0^g = \bar{D}_x^g = \bar{D}_y^g = \bar{D}_z^g = \frac{1}{3 \left[\sum_t^g - \sum_{h \neq g} \frac{\operatorname{div} \vec{J}^h}{\operatorname{div} \vec{J}^g} \sum_{el}^{h \rightarrow g} \right]} \quad (2.11.2)$$

Dieser Ausdruck ist aber formal identisch mit dem in der Diffusionsnäherung für homogene Medien verwendeten Ausdruck für D [17], d.h. die Beziehung (2.9.4) liefert im Grenzfall des homogenen Mediums den richtigen Ausdruck für die Diffusionskonstante. Außerdem ergibt sich aus dieser Tatsache auch die Antwort auf die Frage nach der Wichtung der in die Gleichung (2.9.4) eingehenden Querschnitte. Denn da die Querschnitte in Gleichung (2.11.2) für die Diffusionskonstante im homogenen Medium mit dem Strom bzw. der Divergenz des Stromes gewichtet sind und im Fall des homogenen Mediums die Gleichungen (2.9.4) und (2.11.2) denselben Wert der Diffusionskonstanten liefern sollen, folgt, daß auch die Querschnitte in Gleichung (2.9.4) mit dem Strom bzw. der Divergenz des Stromes zu wichten sind. Es sei allerdings nochmals darauf hingewiesen, daß die hier interessierenden Leckageeffekte oberhalb des Resonanzbereiches der schweren Kerne von Bedeutung sind und wie in Abschnitt IV.3 gezeigt wird, spielt deshalb die Art der Wichtung praktisch keine Rolle.

III. Berechnung der gerichteten mittleren freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und der gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ vom Medium i zum Medium k

III.1 Allgemeine Eigenschaften

Im Ausdruck für die richtungsabhängige Diffusionskonstante (Gl. 2.9.4) treten die Größen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ auf, deren Berechnung im vorliegenden Kapitel behandelt werden soll.

Die Definitionsgleichungen für diese Größen lauten:

$$R_{i \rightarrow k, \chi} = \frac{\Sigma_{tk}}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.1.1)$$

$$R_{i \rightarrow k, \chi}^2 = \frac{\Sigma_{tk}}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R^2 \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.1.2)$$

Der Index g, der die Abhängigkeit von der Lethargiegruppe bezeichnet, wurde hier der Einfachheit halber weggelassen.

Die Gleichungen (3.1.1) und (3.1.2) haben große Ähnlichkeit mit dem Ausdruck für die (Erst-) Stoßwahrscheinlichkeit,

$$P_{i \rightarrow k} = \frac{\Sigma_{tk}}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2}$$

der die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der ein Neutron, das im Medium i startet, seinen ersten Stoß im Medium k erleidet.

Noch größer ist die Verwandtschaft der Gleichungen (3.1.1) und (3.1.2) mit den von Benoist [12] eingeführten gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten

$$P_{i \rightarrow k, \chi} = \frac{\Sigma_{tk}}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.1.3)$$

Für alle diese Größen gilt, wie man am Beispiel von $R_{i \rightarrow k, \chi}$ sofort sieht, folgende Reziprozitätsbeziehung:

$$\frac{V_i}{\Sigma_{tk}} R_{i \rightarrow k, \chi} = \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} = \int_{V_i} d\vec{r}' \int_{V_k} d\vec{r} [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} = \frac{V_k}{\Sigma_{ti}} R_{k \rightarrow i, \chi} \quad (3.1.4)$$

Die Beziehung für normale Stoßwahrscheinlichkeiten,

$$\sum_{\text{alle } k} P_{i \rightarrow k} = 1$$

die auch für die gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten von Benoist gilt und die deren Berechnung oft sehr erleichtert, hat dagegen kein Analogon im Falle der $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$.

Definiert man:

$$R_{i \rightarrow k, 0} = \frac{\Sigma_{tk}}{V_i} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' R \frac{e^{-\widetilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.1.5)$$

so gilt:

$$R_{i \rightarrow k, 0} = \frac{1}{3} \sum_{\chi} R_{i \rightarrow k, \chi} \quad \chi = X, Y, Z \quad (3.1.6)$$

Die analoge Beziehung besteht natürlich auch für das mittlere Quadrat der freien Weglänge $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$.

Im Falle eines homogenen, unendlich ausgedehnten Mediums ergibt sich wie schon im II. Kapitel erwähnt:

$$\begin{aligned} \sum_{\text{alle } k} R_{i \rightarrow k, \chi}^2 &= \frac{2}{\Sigma_t} \\ \sum_{\text{alle } k} R_{i \rightarrow k, \chi} &= \frac{1}{\Sigma_t} \end{aligned}$$

d.h. die Größen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ hängen nicht mehr vom Index χ ab. Da $1/\Sigma_t$ die mittlere freie Weglänge des Neutrons im homogenen Medium darstellt, könnte man $R_{i \rightarrow k, 0}$ im heterogenen Medium als die mittlere freie Weglänge vom Medium i zum Medium k auffassen. Dann kann aber in Anlehnung an den Begriff der gerichteten Stoßwahrscheinlichkeit $R_{i \rightarrow k, \chi}$ als die gerichtete mittlere freie Weglänge vom Medium i zum Medium k bezeichnet werden. Folgerichtig ist dann weiter $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ als das gerichtete mittlere Quadrat der freien Weglänge im heterogenen Medium anzusehen.

Die Berechtigung dieser Bezeichnung für die Größen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ soll jedoch noch etwas genauer überprüft werden. Es wird für die folgenden

Überlegungen ein unendlich ausgedehntes, periodisches Gitter angenommen. Dann gilt für die Wahrscheinlichkeit P , daß ein Neutron, welches mit der Lethargie u und der Flugrichtung $\vec{\Omega}$ vom Punkt \vec{r} aus startet, im Intervall dR und im Abstand R vom Startpunkt seine erste Reaktion erleidet:

$$P(R) dR = e^{-\int_0^R \Sigma_t(u, s) ds} \cdot \Sigma_t(u, R) dR = e^{-\tilde{\Sigma}_t R} \Sigma_t(u, R) dR$$

mit
$$\int_0^{\infty} P(R) dR = 1$$

Die mittlere freie Weglänge $\bar{\lambda}_{\vec{r}}(\vec{\Omega}, u)$ in Richtung $\vec{\Omega}$, bezogen auf den Aufpunkt \vec{r} , ist dann:

$$\bar{\lambda}_{\vec{r}}(u, \vec{\Omega}) = \frac{\int_0^{\infty} dR R e^{-\tilde{\Sigma}_t R} \Sigma_t(u, R)}{\int_0^{\infty} P(R) dR} = \int_0^{\infty} dR R e^{-\tilde{\Sigma}_t R} \Sigma_t(u, R)$$

Bezeichnet man mit $q(\vec{r}, u, \vec{\Omega})$ die Emissionsdichte im Punkt \vec{r} , dann gilt für die mittlere freie Weglänge im periodischen Gitter, bezogen auf den Aufpunkt \vec{r} :

$$\bar{\lambda}_{\vec{r}}(u) = \frac{\int d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) \int_0^{\infty} dR R \Sigma_t(R, u) e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{\int_{4\pi} d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, u)}$$

Um schließlich die mittlere freie Weglänge im periodischen Gitter unabhängig vom Aufpunkt zu erhalten, muß noch über das Volumen einer Zelle im Gitter integriert werden, also:

$$\bar{\lambda}(u) = \frac{\int_{V_z} d\vec{r} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) \int_0^{\infty} dR R \Sigma_t(R, u) e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}}}{\int_{V_z} d\vec{r} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, u)}$$

wobei $\int_{4\pi} d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, u) = q_0(\vec{r}, u)$ ist.

Entwickelt man die Emissionsdichte nach Kugelflächenfunktionen in der Variablen $\vec{\Omega}$ und betrachtet in dieser Reihenentwicklung nur das 0-te Moment $\frac{1}{4\pi} q_0(\vec{r}, u)$, so ergibt sich für das 0-te Moment der freien Weglänge:

$$\bar{\lambda}_0(u) = \frac{\int_{V_z} d\vec{r} q_0(\vec{r}, u) \int_{\infty} d\vec{r}' R \Sigma_t(\vec{r}', u) \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}}}{4\pi R^2}}{\int_{V_z} d\vec{r} q_0(\vec{r}, u)}$$

wobei $d\vec{r}' = R^2 dR d\vec{\Omega}$ bedeutet.

Besteht eine Zelle des Gitters aus I Zonen und ist das 0-te Moment der Emissionsdichte innerhalb einer Zellzone unabhängig von \vec{r} , dann ergibt sich für das 0-te Moment der mittleren freien Weglänge im Gitter:

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}_0(u) &= \frac{\sum_{i=1}^I q_0^i(u) \sum_{k=1}^{\infty} \Sigma_t^k(u) \int_{V_i} d\vec{r} \int_{V_k} d\vec{r}' R \frac{e^{-\vec{\Sigma}_t \vec{R}}}{4\pi R^2}}{\sum_i q_0^i(u) V_i} \\ &= \frac{\sum_i q_0^i(u) V_i \sum_k R_{i \rightarrow k, 0}}{\sum_i q_0^i(u) V_i} \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

Dabei sind die Integrale in Summen von Teilintegralen über Zellzonen aufgespalten worden. Außerdem ist berücksichtigt, daß innerhalb einer Zone der totale makroskopische Querschnitt ortsunabhängig ist.

Damit ist gezeigt, daß $\sum_k R_{i \rightarrow k, 0}$ das 0-te Moment der mittleren freien Weglänge, bezogen auf die Zone i, darstellt, also $\sum_k R_{i \rightarrow k, 0} = \bar{\lambda}_0^i$. Deshalb können auch die einzelnen $R_{i \rightarrow k, 0}$ als 0-te Momente der mittleren freien Weglänge vom Medium i zum Medium k angesehen werden. Das Analoge gilt natürlich auch für die mittleren Quadrate der freien Weglänge. Der Einfachheit halber, und da keine Mißverständnisse zu befürchten sind, soll im folgenden der Zusatz 0-te Momente weggelassen werden.

Die mittlere freie Weglänge für das periodische Gitter hängt nach Gleichung (3.1.7) noch von der Emissionsdichte ab. Macht man nun für die Emissionsdichte einen speziellen Ansatz, d.h. setzt man sie proportional zum totalen makroskopischen Querschnitt Σ_t , so ergibt sich die Form:

$$\bar{\lambda}_0^i(u) = \frac{\sum_i \Sigma_{ti} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, 0}}{\sum_i \Sigma_{ti} \omega_i} = \frac{\sum_i \Sigma_{ti} \omega_i \sum_k R_{i \rightarrow k, 0}}{\Sigma_{t, hom}} \quad (3.1.8)$$

wobei $\omega_i = \frac{V_i}{V_z}$ (V_z = Zellvolumen) ist und $\Sigma_{t, hom}$ den homogenisierten totalen Stoßquerschnitt der Zelle darstellt. Es läßt sich leicht ableiten, z.B. für den eindimensionalen Fall, daß bei diesem Ansatz für die Emissionsdichte sich aus Gleichung (3.1.8) die mittlere

freie Weglänge im periodischen Gitter ergibt zu:

$$\bar{\lambda}^0(u) = \frac{1}{\sum_{t, \text{hom}} (u)}$$

d.h. es gilt:

$$1 = \sum_i \sum_{t_i} \omega_i \sum_{\kappa} R_{i \rightarrow \kappa, 0} \quad (3.1.9)$$

Diese Beziehung wird später noch (Kapitel IV) im Zusammenhang mit Genauigkeitsfragen von Bedeutung sein.

III.2 Zylindersymmetrie

Im zylindersymmetrischen Fall oder allgemein im Falle eines Gebiets, das in zwei zueinander senkrechten Richtungen x und y dieselbe Struktur aufweist - z.B. ein hexagonales Gitter - gilt:

$$R_{i \rightarrow \kappa, x} = R_{i \rightarrow \kappa, y} = R_{i \rightarrow \kappa, r} = \frac{1}{2} \frac{\sum_{t, \kappa}}{V_i} \int d\vec{r} \int_{V_i} d\vec{r}' [\beta \Omega_r^2] R \frac{e^{-\vec{\Sigma}_r R}}{4\pi R^2} \quad (3.2.1)$$

wobei $\Omega_r^2 = \Omega_x^2 + \Omega_y^2$ ist.

Dann folgt:

$$R_{i \rightarrow \kappa, 0} = \frac{1}{3} [R_{i \rightarrow \kappa, z} + 2 R_{i \rightarrow \kappa, r}] \quad (3.2.2)$$

Für $R_{i \rightarrow \kappa, 0}^2$ und $R_{i \rightarrow \kappa, r}^2$ gelten analoge Beziehungen.

III.3 Allgemeine Überlegungen zur Berechnung der gerichteten mittleren freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und der gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$.

Wegen der formalen Ähnlichkeit der Ausdrücke für die $R_{i \rightarrow k, \chi}$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ mit denen für die Stoßwahrscheinlichkeiten liegt es nahe, bei der Berechnung dieser Größen auf die Methoden zurückzugreifen (z.B. [25]), die bei Stoßwahrscheinlichkeiten entwickelt worden sind. Nun sind allerdings Berechnungsmethoden für Stoßwahrscheinlichkeiten hauptsächlich im Zusammenhang mit der Theorie thermischer Reaktoren entwickelt worden. Bei Neutronenenergien, die für thermische Reaktoren typisch sind, ist der totale Stoßquerschnitt relativ groß, so daß die Exponentialfunktion im Ausdruck für die Stoßwahrscheinlichkeiten schnell abfällt. Das bedeutet aber, daß bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten P nur solche Gebiete k betrachtet werden müssen, die relativ nahe beim Gebiet i gelegen sind. So ist z.B. bei einem mit schwerem Wasser moderierten thermischen Reaktor die Wahrscheinlichkeit des Übergangs eines Neutrons von einer Zelle in eine benachbarte klein im Vergleich zu den Übergangswahrscheinlichkeiten von einer Zellzone in die andere. Deshalb ist es oft schon ausreichend, bei der Berechnung von $P_{i \rightarrow k, \chi}$ nur die Zonen k einer Zelle zu betrachten. Ganz anders liegen die Dinge dagegen bei schnellen, gasgekühlten Reaktoren. Da hier der totale Stoßquerschnitt verhältnismäßig klein ist und auch die durch einen Brennstab und den zugehörigen Kühlmittelanteil definierte Zelle klein ist, addieren sich bei der Bildung der Ausdrücke $\sum_k R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ und $\sum_k R_{i \rightarrow k, \chi}$ viele kleine Beiträge aus vielen Zellen. Das heißt aber,

daß man im Gegensatz zu den Verhältnissen bei thermischen Reaktoren bei schnellen Brutreaktoren sehr viele kleine und auch weit voneinander entfernte Gebiete berücksichtigen und ihre Beiträge exakt berechnen muß. Die relativ einfache Struktur des Integranden in den Ausdrücken (3.1.1) und (3.1.2) legt jedoch unabhängig von diesen Unterschieden folgendes Vorgehen nahe: Man führt die Integration in den Gleichungen (3.1.1) und (3.1.2) soweit als möglich analytisch aus (2 Integrationen) und integriert den Restausdruck numerisch. Da in die Gleichung (2.9.4) für den richtungsabhängigen Diffusionskoeffizienten nicht die einzelnen Größen $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ bzw. $R_{i \rightarrow k, \chi}$, sondern nur die Terme $\sum_k R_{i \rightarrow k, \chi}$ bzw. $\sum_k R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ eingehen, wird die Summation analytisch ausgeführt, und nur die Gesamtsumme numerisch ausgewertet. Dies führt zu einer großen Vereinfachung der numerisch zu behandelnden Gleichungen.

Die Zonenzahl einer Zelle, die vor der Berechnung der $R_{i \rightarrow k, \chi}^2$ und $R_{i \rightarrow k, \chi}$ festgelegt werden muß, hängt einmal vom Mikrofluß in der Zelle ab. Denn der Übergang von den Gleichungen (2.6.2) und (2.6.3) auf die einfacheren Formen (2.6.4) und (2.9.1) läßt sich nur durchführen, wenn die Zone so klein ist, daß sich innerhalb der Zone die Mikrokomponenten von Fluß und Strom wenig ändern. Bei schnellen Reaktoren ist diese Voraussetzung, wie in Abschnitt II.8 gezeigt wurde, gut erfüllt, und deshalb ergibt sich von dieser Seite

her keine Einschränkung bei der Festlegung der Zonenzahl.

Zum anderen ist die Zahl der Zonen in einer Zelle durch den Aufbau der Zelle aus verschiedenen Materialien auf natürliche Weise vorgegeben. Daraus ergibt sich bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren eine aus 3 Zonen bestehende Zelle, die innerste Zone, die Brennstoffzone, eine daran anschließende Hüllmaterialzone und die Kühlmittelzone. Die Ausdrücke, die bei der Berechnung von $\sum_k R_{i \rightarrow k, x}^2$ und $\sum_k R_{i \rightarrow k, x}$ numerisch auszuwerten sind, werden jedoch mit zunehmender Zonenzahl sehr umfangreich und unübersichtlich. Da weiter die freien Weglängen im Brennstoff bzw. Hüllmaterial gasgekühlter schneller Brutreaktoren in grober Näherung um den Faktor 10^2 kleiner sind als die des Kühlmittels, soll hier die Brennstoff- und Hüllmaterialzone zu einer Zone zusammengefaßt werden (homogenisierter Brennstab). Dadurch erreicht man eine wesentliche Vereinfachung der auszuwertenden Gleichungen, ohne die Genauigkeit der Rechnung nennenswert zu vermindern. Im weiteren soll daher ein hexagonales Gitter betrachtet werden, in dem eine Zelle gegeben ist, die aus 2 Zonen besteht, nämlich dem Brennstab (Zone 1, Brennstoffzone) und dem auf ihn anteilmäßig entfallenden Kühlmittelvolumenanteil (Zone 2, Kühlmittelzone).

III.4 Bickleyfunktionen

Bei der Behandlung der Gleichungen für die gerichteten mittleren freien Weglängen und für die gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen treten

Ausdrücke auf von der Form:

$$K_{i_n}(x) = \int_0^{\pi/2} \sin^{n-1} \psi e^{-\frac{x}{\sin \psi}} d\psi \quad (3.4.1)$$

die in der Literatur [26] unter dem Namen Bickley-funktionen vom Grad n bekannt sind. Es handelt sich hierbei um Funktionen mit dem Definitionsbereich:

$$0 \leq x \leq \infty$$

Sie sind in diesem Bereich endlich und monoton fallend, wobei mit größer werdendem Argument x ein exponentieller Abfall immer ausgeprägter wird. Ihre Eigenschaften sollen, soweit sie im weiteren Verlauf noch benötigt werden, in diesem Abschnitt kurz beschrieben werden.

1. Durch die Transformation

$$\psi = \arcsin \left(\frac{1}{\cosh u} \right)$$

kann Gleichung (3.4.1) in die ursprünglich von Bickley angegebene Form zurückgeführt werden,

$$K_{i_n}(x) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x \cosh u}}{\cosh^n u} du \quad (3.4.2)$$

die in leicht modifizierter Form auch als

$$K_{i_n}(x) = e^{-x} \int_0^{\infty} \frac{e^{-2x \left[\sinh \frac{u}{2} \right]^2}}{\cosh^n(u)} du \quad (3.4.3)$$

geschrieben werden kann. In dieser Form läßt sich

für ein vorgegebenes Argument x der Funktionswert der Bickleyfunktion n -ten Grades besonders leicht numerisch berechnen, da der Integrand im Intervall $[0, \infty]$ monoton fallend ist und für $u = 0$ immer den Wert 1 besitzt. Eine Methode zur numerischen Berechnung von $Ki_n(x)$ nach Gleichung (3.4.3) ist in [26] angegeben.

2. Die Bickleyfunktionen lassen sich in eine Reihe entwickeln. Es gilt:

$$Ki_n(x) = Ki_n(0) + \sum_{i=n-1}^1 Ki_i(0) (-1)^{i+n} \frac{x^{n-i}}{(n-i)!} + (-1)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^n \left(\frac{x}{2}\right)^{2m}}{(m!)^2 \prod_{v=1}^n (2m+v)} \left(\sum_{\ell=1}^m \frac{1}{\ell} + \sum_{\gamma=1}^n \frac{1}{2m+\gamma} - \ln \frac{x}{2} - \gamma \right) \quad (3.4.4)$$

$$\gamma = 0.5772156 \dots \quad \text{Eulersche Konstante}$$

Diese Darstellung ist zwar im gesamten Definitionsbereich gültig, jedoch lassen sich danach die Funktionswerte der Bickleyfunktionen nur für relativ kleine Argumente x numerisch berechnen, da mit wachsendem x die kleiner werdenden Funktionswerte als Differenzen größer werdender Zahlen bestimmt werden. Das heißt, um eine vorgegebene Zahl geltender Ziffern in $Ki_n(x)$ zu behalten, müssen die Terme in Gleichung (3.4.4) mit wachsender Genauigkeit berechnet werden.

3. Die Bickleyfunktionen sind differenzierbar und nach Gleichung (3.4.2) gilt:

$$\frac{d}{dx} K_{i_n}(x) = -K_{i_{n-1}}(x) \quad (3.4.5)$$

Wird Gleichung (3.4.5) n-mal angewandt, dann ergibt sich:

$$\frac{d^n}{dx^n} K_{i_n}(x) = (-1)^n K_{i_0}(x) = (-1)^n K_0(x) \quad (3.4.6)$$

wobei $K_0(x)$ die modifizierte Besselfunktion zweiter Art und 0-ter Ordnung bedeutet.

4. Für große Werte von x kann Gleichung (3.4.2) in eine Taylorreihe entwickelt werden und man erhält:

$$K_{i_n}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-x} \cdot x^{-\frac{1}{2}} \left[1 + O\left(\frac{1}{x}\right) \right] \quad (3.4.7)$$

d.h. es gilt die Darstellung

$$K_{i_n}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-x} \cdot x^{-\frac{1}{2}} Z_{i_n}(x) \quad (3.4.8)$$

Für die Besselfunktion K_0 lautet die asymptotische Entwicklung [27] :

$$K_0(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-x} x^{-\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{1^2}{1!8x} + \frac{1^2 \cdot 3^2}{2!(8x)^2} - \dots \right] \quad (3.4.9)$$

d.h.

$$Z_{i_0}(x) = \left[1 - \frac{1^2}{1!8x} + \dots \right]$$

und für $n > 0$ ergibt sich auf Grund von Gleichung (3.4.5) und (3.4.8) die Rekursionsformel

$$\frac{dZ'_{i_n}(x)}{dx} - \left(1 + \frac{1}{2x}\right) Z'_{i_n}(x) = Z'_{i_{n-1}}(x) \quad (3.4.10)$$

Ist $Z_{i_n}(x)$ gegeben durch:

$$Z_{i_n}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{Z_m^{(n)}}{m! (2x)^m}$$

dann erhält man für die Konstanten $Z_m^{(n)}$ aus (3.4.10) die Rekursionsformel

$$Z_m^{(n)} - 4m(2m-1)Z_{m-1}^{(n)} = Z_m^{(n-1)} \quad (3.4.11)$$

wobei die Anfangswerte

$$Z_0^{(0)} = 1$$

$$Z_m^{(0)} = 1^2 \cdot 3^2 \cdot \dots \cdot (2m-1)^2, \quad m = 1, 2, \dots$$

sind. Nach diesen Gleichungen lassen sich also für große Argumente x die Funktionswerte $K_{i_n}(x)$ berechnen.

5. Zum Schluß dieses Abschnittes soll noch eine schon aus dem Jahre 1935 von Bickley [28] stammende Formel angegeben werden, die es gestattet, die Bickley-funktionen höheren Grades als $n = 3$ rekursiv zu berechnen. Diese Rekursionsformel hat sich als numerisch stabil erwiesen, mindestens im Argumentbereich

$$x \leq 10$$

Höhere Argumente sind in dieser Arbeit nicht von Interesse.

Es gilt:

$$\begin{aligned} K_{i_{n-2}}(x) - K_{i_n}(x) &= \int_0^{\infty} \frac{e^{-x \cosh u} \cdot \sinh^2 u}{\cosh^n u} du \\ &= \left[-\frac{1}{x} e^{-x \cosh u} \cdot \frac{\sinh u}{\cosh^n u} \right]_0^{\infty} + \frac{1}{x} \int_0^{\infty} \frac{e^{-x \cosh u} (\cosh^2 u - n \sinh^2 u)}{\cosh^{n+1} u} du \\ &= \frac{1}{x} \int_0^{\infty} e^{-x \cosh u} \frac{\cosh^2 u - n \sinh^2 u}{\cosh^{n+1} u} du = \frac{1}{x} \{ n K_{i_{n+1}}(x) - (n-1) K_{i_{n-1}}(x) \} \end{aligned}$$

oder

$$n K_{i_{n+1}}(x) = (n-1) K_{i_{n-1}}(x) + x \{ K_{i_{n-2}}(x) - K_{i_n}(x) \} \quad (3.4.12)$$

Mit Hilfe dieser sehr einfachen Formel werden im folgenden alle benötigten Bickleyfunktionen von höherem Grade als $n = 3$ berechnet.

III.5 Berechnung der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone der Referenzzelle

Es gilt:

$$\sum_{\text{alle } k} R_{1 \rightarrow k, x}^2 = \sum_k \frac{\Sigma_{tK}}{V_1} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_1} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R^2 \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.5.1)$$

bzw.

$$\sum_{\text{alle } k} R_{1 \rightarrow k, x} = \sum_k \frac{\Sigma_{tK}}{V_1} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_1} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\tilde{\Sigma}_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.5.2)$$

Wegen der Ähnlichkeit der Gleichungen (3.5.1) und (3.5.2) erfolgt die Berechnung der Größen

$\sum_k R_{1 \rightarrow k, x}^2$ und $\sum_k R_{1 \rightarrow k, x}$ auf ähnliche Weise, und deshalb soll im folgenden nur Gleichung (3.5.1) weiter behandelt werden.

In Figur (III.5.1a) ist die Projektion einer Neutronenflugbahn (Richtung $\vec{\Omega}$, Fig. III.5.1b) auf die Horizontalebene gezeichnet. Ein rechtwinkliges Koordinatensystem liegt im Mittelpunkt des Referenzstabes. R_1 und R_2 sind die Durchstoßpunkte der Neutronenflugbahn durch die Berandung der Brennstoffzone der Referenzzelle. R_{2k+1} bzw. R_{2k} bezeichnen die Durchstoßpunkte bei den übrigen Brennstäben, die in der Neutronenflugbahn liegen. (Die Projektion auf die Horizontalebene wird in Figur III.5.1a durch einen Querstrich angedeutet). Die Abstände der Mittelpunkte der Stäbe k vom Mittelpunkt

Projektion der Neutronenflugbahn
auf die Horizontalebene

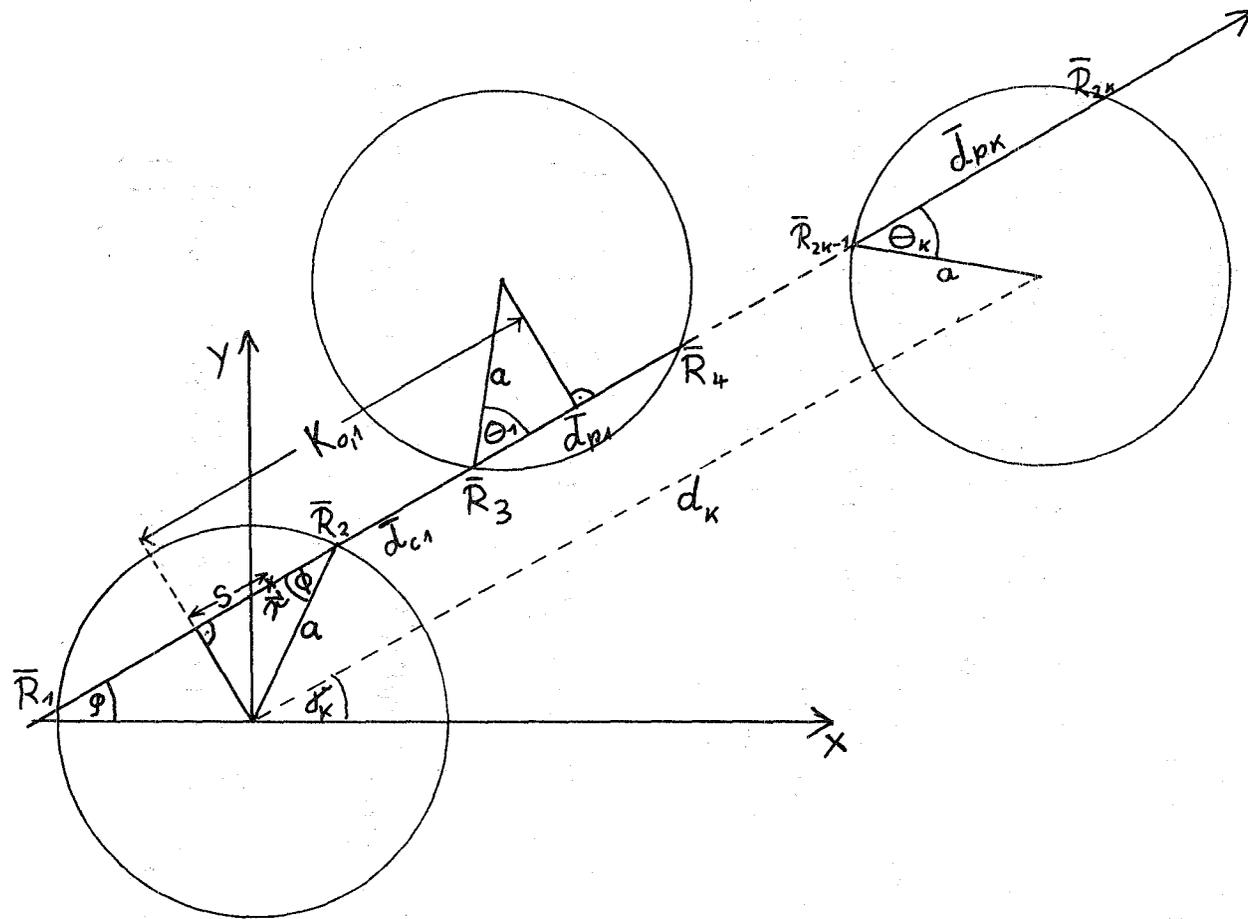


Fig. III.5.1a

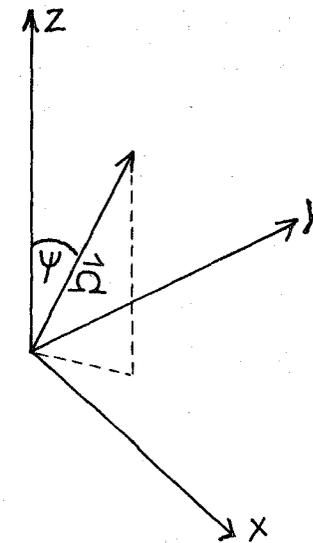


Fig. III.5.1b

des Referenzstabes sind mit d_k , die Winkel zwischen d_k und der x-Achse mit γ_k bezeichnet. Der Winkel zwischen der Projektion der Neutronenflugbahn auf die Horizontalebene und der x-Achse sei φ . Der Elevationswinkel der Neutronenflugbahn über die Horizontalebene sei $90 - \psi$ (Fig. III.5.1b). Der Winkel \varnothing (Fig. III.5.1a) wird dann als positiv angenommen, wenn die Neutronenflugbahn unterhalb des Mittelpunktes des Referenzstabes verläuft (in Fig. III.5.1a ist der eingezeichnete Winkel \varnothing also negativ).

Vertauscht man in Gleichung (3.5.1) die Integrationsfolge und transformiert auf Polarkoordinaten, so ergibt sich:

$$\int_{K=1}^{\infty} R_{l \rightarrow k, x}^2 = \frac{1}{4\pi V_1} \int_{V_1} d\vec{r}' \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \int_{K=1}^{\infty} \int_{R_{2K-1}}^{R_{2K}} \Sigma_{tk} [3\Omega_x^2] R^2 e^{-\Sigma_t R} \quad (3.5.3)$$

Berücksichtigt man weiter, daß der totale Stoßquerschnitt in allen Stäben gleich ist (Σ_p), und bezeichnet man den totalen Stoßquerschnitt des Kühlmittels mit Σ_c , so ergibt sich mit den Bezeichnungen von Figur III.5.1a:

$$\int_K R_{1 \rightarrow k, x}^2 = \frac{1}{4\pi^2 a^2} \int_{V_1} d\vec{r}' \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \left\{ \frac{2}{\Sigma_p^2} + e^{-\Sigma_p R_2} [2x_1 * \right.$$

$$\int_{K=1}^{\infty} \left(R_{2K} e^{-\int_{\ell=1}^{K-1} (\Sigma_p d_{p\ell} + \Sigma_c d_{c\ell})} - R_{2K+1} e^{-\int_{\ell=1}^K (\Sigma_p d_{p\ell-1} + \Sigma_c d_{c\ell})} \right)$$

$$\left. + 2x_2 \int_{K=1}^{\infty} \left(e^{-\int_{\ell=1}^{K-1} (\Sigma_p d_{p\ell} + \Sigma_c d_{c\ell})} - e^{-\int_{\ell=1}^K (\Sigma_p d_{p\ell-1} + \Sigma_c d_{c\ell})} \right) \right\} \quad (3.5.4)$$

wobei $d_{p0} = 0$ ist

und zur Abkürzung

$$x_1 = \frac{1}{\Sigma_c} - \frac{1}{\Sigma_p} \quad (3.5.5)$$

$$x_2 = \frac{1}{\Sigma_c^2} - \frac{1}{\Sigma_p^2} \quad (3.5.6)$$

gesetzt wurde.

Es werden nun neue Integrationsvariablen ϕ , s mit der in Figur III.5.1a angegebenen Bedeutung eingeführt (s ist der Abstand zwischen dem Aufpunkt und dem Fußpunkt des Lots vom Mittelpunkt des Referenzstabs auf die Projektion der Neutronenflugbahn).

Dann gilt:

$$a \sin \phi = y \cos \varphi - x \sin \varphi$$

$$s = x \cos \varphi + y \sin \varphi$$

Die Funktionaldeterminante für den Übergang von x, y, φ, ψ auf ϕ, φ, ψ, s ist

$$|\text{DET}| = a \cos \phi \quad (3.5.7)$$

und die Integrationsgrenzen der neuen Variablen sind:

$$-\frac{\pi}{2} \leq \phi \leq +\frac{\pi}{2} \quad (3.5.8)$$

$$-a \cos \phi \leq s \leq a \cos \phi$$

Ersetzt man in Gleichung (3.5.4) die alten Variablen durch die neuen und führt die Integration über s aus, so ergibt sich:

$$\sum_{k=1}^{\infty} R^2_{1 \rightarrow k, x} = \frac{1}{4\pi^2 a^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin \psi d\psi \int_{-a \cos \phi}^{a \cos \phi} ds a \cos \phi [3\Omega_x^2] * \left\{ \frac{4a \cos \phi}{\Sigma_p^2} \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + 2 \left(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_P} \right) \frac{\sin \Psi}{\Sigma_P} \sum_{k=1}^{\infty} \left[e^{-\frac{x_k}{\sin \Psi}} - e^{-\frac{x_k + \varepsilon_0}{\sin \Psi}} - e^{-\frac{x_k + \delta_k}{\sin \Psi}} + e^{-\frac{x_k + \varepsilon_0 + \delta_k}{\sin \Psi}} \right] \\
 & + \frac{2x_1}{\Sigma_P} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(K_{0,k-1} - a \cos \phi + a \cos \theta_{k-1}) e^{-\frac{x_k}{\sin \Psi}} - (K_{0,k-1} + a \cos \phi + a \cos \theta_{k-1}) \right. \\
 & \cdot e^{-\frac{x_k + \varepsilon_0}{\sin \Psi}} - (K_{0,k} - a \cos \phi - a \cos \theta_k) e^{-\frac{x_k + \delta_k}{\sin \Psi}} + (K_{0,k} + a \cos \phi \\
 & \left. - a \cos \theta_k) e^{-\frac{x_k + \varepsilon_0 + \delta_k}{\sin \Psi}} \right] \} \quad (3.5.9)
 \end{aligned}$$

wobei $K_{0,k} = \sqrt{d_k^2 - (a \sin \theta_k - a \sin \phi)^2}$; $K_{0,0} = 0$; $\cos \theta_0 = \cos \phi$

$$\begin{aligned}
 x_k &= \sum_{\ell=1}^{k-1} (\Sigma_P \bar{d}_{P\ell} + \Sigma_C \bar{d}_{C\ell}) \\
 &= \sum_{\ell=1}^{k-1} \left[\Sigma_P \cdot 2a \cos \theta_k + \Sigma_C \{ K_{0,\ell} - K_{0,\ell-1} - (a \cos \theta_k + a \cos \theta_{\ell-1}) \} \right]
 \end{aligned}$$

$$x_1 = 0$$

$$\delta_k = \Sigma_C \bar{d}_{Ck}$$

und $\varepsilon_0 = 2 \Sigma_P a \cos \phi$

bedeutet. Die Winkel θ_k berechnen sich aus der Bezeichnung (Fig. III.5.1a)

$$\sin(\varphi - \theta_k) = \frac{a}{\bar{d}_k} (\sin \theta_k - \sin \phi)$$

Wird nun noch berücksichtigt, daß in einem hexagonalen Gitter aus Symmetriegründen die Integration über den Winkel φ nur von 0 bis $\pi/6$ und die über den Winkel ψ nur von 0 bis $\pi/2$ ausgeführt werden muß und wenn weiter die im vorhergehenden Abschnitt besprochenen Bickleyfunktionen eingeführt werden, dann ergibt sich schließlich aus Gleichung (3.5.9) für das mittlere Quadrat der freien Weglänge von der Zone 1 der Referenzzelle aus gesehen:

$$\begin{aligned} \sum_K R_{1 \rightarrow K,0}^2 &= \frac{6}{\sum_p \pi^2 a} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos\phi \left\{ \frac{4a \cos\phi}{\sum_p} K_{i_2}(0) + \right. \\ & 2x_1 \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[f_{\ell,1} K_{i_2}(x_\ell) - f_{\ell,2} K_{i_2}(x_\ell + \epsilon_0) - f_{\ell,3} K_{i_2}(x_\ell + \delta_\ell) + f_{\ell,4} K_{i_2}(x_\ell + \delta_\ell + \epsilon_0) \right] \\ & \left. + 2 \left(x_1 + \frac{x_1}{2 \sum_p} \right) \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[K_{i_3}(x_\ell) - K_{i_3}(x_\ell + \epsilon_0) - K_{i_3}(x_\ell + \delta_\ell) + K_{i_3}(x_\ell + \delta_\ell + \epsilon_0) \right] \right\} \quad (3.5.10) \end{aligned}$$

mit:

$$\begin{aligned} f_{\ell,1} &= K_{0,\ell} - a(\cos\phi - \cos\theta_\ell) & f_{\ell,3} &= K_{0,\ell} - a(\cos\phi + \cos\theta_\ell) \\ f_{\ell,2} &= K_{0,\ell} + a(\cos\phi + \cos\theta_\ell) & f_{\ell,4} &= K_{0,\ell} + a(\cos\phi - \cos\theta_\ell) \end{aligned}$$

Diese Gleichung kann nicht mehr weiter analytisch behandelt werden, sondern muß numerisch ausgewertet werden. Für die Komponente in r -Richtung erhält man dann mit Gleichung (3.2.1)

$$\begin{aligned} \int_K R_{1 \rightarrow K, r}^2 &= \frac{3}{2} \cdot \frac{6}{\pi^2 \Sigma_p} a \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos \phi \left\{ \frac{4a \cos \phi}{\Sigma_p} Ki_4(0) \right. \\ &+ 2x_1 \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[f_{\ell-1,1} Ki_4(x_\ell) - f_{\ell-1,2} Ki_4(x_\ell + \varepsilon_0) - f_{\ell,3} Ki_4(x_\ell + \delta_\ell) + f_{\ell,4} Ki_4(x_\ell + \varepsilon_0 + \delta_\ell) \right] \\ &\left. + 2\left(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_p}\right) \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[Ki_5(x_\ell) - Ki_5(x_\ell + \varepsilon_0) - Ki_5(x_\ell + \delta_\ell) + Ki_5(x_\ell + \varepsilon_0 + \delta_\ell) \right] \right\} \quad (3.5.11) \end{aligned}$$

mit denselben Abkürzungen wie sie in Gleichung (3.5.10) verwendet wurden.

Die z-Komponente kann schließlich nach Gleichung (3.2.2) berechnet werden:

$$\int_K R_{1 \rightarrow K, z}^2 = 3 \int_K R_{1 \rightarrow K, 0}^2 - 2 \int_K R_{1 \rightarrow K, r}^2 \quad (3.5.12)$$

Für die mittlere freie Weglänge ergeben sich aus denselben Überlegungen, wie sie bei der Ableitung der Gleichung für das mittlere Quadrat der freien Weglänge

angestellt wurden, die Gleichungen:

$$\int_k R_{1 \rightarrow k, 0} = \frac{6}{\pi^2 \Sigma_p a} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos \phi \left\{ 2a \cos \phi \operatorname{Ki}_2(0) \right. \\ \left. + \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[\operatorname{Ki}_3(x_\ell) - \operatorname{Ki}_3(x_\ell + \varepsilon_0) - \operatorname{Ki}_3(x_\ell + \delta_\ell) + \operatorname{Ki}_3(x_\ell + \varepsilon_0 + \delta_\ell) \right] \right\} \quad (3.5.13)$$

Die τ -Komponente erhält man analog zu Gleichung (3.5.11) durch Multiplikation der rechten Seite von Gleichung (3.5.13) mit dem Faktor $3/2$, und indem man den Grad der vorkommenden Bickleyfunktionen um 2 erhöht. Die z-Komponente ergibt sich dann wiederum aus Gleichung (3.2.2).

Für den Spezialfall, daß die Dichte des Kühlmittels gegen 0 geht ($\Sigma_c \rightarrow 0$), erhält man durch einen Grenzübergang aus Gleichung (3.5.10) bzw. (3.5.13) - wie im Abschnitt III.7 beschrieben - oder aber durch direktes Ableiten aus den Definitionsgleichungen (3.5.1) und (3.5.2) die Beziehungen:

$$\int_k R_{1 \rightarrow k, 0}^2 = \frac{6}{\pi^2 \Sigma_p a} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos \phi \left\{ \frac{4a \cos \phi}{\Sigma_p} \operatorname{Ki}_2(0) \right. \\ \left. + \sum_{\ell=1}^{\infty} \bar{d}_{c\ell} \left[\frac{4}{\Sigma_p} \left\{ \operatorname{Ki}_2(x_\ell) - \operatorname{Ki}_2(x_\ell + \varepsilon_0) \right\} \right. \right. \\ \left. \left. + \left\{ (\ell_{\ell,3} + \ell_{\ell-1,1}) \operatorname{Ki}_1(x_\ell) - (\ell_{\ell,4} + \ell_{\ell-1,2}) \operatorname{Ki}_1(x_\ell + \varepsilon_0) \right\} \right] \right\} \quad (3.5.14)$$

$$\int_K R_{1 \rightarrow K_1, 0} = \frac{6}{\pi^2 \Sigma_p a} \int_0^{\pi/6} d\mathcal{P} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos\phi \left\{ 2a \cos\phi \operatorname{Ki}_2(0) + \sum_{l=1}^{\infty} \bar{d}_{cl} \left[\operatorname{Ki}_2(x_l) - \operatorname{Ki}_2(x_l + \varepsilon_0) \right] \right\} \quad (3.5.15)$$

wobei \bar{d}_{cl} - wie in Figur III.1a angedeutet - die Projektion des Abschnitts der Neutronenflugbahn zwischen den Stäben $l-1$ und l auf die Horizontalebene darstellt. Der Ausdruck für die γ -Komponente ergibt sich wiederum auf die schon mehrfach beschriebene Weise.

Bei der numerischen Auswertung der Gleichungen (3.5.10) - (3.5.15) wird ein Verfahren benötigt, das bei vorgegebener Neutronenflugbahn, d.h. bei vorgegebenen Winkeln ϕ und \mathcal{P} aus der Gesamtzahl aller Brennstäbe diejenigen auswählt, die von der Neutronenflugbahn getroffen werden. Dies geschieht in einfacher Weise dadurch, daß nachgeprüft wird, ob die Länge des Lots vom Mittelpunkt des Stabes n auf die Projektion der Neutronenflugbahn kleiner ist als der Radius des Stabes n , also:

$$|d_n \sin(\gamma_n - \mathcal{P}) + a \sin\phi| < a \quad (3.5.16)$$

III.6 Berechnung der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone der Referenzzelle

Es ist:

$$\int_K R_{2 \rightarrow k, \chi}^2 = \int_K \frac{\Sigma_{tk}}{V_2} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_2} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R^2 \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.6.1)$$

$$\int_K R_{2 \rightarrow k, \chi} = \int_K \frac{\Sigma_{tk}}{V_2} \int_{V_k} d\vec{r} \int_{V_2} d\vec{r}' [3\Omega_x^2] R \frac{e^{-\Sigma_t R}}{4\pi R^2} \quad (3.6.2)$$

In Figur III.6.1 sind in analoger Weise wie in Abbildung III.5.1 die Verhältnisse skizziert:

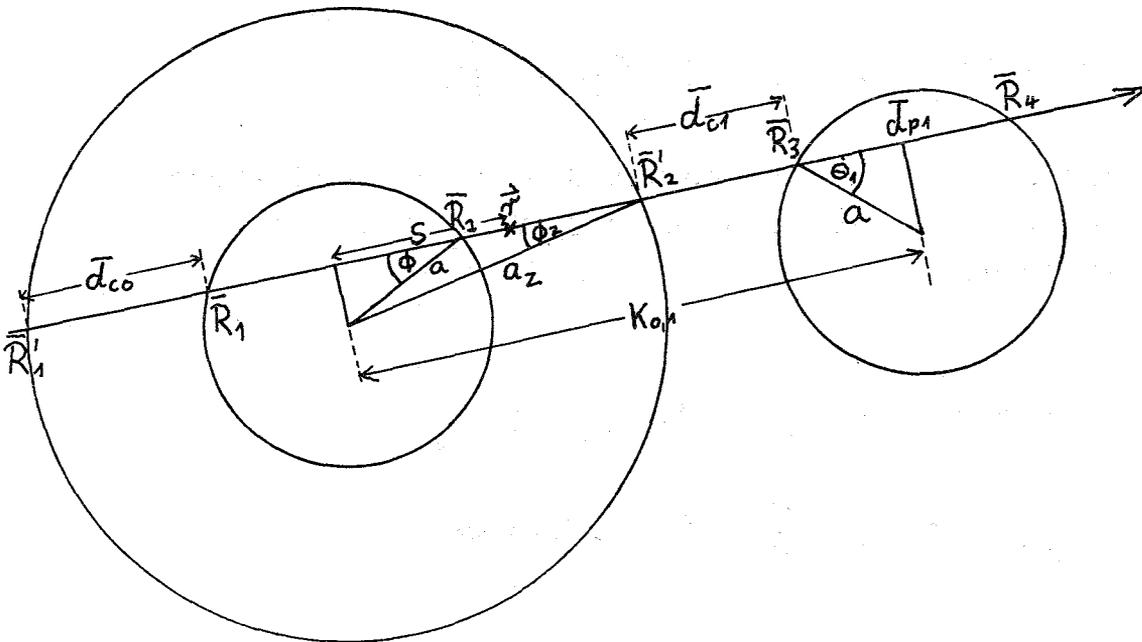


Fig. III.6.1

Auch die Berechnung von $\int_K R_{2 \rightarrow K, x}^2$ und $\int_K R_{2 \rightarrow K, x}$ geschieht prinzipiell auf dieselbe Weise wie in Abschnitt III.5 beschrieben. Die Verhältnisse sind hier nur insofern etwas komplizierter, als für den Fall, daß die Neutronenflugbahn - wie in Figur III.6.1 skizziert - durch den Brennstab der Referenzzelle (Zone 1) verläuft, Beiträge zu Punkten vor und hinter dem Brennstab gesondert gezählt werden müssen. Dadurch ergibt sich die doppelte Anzahl von Summanden unter dem Integral.

Außerdem werden als neue Variable nicht s und ϕ , sondern s und ϕ_z (siehe Fig. III.6.1) eingeführt. Die Funktionaldeterminante der Transformation ist dann:

$$|\text{DET}| = a_z \cos \phi_z$$

und die neuen Variablen variieren zwischen den Grenzen,

$$-\frac{\pi}{2} \leq \phi_z \leq \frac{\pi}{2}$$

$$-a_z \cos \phi_z \leq s \leq a_z \cos \phi_z$$

wenn der zentrale Brennstab von der Neutronenflugbahn nicht getroffen wird, d.h. wenn $a_z \cos \phi_z > a$ ist bzw. zwischen

$$a \cos \phi \leq s \leq a_z \cos \phi_z$$

$$-a_z \cos \phi_z \leq s \leq -a \cos \phi$$

wenn $a_z \cos \phi_z \leq a$ ist.

Mit den Bezeichnungen der Figur III.6.1 ergibt sich für das mittlere Quadrat der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone (V_2) der Referenzzelle:

$$\begin{aligned} \sum_K R_{2 \rightarrow K_0}^2 &= \frac{6}{\pi \Sigma_c V_2} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi_z a_z \cos \phi_z \left\{ \frac{4 \bar{d}_{c0}}{\Sigma_c} K_{i_2}(0) \right. \\ &- 2x_1 \left[-\bar{d}_{c0} K_{i_2}(\delta_0) + g_{1,3} K_{i_2}(\delta_1) - g_{1,4} K_{i_2}(\delta_0 + \delta_1) - 2a \cos \phi \right. \\ &K_{i_2}(\epsilon_0) + (a_z \cos \phi_z + a \cos \phi) K_{i_2}(\epsilon_0 + \delta_0) + g_{1,7} K_{i_2}(\epsilon_0 + \delta_0 + \delta_1) \\ &- g_{1,8} K_{i_2}(\epsilon_0 + 2\delta_0 + \delta_1) \left. \right] - 2 \left(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_c} \right) \left(K_{i_3}(0) - K_{i_3}(\delta_0) \right. \\ &+ K_{i_3}(\delta_1) - K_{i_3}(\delta_0 + \delta_1) - K_{i_3}(\epsilon_0) + K_{i_3}(\epsilon_0 + \delta_0) + K_{i_3}(\epsilon_0 + \delta_0 + \delta_1) \\ &- K_{i_3}(\epsilon_0 + 2\delta_0 + \delta_1) \left. \right) + \sum_{\ell=2}^{\infty} \left[2x_1 \left(g_{\ell,1} K_{i_2}(X_\ell) - g_{\ell,2} K_{i_2}(X_\ell + \delta_0) \right. \right. \\ &- g_{\ell,3} K_{i_2}(X_\ell + \delta_\ell) + g_{\ell,4} K_{i_2}(X_\ell + \delta_\ell + \delta_0) + g_{\ell,5} K_{i_2}(Y_\ell) \\ &- g_{\ell,6} K_{i_2}(Y_\ell + \delta_0) - g_{\ell,7} K_{i_2}(Y_\ell + \delta_\ell) + g_{\ell,8} K_{i_2}(Y_\ell + \delta_\ell + \delta_0) \left. \right) + 2 \left(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_c} \right) \end{aligned}$$

$$\left(K_{i_3}(X_\ell) - K_{i_3}(X_\ell + \delta_0) - K_{i_3}(X_\ell + \delta_\ell) + K_{i_3}(X_\ell + \delta_\ell + \delta_0) \right. \\ \left. + K_{i_3}(Y_\ell) - K_{i_3}(Y_\ell + \delta_0) - K_{i_3}(Y_\ell + \delta_\ell) + K_{i_3}(Y_\ell + \delta_\ell + \delta_0) \right) \quad (3.6.3)$$

wobei
$$X_\ell = \sum_{K=1}^{\ell-1} \left[\sum_P \bar{d}_{PK} + \sum_C \bar{d}_{CK} \right]$$

$$\varepsilon_0 = 2 \sum_P a \cos \phi$$

$$\delta_0 = \sum_C \bar{d}_{C0}$$

$$\delta_\ell = \sum_C \bar{d}_{C\ell}$$

$$Y_\ell = X_\ell + \varepsilon_0 + \delta_0$$

ist und

$$g_{\ell,1} = K_{0,\ell-1} - (a_z \cos \phi_z - a \cos \theta_{\ell-1}) \quad g_{\ell,5} = K_{0,\ell-1} + (a \cos \phi + a \cos \theta_{\ell-1})$$

$$g_{\ell,2} = K_{0,\ell-1} - (a \cos \phi - a \cos \theta_{\ell-1}) \quad g_{\ell,6} = K_{0,\ell-1} + (a_z \cos \phi_z + a \cos \theta_{\ell-1})$$

$$g_{\ell,3} = K_{0,\ell} - (a_z \cos \phi_z + a \cos \theta_\ell) \quad g_{\ell,7} = K_{0,\ell} + (a \cos \phi - a \cos \theta_\ell)$$

$$g_{\ell,4} = K_{0,\ell} - (a \cos \phi + a \cos \theta_\ell) \quad g_{\ell,8} = K_{0,\ell} + (a_z \cos \phi_z - a \cos \theta_\ell)$$

bedeutet.

Auch hier ergibt sich die r -Komponente durch Multiplikation der rechten Seite mit $\frac{3}{2}$, und indem man den Grad der vorkommenden Bickleyfunktionen um 2 erhöht. Die z-Komponente kann dann nach Gleichung (3.2.2) berechnet werden.

Mit denselben Abkürzungen wie in Gleichung (3.6.3) erhält man für die mittlere freie Weglänge

$$\begin{aligned}
 \sum_K R_{2 \rightarrow K, 0} &= \frac{6}{\pi \Sigma_c V_2} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi_z a_z \cos \phi_z \left\{ 2 \bar{d}_{c0} K_{i_2}(0) \right. \\
 &- x_1 \left[K_{i_3}(0) - K_{i_3}(\delta_0) + K_{i_3}(\delta_1) - K_{i_3}(\delta_0 + \delta_1) - K_{i_3}(\varepsilon_0) \right. \\
 &\quad \left. \left. + K_{i_3}(\varepsilon_0 + \delta_0) + K_{i_3}(\varepsilon_0 + \delta_0 + \delta_1) - K_{i_3}(\varepsilon_0 + 2\delta_0 + \delta_1) \right] \right. \\
 &+ x_1 \sum_{\ell=2}^{\infty} \left[K_{i_3}(X_\ell) - K_{i_3}(X_\ell + \delta_0) - K_{i_3}(X_\ell + \delta_2) + K_{i_3}(X_\ell + \delta_1 + \delta_0) \right. \\
 &\quad \left. \left. + K_{i_3}(Y_\ell) - K_{i_3}(Y_\ell + \delta_0) - K_{i_3}(Y_\ell + \delta_2) + K_{i_3}(Y_\ell + \delta_1 + \delta_0) \right] \right\} \quad (3.6.4)
 \end{aligned}$$

Die v - und z -Komponenten lassen sich auf die schon mehrfach erwähnte Weise berechnen.

Für den Fall, daß die Neutronenflugbahn den Brennstab der Referenzzelle nicht berührt, vereinfachen sich die Gleichungen (3.6.3) und (3.6.4) insofern, als dann $a \cos \varphi$ und ε , gleich 0 sind und sich die Zahl der Summanden auf etwa die Hälfte reduziert. Außerdem sind die Terme

$$\frac{4 \bar{d}_{c0}}{\Sigma_c} K_{i_2}(0)$$

in Gleichung (3.6.3) bzw.

$$2 \bar{d}_{c0} K_{i_2}(0)$$

in Gleichung (3.6.4) durch die Terme

$$\frac{4a_2 \omega \phi_2}{\Sigma_c} K_{i_2}(0)$$

in Gleichung (3.6.3) bzw.

$$2a_2 \omega \phi_2 K_{i_2}(0)$$

in Gleichung (3.6.4) zu ersetzen.

Wie man beim Vergleich der Ausdrücke (3.6.3) und (3.6.4) mit den Gleichungen (3.5.10) und (3.5.13) erkennt, verdoppelt sich nahezu der Aufwand bei der numerischen Auswertung der Integranden von Gleichung (3.6.3) und (3.6.4) auf Grund der Tatsache, daß das Integrationsgebiet in der Referenzzelle nicht mehr einfach zusammenhängend ist.

III.7 Reihenentwicklung des Integranden in den Ausdrücken für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen

Die in den vorangegangenen Abschnitten angegebenen Gleichungen für die gerichteten mittleren freien Weglängen und die gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen eignen sich immer dann nicht besonders gut zur numerischen Auswertung, wenn der Integrand, der sich als Differenz mehrerer Terme darstellt, sehr klein wird. Dies ist meist der Fall bei der Berechnung der mittleren freien Weglängen und der mittleren Quadrate der freien Weglängen, wenn der Einfluß des Kühlmittels berücksichtigt wird, da in den praktisch vorkommenden Fällen der totale makroskopische Querschnitt des Kühlmittels sehr klein (ca. 10^{-3} cm^{-1}) ist, d.h. mindestens um den Faktor

$5 \cdot 10^{-2}$ kleiner als der totale makroskopische Querschnitt der Brennstoffzone. Außerdem kann dies der Fall sein, wenn z.B. ein Brennstab von der Neutronenflugbahn nur ganz am Rande getroffen wird. Um in diesen Fällen den Integranden in den Gleichungen für die Größen $\int_K R_{i \rightarrow k, x}$ und $\int_K R_{i \rightarrow k, x}^2$ berechnen zu können, müssen die Werte der Bickleyfunktionen sehr genau bekannt sein. Nun können zwar diese ohne große Schwierigkeiten bis zu einer beliebigen Genauigkeit berechnet werden, jedoch wird der Zeitaufwand für ihre Berechnung mit kleiner werdender Genauigkeitschranke immer größer, und da zur Berechnung von $\int_K R_{i \rightarrow k, x}$ und $\int_K R_{i \rightarrow k, x}^2$ die Bickleyfunktionen für eine sehr große Zahl von Argumenten bestimmt werden müssen - siehe Gleichungen der vorhergehenden Abschnitte - wäre ein solches Vorgehen unwirtschaftlich. Deshalb soll hier ein anderer Weg eingeschlagen werden. Anders ausgedrückt kann nämlich gesagt werden, daß die oben erwähnten numerischen Schwierigkeiten immer dann auftreten, wenn die Argumente x_i der Bickleyfunktionen in den Ausdrücken für $\int_K R_{i \rightarrow k, x}$ und $\int_K R_{i \rightarrow k, x}^2$ sehr nahe beieinander liegen und x_2 bzw. x_1 groß wird (kleines Σ_c).

In solchen Fällen, in denen also Differenzen von $K_{i_n}(x)$ und $K_{i_n}(x+\epsilon)$ mit kleinem ϵ zu bilden sind, ist es naheliegend, eine Reihenentwicklung einzuführen. Wie im Abschnitt III.4 gezeigt wurde, gilt für Bickleyfunktionen vom Grad n :

$$\frac{d}{dx} K_{i_n}(x) = -K_{i_{n-1}}(x)$$

und

$$\frac{d^n}{dx^n} K_{i_n}(x) = (-1)^n K_0(x)$$

wobei K_0 die modifizierte Besselfunktion 2. Art und 0-ter Ordnung bedeutet. Für $x \neq 0$ (wegen der logarithmischen Singularität der Besselfunktionen 2. Art in $x = 0$ ist dieser Punkt ausgeschlossen) existieren daher beliebig viele endliche Ableitungen von $Ki_n(x)$, und da die Besselfunktionen analytische Funktionen sind, kann $Ki_n(x+\epsilon)$ in eine Taylorreihe um den Punkt $x \neq 0$ entwickelt werden. Führt man diese Reihenentwicklung durch und setzt das Ergebnis in die Ausdrücke für die Terme $\sum_K R_{i \rightarrow k, x}$ und $\sum_K R^2_{i \rightarrow k, x}$ ein, so ergeben sich mit einigen Umformungen die folgenden Ausdrücke:

1. Im Falle der mittleren freien Weglängen und der mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Brennstoffzone, gilt nach Gleichung (3.5.10) und (3.5.13) mit den dort eingeführten Abkürzungen:

$$\sum_K R^2_{1 \rightarrow k, 0} = \frac{6}{\pi \Sigma_p a} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos\phi \left[\frac{4a \cos\phi}{\Sigma_p} Ki_2(0) + \sum_{l=1}^{\infty} \{I_l^2\} \right]$$

bzw.

$$\sum_K R_{1 \rightarrow k, 0} = \frac{6}{\pi \Sigma_p a} \int_0^{\pi/6} d\varphi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos\phi \left[2a \cos\phi Ki_2(0) + \sum_{l=1}^{\infty} \{I_l\} \right]$$

a.) Entwickelt man für den Fall, daß der totale makroskopische Querschnitt der Kühlmittelzone (Σ_c) klein ist, I_1^2 bzw. I_1 nach $\delta_\ell = \Sigma_c \bar{d}_{c\ell}$ so ergibt sich:

$$\{I_l^2\} = \frac{4x_1 \delta_\ell}{\Sigma_p} \left[Ki_2(x_\ell) - Ki_2(x_\ell + \epsilon_0) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta_\ell^n}{n!} \left[\frac{2(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_p}) \delta_\ell}{n+1} \right]$$

$$\left\{ K_{i_2}^{(n)}(x_e) - K_{i_2}^{(n)}(x_e + \varepsilon_0) \right\} - 2x_1 \left\{ f_{e3} K_{i_2}^{(n)}(x_e) - f_{e4} K_{i_2}^{(n)}(x_e + \varepsilon_0) \right\} \quad (3.7.1)$$

$$\{I_e\} = x_1 \delta_e \left[K_{i_2}(x_e) - K_{i_2}(x_e + \varepsilon_0) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_1 \delta_e^{n+1}}{(n+1)!} \cdot \left[K_{i_2}^{(n)}(x_e) - K_{i_2}^{(n)}(x_e + \varepsilon_0) \right] \quad (3.7.2)$$

($K_{i_2}^{(n)}(x)$ bedeutet dabei die n-te Ableitung von $K_{i_2}(x)$)

Strebt in diesen Gleichungen $\bar{\Sigma}_c$ und damit auch δ_e gegen 0, so erhält man erwartungsgemäß die Gleichungen (3.5.14) und (3.5.15). Erhöht man den Grad der vorkommenden Bickleyfunktionen um 2, so ergeben sich die entsprechenden Ausdrücke für die r-Komponenten der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge.

b.) Wird ein Brennstab von der Neutronenflugbahn nur ganz am Rande getroffen (ε_0 klein) und entwickelt man deshalb I_1^2 bzw. I_1 nach ε_0 , so ergeben sich formal dieselben Gleichungen (3.7.1) und (3.7.2), nur daß δ_e durch ε_0 und in den Argumenten der Bickleyfunktionen ε_0 durch δ_e zu ersetzen ist. Zusätzlich ist bei I_1^2 auch noch der Faktor $\frac{4x_1 \delta_e}{\Sigma_p}$ im 1. Term der rechten Seite durch den Faktor $2x_1 \varepsilon_0$ zu ersetzen. Für den Fall, daß kein Kühlmittel betrachtet wird ($\bar{\Sigma}_c = 0$), ergibt sich außerdem für die Gleichungen (3.5.14) und (3.5.15):

$$\left\{ I_e^2 \right\}_{\bar{\Sigma}_c=0} = \bar{d}_{ce} \left[\frac{2 \varepsilon_0}{\Sigma_p} K_{i_1}(x_e) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0^n}{n!} K_{i_1}^{(n)}(x_e) \cdot \left\{ \frac{4 \varepsilon_0}{\Sigma_p (n+1)} - (f_{e4} + f_{e-1,2}) \right\} \right] \quad (3.7.3)$$

$$\left\{ I_e \right\}_{\Sigma_c=0} = \bar{d}_{ce} \left[\varepsilon_0 K_{i_1}(X_e) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0^{n+1}}{(n+1)!} K_{i_1}^{(n)}(X_e) \right] \quad (3.7.4)$$

c.) Entwickelt man I_1^2 bzw. I_1 nach δ_e und ε_0 , so ergibt sich:

$$\left\{ I_e^2 \right\} = \frac{2x_1}{\Sigma_p} \varepsilon_0 \delta_e K_{i_1}(X_e) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_{i_1}^{(n)}(X_e)}{(n+1)!} \left[\frac{2(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_p})}{(n+2)} \right. \\ \left. \left\{ (\varepsilon_0 + \delta_e)^{n+2} - \varepsilon_0^{n+2} - \delta_e^{n+2} \right\} - 2x_1 \left\{ f_{e,4}(\varepsilon_0 + \delta_e)^{n+1} - f_{e,2} \varepsilon_0^{n+1} - f_{e,3} \delta_e^{n+1} \right\} \right] \quad (3.7.5)$$

$$\left\{ I_e \right\} = x_1 \varepsilon_0 \delta_e K_{i_1}(X_e) + x_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_{i_1}^{(n)}(X_e)}{(n+2)!} \cdot \\ \left[(\varepsilon_0 + \delta_e)^{n+2} - \varepsilon_0^{n+2} - \delta_e^{n+2} \right] \quad (3.7.6)$$

Auch in den Fällen b.) und c.) ergeben sich die Ausdrücke für die r-Komponenten auf die schon mehrfach beschriebene Weise.

2. Im Falle der mittleren freien Weglängen und mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Kühlmittelzone, ergibt sich bei den Gleichungen (3.6.3) und (3.6.4) für den Ausdruck unter dem Summenzeichen:

a.) Die Neutronenflugbahn trifft den Brennstab in der Referenzzelle (Entwicklung nach δ_0 und δ_e)

$$\left\{ I_e^2 \right\} = \frac{2x_1 \delta_e \delta_0}{\Sigma_p} \left[K_{i_1}(X_e) + K_{i_1}(Y_e) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!} \left\{ \frac{2(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_p})}{(n+2)} \right.$$

$$\left[(\delta_0 + \delta_e)^{n+2} - \delta_e^{n+2} - \delta_0^{n+2} \right] \left[K_{i_1}^{(n)}(x_e) + K_{i_1}^{(n)}(y_e) \right] - 2x_1 \left[K_{i_1}^{(n)}(x_e) \left(g_{e_4} (\delta_0 + \delta_e)^{n+1} - g_{e_3} \delta_e^{n+1} - g_{e_2} \delta_0^{n+1} \right) + K_{i_1}^{(n)}(y_e) \left(g_{e_8} (\delta_0 + \delta_e)^{n+1} - g_{e_7} \delta_e^{n+1} - g_{e_6} \delta_0^{n+1} \right) \right] \quad (3.7.7)$$

$$\{I_e\} = x_1 \delta_e \delta_0 \left[K_{i_1}(x_e) + K_{i_1}(y_e) \right] + x_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n+2)!}$$

$$\left[K_{i_1}^{(n)}(x_e) + K_{i_1}^{(n)}(y_e) \right] \left[(\delta_0 + \delta_e)^{n+2} - \delta_e^{n+2} - \delta_0^{n+2} \right] \quad (3.7.8)$$

b.) Die Neutronenflugbahn trifft den Brennstab in der Referenzzelle nicht

$$\{I_e^{(2)}\} = \frac{2x_1 \delta_e 2\delta_0}{\Sigma_p} K_{i_1}(x_e) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_{i_1}^{(n)}(x_e)}{(n+1)!} \left\{ \frac{2(x_2 + \frac{x_1}{\Sigma_p})}{(n+2)} \left[(2\delta_0 + \delta_e)^{n+2} - \delta_e^{n+2} - (2\delta_0)^{n+2} \right] - 2x_1 \left[g_{e_8} (2\delta_0 + \delta_e)^{n+1} - g_{e_7} \delta_e^{n+1} - g_{e_6} (2\delta_0)^{n+1} \right] \right\} \quad (3.7.9)$$

$$\{I_e\} = x_1 \delta_e \cdot 2\delta_0 K_{i_1}(x_e) + x_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_{i_1}^{(n)}(x_e)}{(n+2)!} \left[(2\delta_0 + \delta_e)^{n+2} - \delta_e^{n+2} - 2\delta_0^{n+2} \right] \quad (3.7.10)$$

Da $y_1 = x_1 + \epsilon_0 + \delta_e$ ist, könnte man daran denken, ähnlich wie in 1b.), noch nach ϵ_0 zu entwickeln. In Gleichung (2.9.4) für die richtungsabhängige Diffusionskonstante gehen jedoch die mittleren freien Weglängen bzw. die

mittleren Quadrate der freien Weglängen nur als gewichtete Größen ein. Die Wichtung erfolgt mit dem Volumenanteil der Zellzonen und dem totalen Stoßquerschnitt bzw. dem 1. Moment des elastischen Streuquerschnitts in der betreffenden Zone. Nun sind im Falle gasgekühlter schneller Brutreaktoren die Volumenanteile von Kühlmittel- und Brennstoffzone von derselben Größenordnung, während der totale Stoßquerschnitt und das 1. Moment des elastischen Streuquerschnitts in der Kühlmittelzone um Faktoren zwischen $5 \cdot 10^{-2}$ - 10^{-3} kleiner sind als die entsprechenden Querschnitte der Brennstoffzone. Deshalb braucht die Genauigkeit,

mit der die Größen $\sum_K R_{2 \rightarrow K, \chi}^2$ und $\sum_K R_{2 \rightarrow K, \chi}$ berechnet werden, nicht so groß zu sein wie die der Größen

$\sum_K R_{1 \rightarrow K, \chi}^2$ und $\sum_K R_{1 \rightarrow K, \chi}$. Daher wurde auf eine Reihenentwicklung nach ϵ_0 bei der Berechnung der mittleren freien Weglängen bzw. der mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Kühlmittelzone, verzichtet. Dies bedeutet nur, daß Beiträge aus Stäben, die von der Neutronenflugbahn nur gestreift werden und die an sich sehr klein sind, nicht mit derselben Genauigkeit berechnet werden wie im Falle der mittleren freien Weglängen und ihrer Quadrate, bezogen auf die Brennstoffzone. Untersuchungen haben ergeben, daß die daraus resultierende Ungenauigkeit in $\sum_K R_{2 \rightarrow K, \chi}^2$ und $\sum_K R_{2 \rightarrow K, \chi}$ weniger

als 2 % ausmacht.

III.8 Das Programm SRIJ

Das Programm SRIJ berechnet für ein hexagonal angeordnetes Brennstabgitter die richtungsabhängige Diffusionskonstante sowie die dazu benötigten gerichteten mittleren freien Weglängen bzw. gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen nach den in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Gleichungen. Es können maximal 2 000 Zellen in einem Winkelsegment von 30° - aus Symmetriegründen genügt dieser Winkelbereich - betrachtet werden. Das bedeutet, daß für eine beliebige Neutronenflugbahn die Beiträge aus mindestens 50 Zellen berücksichtigt werden können.

Weiter bedeutet dies, daß bei den kleinsten in der Praxis vorkommenden homogenisierten totalen Querschnitten von ca. 10^{-1}cm^{-1} die Distanz zwischen der Referenzzelle und dem Rand des Gebiets etwa 8 freie Weglängen beträgt. Dadurch ist für die vorkommenden gasgekühlten schnellen Brutreaktoren im gesamten Energiebereich eine ausreichende Genauigkeit bei der Berechnung des Wertes der Diffusionskonstanten gewährleistet (Genauigkeitsfragen werden ausführlich im nächsten Abschnitt erörtert).

Die zur Berechnung des Integranden in den Ausdrücken für die mittlere freie Weglänge und das mittlere Quadrat derselben benötigten Bickleyfunktionen werden auf sehr verschiedenartige Weise gewonnen. Da die Funktionswerte der Bickleyfunktionen sehr häufig, für einen gewöhnlichen Fall mehrere hunderttausendmal, bestimmt werden müssen, ist es von entscheidender Bedeutung, die Funktionswerte sehr schnell zu berechnen. Da die Genauigkeit des Funktionswerts der Bickley-

funktion mit der Rechenzeit direkt zusammenhängt, bedeutet dies mit andern Worten, daß im Einzelfall die benötigte Genauigkeit vor der Berechnung des Funktionswerts ermittelt werden muß, um danach die Berechnungsmethode zu bestimmen.

Für den Fall, daß die in Abschnitt III.5/6 angegebenen Gleichungen für die mittlere freie Weglänge bzw. deren mittleres Quadrat verwendet werden und die totalen makroskopischen Querschnitte größer als 10^{-1}cm^{-1} sind, oder aber, daß die Bickleyfunktionen für die Reihenentwicklungen benötigt werden (Abschnitt III.7), geschieht deren Berechnung auf folgende Weise:

1. Im Argumentbereich

$$0 \leq x \leq 1$$

werden die in Abschnitt III.4 angegebenen Reihenentwicklungen mit einer festen Anzahl von Gliedern (12) verwendet. Der relative Fehler ist dabei kleiner als 10^{-8} .

2. Im Argumentbereich

$$1 < x \leq 3,4$$

werden die Bickleyfunktionen durch Tschebyschew-Polynome vom Grade 17 approximiert [26]. Der relative Fehler beträgt in diesem Bereich ca. 10^{-6} .

3. Für Argumente

$$x > 3,4$$

wird die asymptotische Entwicklung (Gl. 3.4.8) verwendet, wobei die Reihen $Z_{1n}(x)$ zwölf Koeffizienten enthalten. Die Koeffizienten wurden einem Programm von

Amyot und Benoist [25] entnommen. Mit wachsenden Argumenten steigt der relative Fehler von 10^{-6} auf ca. 10^{-4} bei $x = 10$.

Die geringer werdende Genauigkeit mit wachsendem x trägt der Tatsache Rechnung, daß Beiträge zu einem Aufpunkt aus entfernteren Gebieten kleiner sind und deshalb mit geringerer Genauigkeit berechnet werden können.

Mit den Methoden 1 - 3 werden die Funktionswerte der Bickleyfunktionen vom Grade 1 - 3 berechnet. Für die Bickleyfunktionen höheren Grades wird die Rekursionsformel (3.4.12) angewandt. Auf diese Weise wird unter den oben angegebenen Einschränkungen für Σ_+ der Integrand in den Ausdrücken für die mittlere freie Weglänge und deren Quadrat mit einem relativen Fehler von ca. $5 \cdot 10^{-4}$ berechnet. Dies haben Vergleichsrechnungen gezeigt, wobei die Funktionswerte der Bickleyfunktionen aus der in Abschnitt III.4 angegebenen integralen Form mit vorgegebener Genauigkeitsschranke bestimmt wurden. Diese Methode der Berechnung aus der integralen Form wird im Programm SRIJ wegen des zu großen Rechenaufwands jedoch nicht verwendet.

Die in der Praxis vorkommenden Kühlmitteldichten sind so gering, daß der totale makroskopische Querschnitt in der Kühlmittelzone von der Größenordnung 10^{-3} cm^{-1} ist. Berücksichtigt man daher bei der Berechnung der mittleren freien Weglängen und ihrer Quadrate das Kühlmittel, dann wird praktisch immer eine Reihenentwicklung des Integranden verwendet (Abschnitt III.7). Da die Reihenentwicklung wegen der logarithmischen

Singularität der Besselfunktionen 2. Art an der Stelle $x = 0$ nicht vorgenommen werden kann, werden in diesem Bereich die Bickleyfunktionen vom Grade 1 - 3 ebenfalls mit Hilfe der Reihendarstellung (Gl. 3.4.4) berechnet, jedoch ist die Zahl der Terme nicht beschränkt. Es werden so viele Glieder der Reihe berücksichtigt, daß eine relative Genauigkeit von 10^{-16} erreicht wird. Auf diese Weise ist es möglich, den Integranden in den Ausdrücken für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate noch bis zu totalen makroskopischen Querschnitten in der Kühlmittelzone von $5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ mit einer relativen Genauigkeit von $5 \cdot 10^{-4}$ zu berechnen. Dies bedeutet, daß der Integrand praktisch als fehlerfrei angesehen werden kann.

Nach Versuchen mit verschiedenen Integrationsverfahren (Gaußsches Integrationsverfahren, Simpsonregel) wurde die Simpsonregel zur Integration über die Winkel \varnothing und φ in den Ausdrücken für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen gewählt, da dieses Verfahren bei Änderungen der Stützstellenzahl sehr flexibel ist, so daß damit leicht Genauigkeitsuntersuchungen durchgeführt werden können (siehe nächster Abschnitt). Die Integration über den Winkel \varnothing im Bereich von $-\frac{\pi}{2}$ bis $+\frac{\pi}{2}$ erfolgte im Normalfall mit 41 Stützstellen. Die Integration über φ im Bereich von 0 bis $\frac{\pi}{6}$ erfolgte mit 23 Stützstellen, wobei im Bereich von 0 bis $\frac{\pi}{60}$ die Zahl der Intervalle 4 und im Restbereich 18 betrug (Begründung für diese Einteilung siehe nächster Abschnitt).

Zur Auswertung der Gleichung (2.9.4) für die richtungsabhängige Diffusionskonstante werden einmal die totalen makroskopischen Querschnitte und die ersten Momente

der elastischen Streuquerschnitte in den einzelnen Zellzonen sowie die Ableitung der makroskopischen Komponenten der Stromdichte benötigt. Diese Größen werden im Rahmen des KARKOS-Systems [31] bestimmt. Die Stromdichte bzw. ihre Ortsableitung wird mit Hilfe einer eindimensionalen Diffusionsrechnung für den zu untersuchenden (homogenisierten) Reaktor berechnet. Das heißt, daß Unterschiede der Ableitung der Stromdichte nach den verschiedenen Raumrichtungen (radial und axial) nicht berücksichtigt werden. Da die axiale Komponente der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten hier von besonderem Interesse ist, wird die Ableitung der Stromdichte in axialer Richtung - in der Mitte der entsprechenden Zone - im Programm SRIJ verwendet.

Der Kernspeicherplatzbedarf des Programms SRIJ beträgt 300 K Bytes. Die Rechenzeiten hängen stark vom Einzelfall ab. Mit der Rechenmaschine 360/85 von IBM werden für die Berechnung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten im Normalfall ca. 8 Minuten benötigt, wenn die Querschnitte in Form von 26-Gruppenkonstanten vorliegen und der Kühlmiteleinfluß vernachlässigt wird. Berücksichtigt man auch noch das Kühlmittel, so steigt die Rechenzeit auf ca. 35 Minuten an.

III.9 Diskussion der verwendeten Näherungen und der numerischen Ungenauigkeiten

Die Ungenauigkeiten, die bei der Berechnung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten auftreten, sollen in diesem Abschnitt zusammengestellt und, soweit dies nötig ist, genauer betrachtet werden. Sie lassen sich in zwei Gruppen einteilen:

1. In der ersten Gruppe werden die Annahmen und Näherungen zusammengefaßt, die bei der Ableitung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten getroffen wurden.
2. Die zweite Gruppe enthält Fehler, die auf Grund der numerischen Ungenauigkeiten entstehen.

Zu 1: Die erste bei der Ableitung des Ausdrucks für eine richtungsabhängige Diffusionskonstante gemachte Näherung erfolgte in Abschnitt II.4. Die Annahme, daß die Fluß- und Stromdichte in einem aus identischen Zellen aufgebauten Gitter als Produkt eines im Ort langsam veränderlichen und eines schnell veränderlichen, periodischen Terms dargestellt werden können, ist weit verbreitet. R.A. Bonalumi [29] vertritt jedoch die Auffassung, daß sie zumindest in thermischen Reaktoren - und da speziell in Zellgittern von Leichtwasserreaktoren - schlecht realisiert ist. Die Frage nach der Gültigkeit dieser Näherung berührt die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit jedoch nicht direkt, da einmal hauptsächlich die axiale Komponente der Diffusionskonstanten \bar{D}_z interessiert, und zum andern wurde in Abschnitt II.8 gezeigt, daß bei der Berechnung der radialen Komponente \bar{D}_r der Mikrofluß in schnellen gasgekühlten Reaktoren in den Gruppen 4 - 14 in sehr guter Näherung vernachlässigt werden kann. Diese Gruppen sind für Leckageeffekte entscheidend. Das erkennt man an Hand der Abbildung II, in der für das Reaktorkonzept des KFZ, das für gasgekühlte schnelle Reaktoren als typisch angesehen werden kann, die Leckagewahrscheinlichkeiten in den einzelnen Lethargiegruppen aufgetragen sind. Die zweite Annahme, die bei der Ableitung des Ausdrucks für eine richtungsabhängige Diffusionskonstante gemacht wurde, ist die, daß die Entwicklung der Fluß- bzw. Stromdichte (langsam veränderlicher Term) in eine Taylorreihe nach dem 3. bzw. 2. Glied abgebrochen werden darf. Diese Annahme hängt direkt mit der Gültigkeit der Diffusions-

näherung in größeren, homogenen Gebieten zusammen und ist allgemein akzeptiert, so daß sie hier nicht weiter diskutiert wird. Eine dritte Vereinfachung wurde im III. Kapitel durch die Homogenisierung des Brennstabs vorgenommen. Da keine Rechnungen mit mehr als zwei Zonen in der Zelle durchgeführt wurden, läßt sich die Güte dieser Vereinfachung nicht quantitativ erfassen. Allerdings soll nochmals betont werden, daß die Abweichung des abgeleiteten Ausdrucks für die richtungsabhängige Diffusionskonstante von dem in homogenen Medien gültigen Ausdruck praktisch nur durch die extremen Unterschiede der freien Weglängen der Neutronen im Kühlmittel einerseits, und im Brennstoff bzw. Hüllmaterial andererseits, zustande kommen, so daß die Brennstabhomoenisierung eine gute Näherung darstellen sollte. Schließlich gehören noch zum Punkt 1 die Maßnahmen, die im Programm SRIJ bei der Berechnung der mittleren freien Weglängen und ihrer mittleren Quadrate im Bereich $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{60}$ getroffen wurden. Wie schon in Abschnitt III.8 ausgeführt, wurde der Teilbereich von 0 bis $\frac{\pi}{60}$ der Variablen φ feiner unterteilt als der Restbereich. Der Grund dafür ist folgender: In einem idealen, hexagonalen Gitter mit relativ großen Abständen der Brennstäbe bzw. kleinen Brennstabradien stellt im Integrationsbereich für φ von 0 bis $\frac{\pi}{6}$ die Richtung $\varphi = 0$ eine ausgezeichnete Richtung dar. Ein Teil der Neutronen, die von der Referenzzelle aus in Richtung $\varphi \approx 0$ fliegen, kann wegen der sehr großen freien Weglängen im Kühlmittel weite Flugstrecken ohne Stoß zurücklegen (siehe Fig. III.9.1). Insbesondere gilt dies für Neutronen aus der Kühlmittelzone der Zelle. Kleine Unterschiede in φ bewirken deshalb starke Schwankungen des Integranden, besonders in den Ausdrücken für die mittleren Quadrate der freien Weglängen. Deshalb muß die Zahl der Stützstellen relativ groß gewählt werden. Abgesehen von diesem rein numeri-

schen Gesichtspunkt kommt noch ein weiterer Punkt hinzu. Im konkreten Fall sollen richtungsabhängige Diffusionskonstanten für Reaktorzonen berechnet werden. Nimmt man einen kleinen Winkelbereich $0 \leq \varphi \leq \varepsilon_0$ aus, so kann eine Reaktorzone in guter Näherung als ein hexagonales Gitter angesehen werden, da der Einfluß von Strukturmaterialien, wie z.B. Subassemblykästen, auf die freien Weglängen gegenüber dem der Brennstäbe vernachlässigbar ist. Im Winkelbereich $0 \leq \varphi \leq \varepsilon_0$ gilt dies jedoch nicht, da die Strukturmaterialien die freien Weglängen der Neutronen stärker reduzieren als es das Kühlgas in einem idealen, hexagonalen Gitter vermag. Berechnet man einmal die mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Brennstoffzone für ein ideales, hexagonales Gitter (z.B. durch sehr feine Unterteilung des Intervalls $0 \leq \varphi \leq \varepsilon_0$), und zum andern für ein Gitter, in dem die Beiträge zu den Quadraten der mittleren freien Weglängen in diesem Bereich reduziert und gleich den Beiträgen aus dem übrigen Winkelbereich für φ gesetzt werden (z.B.

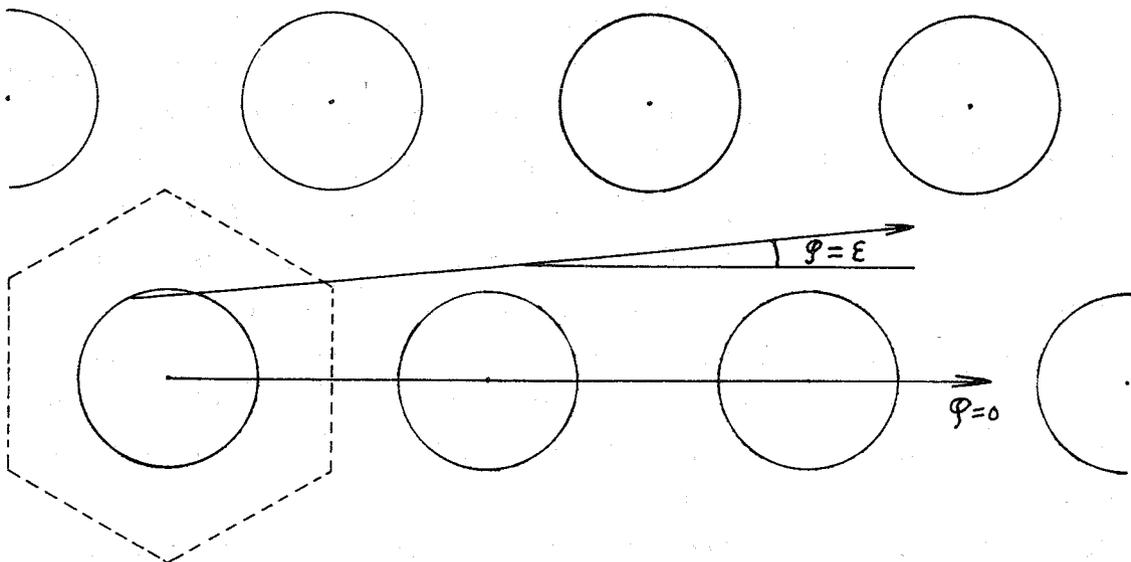


Fig. III.9.1

indem man in diesen Bereich bei der Integration keine Stützstelle legt), so ergibt sich beim Wert des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone (z-Komponente), ein Unterschied von ca. 1,2 %. Bei der z-Komponente der mittleren freien Weglänge beträgt der Unterschied nur ca. 0,2 %. Um nun die realen Verhältnisse in etwa zu berücksichtigen (Reduktion der mittleren Quadrate der freien Weglängen), wurden in den Bereich für φ von 0 bis $\frac{\pi}{60}$ 4 Stützstellen gelegt, was den Wert des mittleren Quadrats der freien Weglänge (z-Komponente) gegenüber dem für das ideale, hexagonale Gitter um 0,6 % erniedrigte. Diese Untersuchungen wurden mit den Gitterdaten des Reaktorentwurfs des KFZ durchgeführt. Sie bleiben jedoch auch für die Gitter der übrigen in dieser Arbeit betrachteten Reaktoren gültig, da die Unterschiede der Gitter nicht sehr groß sind. Für die mittleren freien Weglängen bzw. die mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Kühlmittelzone, kommt noch hinzu, daß ein Teil der Neutronen aus der Kühlmittelzone in Richtung $\varphi = 0$ parallel zu den Brennstäben weite Flugstrecken zurücklegen kann, ohne überhaupt einen Brennstab zu berühren. Der Beitrag solcher Neutronen zu den mittleren freien Weglängen bzw. zu den mittleren Quadraten der freien Weglängen wird aus den oben erwähnten Gründen ebenfalls begrenzt, und zwar dadurch, daß maximal 75 Zellen bei der Rechnung berücksichtigt werden. Diese Maßnahme hat wegen der Wichtung mit dem totalen makroskopischen Querschnitt der Kühlmittelzone nur einen sehr geringen Einfluß auf die Diffusionskonstante. Bei der Berechnung des Kühlmittelverlustkoeffizienten (Abschnitt IV.4) wirkt die letztere Maßnahme so, daß der Einfluß der heterogenen Zonenstruktur auf den Kühlmittelverlustkoeffizienten dadurch eher unterschätzt wird. Dasselbe gilt auch für

die Betrachtungen des Abschnitts IV.5.

Zu 2: Die numerischen Ungenauigkeiten treten bei der Berechnung der mittleren freien Weglängen und ihrer Quadrate auf. Wie in Abschnitt III.8 ausgeführt wurde, ist der relative Fehler des Integranden in den Ausdrücken für diese Größen $5 \cdot 10^{-4}$ oder kleiner, so daß der Integrand als fehlerlos betrachtet werden kann, und nur die Genauigkeit der beiden Integrationen über die Winkel \emptyset und φ untersucht werden muß. Weiter läßt sich mit Hilfe der Beziehung (3.4.9) eine obere Grenze für den Fehler der mittleren freien Weglängen direkt angeben, wenn man die Abweichungen der linken Seite von Gleichung (3.1.9) vom Wert 1 betrachtet. Die relative Abweichung betrug in allen betrachteten Fällen weniger als 0.3%. Der größte Teil dieser Abweichung wird dabei durch die besprochenen Maßnahmen im Winkelbereich $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{60}$ verursacht. Da für die mittleren Quadrate der freien Weglängen keine zu (3.1.9) analoge Beziehung besteht, soll für diese Größen der numerische Fehler genauer untersucht werden.

a.) Fehler bei der Integration über den Winkel \emptyset :

Variiert man die Zahl der Stützstellen im Bereich

$-\frac{\pi}{2} \leq \emptyset \leq \frac{\pi}{2}$, so ergibt sich beim Übergang von 41

auf 49 Stützstellen für das mittlere Quadrat der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone, noch eine Änderung von ca. 0,03 % und beim mittleren Quadrat der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone, eine solche von ca. 1,5 % (siehe Tab. III.9.1).

Der wesentlich größere Fehler im letzteren Fall rührt hauptsächlich davon her, daß das Integrationsgebiet eine komplizierte geometrische Form besitzt. Bei der Berechnung der Diffusionskonstanten nach Gleichung (2.9.4) fällt der Fehler von 1,5 % jedoch wegen der Wichtung mit dem

totalen makroskopischen Querschnitt der Kühlmittelzone nicht ins Gewicht.

b.) Fehler bei der Integration über den Winkel φ :
Der Integrand $f(\varphi)$ ist, abgesehen vom Bereich $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{60}$, eine nahezu konstante Funktion, und die numerische Integration macht keinerlei Schwierigkeiten. Die Stützstellenzahl ist so groß gewählt, daß die Genauigkeit der Integration über φ größer ist als die der Integration über den Winkel \emptyset . Dies bedeutet, daß die Genauigkeit der mittleren freien Weglängen und ihrer Quadrate praktisch durch den Fehler bei der Integration über \emptyset bestimmt wird.

Da der Kühlmittelverlustkoeffizient bei gasgekühlten schnellen Reaktoren sehr klein ist (ca. 3 %, siehe Abschnitt IV.4), muß sichergestellt werden, daß bei der Rechnung mit bzw. ohne Kühlmittel alle numerischen Ungenauigkeiten entweder sehr klein, oder gleichsinnig sind, so daß sie bei der Differenzbildung wegfallen. Daß dies bei der mittleren freien Weglänge der Fall ist, läßt sich wiederum mit Hilfe der Gleichung (3.1.9) demonstrieren. In Abbildung III wurde die Abweichung der linken Seite der Gleichung (3.1.9) vom Wert 1 für 26 Lethargiegruppen gezeichnet. Im Mittel ist die rechte Seite um ca. 2 % kleiner als der theoretische Wert 1. Weiter ist zu sehen, daß die Abweichungen in den Fällen mit und ohne Kühlmittel im Rahmen der Rechengenauigkeit identisch sind. Im Falle der mittleren Quadrate der freien Weglänge sind die Verhältnisse analog. Um dies zu beweisen, wurden für verschiedene Kühlmittelquerschnitte (Σ_c) die mittleren Quadrate berechnet, und zwar einmal mit 41, und zum andern mit 49 Stützstellen für die Integration über \emptyset . (Bei der Integration über φ , die wesentlich genauer ist, sind die Verhältnisse analog). Die Tabelle III.9.1 zeigt die

Σ_c [cm ⁻¹]	Mittleres Quadrat der freien Weglänge (z-Komponente), bezogen auf die Brenn- stoffzone [cm ²]			Mittleres Quadrat der freien Weglänge (z-Komponente), bezogen auf die Kühl- mittelzone [cm ²]		
	41 Stütz- stellen	49 Stütz- stellen	Δ	41 Stütz- stellen	49 Stütz- stellen	Δ
10 ⁻⁴	130.706	130.700	0.006	152.045	150.676	1.369
5 · 10 ⁻⁴	130.052	130.041	0.011	147.380	145.537	1.843
10 ⁻³	129.281	129.274	0.007	144.840	142.882	1.958
5 · 10 ⁻³	123.662	123.670	-0.008	134.820	133.166	1.654
10 ⁻²	117.406	117.421	-0.015	126.493	125.338	1.155

Tab. III.9.1: Genauigkeitsuntersuchungen für das mittlere Quadrat der freien Weglänge (z-Komponente)

totaler makroskopischer Querschnitt des Brennstabs $\Sigma_p = 0.3 \text{ cm}^{-1}$
 Zentrumsabstand der Brennstäbe $R = 1.08 \text{ cm}$
 Radius der Brennstäbe $a = 0.37 \text{ cm}$

Ergebnisse. Man erkennt, daß die Werte des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone, sich praktisch nicht ändern. Bei der entsprechenden Größe, bezogen auf die Kühlmittelzone, ist die Änderung weitgehend unabhängig vom Kühlmittelquerschnitt Σ_c . Dies gilt insbesondere für den Bereich,

$$5 \cdot 10^{-3} \leq \Sigma_c \leq 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$$

der für die Verhältnisse bei gasgekühlten schnellen Brütern von Interesse ist.

IV Ergebnisse

Die Eigenschaften der nach Gleichung (2.9.4) bestimmten richtungsabhängigen Diffusionskonstanten werden durch die gerichteten mittleren freien Weglängen und die gerichteten mittleren Quadrate der freien Weglängen bestimmt. In diesem Kapitel sollen daher die Eigenschaften dieser Terme eingehend untersucht werden. Anschließend werden dann noch die Diffusionskonstanten für einige praktische Fälle angegeben, und die Unterschiede diskutiert, die sich ergeben, wenn einige nukleare Größen gasgekühlter schneller Reaktoren, wie z.B. der effektive Multiplikationsfaktor K_{eff} , einmal mit Hilfe der gewöhnlichen, richtungsunabhängigen Diffusionskonstanten und zum anderen mit der nach Gleichung (2.9.4) berechneten richtungsabhängigen Diffusionskonstanten bestimmt werden.

IV.1 Hexagonales Brennstabgitter ohne Kühlmittel

Im einfachsten Fall besteht das hexagonale Gitter nur aus Brennstäben ohne Kühlmittel. In diesem Grenzfall reduziert sich die Gleichung (2.9.4) derart, daß nur die mittleren freien Weglängen bzw. deren mittlere Quadrate von der Brennstoffzone aus in die Gleichung eingehen.

Wenn Σ_p den totalen Querschnitt in der Brennstoffzone der Zelle bedeutet, dann entspricht diesem hexagonalen Gitter ein homogenisiertes Gebiet mit $\Sigma_{\text{hom}} = \omega \Sigma_p$, wobei ω das Volumenverhältnis von Brennstab zu Zelle bedeutet. Variiert man in einem homogenen Gebiet Σ_{hom} , so variieren - wie schon mehrfach erwähnt - die

Größen $\sum_K R_{i \rightarrow K, \chi}^2$ bzw. $\sum_K R_{i \rightarrow K, \chi}$ wie $\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}$ bzw. $\frac{1}{\Sigma_{hom}}$.

Da die Berücksichtigung der Heterogenität nur eine Korrektur bedeutet, werden auch im vorliegenden

heterogenen Fall die Terme $\sum_K R_{1 \rightarrow K, \chi}^2$ bzw. $\sum_K R_{1 \rightarrow K, \chi}$ (der Index 1 steht für die Brennstoffzone) in erster Näherung wie $\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}$ bzw. wie $\frac{1}{\Sigma_{hom}}$ variieren.

In Abbildung IV sind für ein vorgegebenes hexagonales

Gitter die Größen $\sum_K R_{1 \rightarrow K, 0}^2$, $R_{1 \rightarrow K, r}^2$ und

$\sum_K R_{1 \rightarrow K, z}^2$ in Abhängigkeit von Σ_p aufgetragen. Außerdem ist noch zusätzlich die Kurve $\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}$ eingezeichnet. Man erkennt, daß alle Kurven ungefähr denselben Verlauf zeigen. Die z-Komponente des Quadrats der mittleren freien Weglänge im Gitter weicht dabei am stärksten von der Kurve $\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}$ ab, während die r-Komponente dieser Kurve am nächsten kommt. Der Mittelwert

$\sum_K R_{1 \rightarrow K, 0}^2$ liegt zwischen der r- und der z-Komponenten.

Weiter erkennt man in Abbildung IV, daß die Kurven für die mittleren Quadrate der freien Weglänge im Gitter mit zunehmendem totalem makroskopischen Querschnitt zwar näher an $\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}$ heranlaufen, daß aber (Abbildung V) die relativen Abweichungen

$$f_{\chi}(\Sigma_p) = \frac{\sum_K R_{1 \rightarrow K, \chi}^2 - \frac{2}{\Sigma_{hom}^2}}{\frac{2}{\Sigma_{hom}^2}}$$

mit abnehmendem Σ_p kleiner werden. Dies entspricht den Erwartungen, da mit kleiner werdendem Σ_p sich die

nuklearen Unterschiede zwischen Brennstab und Vakuum verringern.

Die Abnahme der Kurven $f_x(\Sigma_p)$ erfolgt in einem weiten Bereich praktisch linear. Bei den kleinsten Werten von Σ_p , die wegen der Endlichkeit des Gitters noch zulässig sind, deutet sich jedoch eine Abweichung von der Linearität an, und zwar scheinen dann die Kurven schwächer als linear abzunehmen. Immerhin geht die lineare Extrapolation der Kurven (gestrichelte Linie) noch praktisch durch den O-Punkt. Dieses Verhalten ist in Abbildung VI noch deutlicher zu sehen. In dieser Abbildung sind die Kurven $f_x(\Sigma_p)$ für zwei weitere Gitteranordnungen aufgetragen. Gegenüber der Gitteranordnung von Abbildung V, bei der der Leervolumenanteil nur 34,2 % betrug, wurde er bei den in Abbildung VI betrachteten Gitteranordnungen auf 50,2 % (Kurve $f_x^{(1)}(\Sigma_p)$) bzw. auf 66,1 % (Kurve $f_x^{(2)}(\Sigma_p)$) erhöht. Besonders bei den Kurven $f_x^{(2)}(\Sigma_p)$ ist für kleine Σ_p -Werte eine etwas deutlichere Abweichung von der Linearität zu erkennen. Die Extrapolationsgeraden schneiden sich in Punkten, die mit zunehmendem Leervolumenanteil immer weiter vom O-Punkt abweichen. Es existiert jedoch in guter Näherung ein Schnittpunkt für die Extrapolationsgeraden der Kurven $f_x^{(1)}$, $f_x^{(2)}$ und $f_z^{(i)}$.

Für kleine Werte von Σ_p zeigen die Kurven $f_x^{(i)}(\Sigma_p)$ in Abbildung VI eine abrupte Änderung im Verlauf (gestrichelte Linien). Das deutlich erkennbare Absinken ist eine Folge der endlichen Anzahl der im Programm SRIJ enthaltenen Gitterzellen. Man erkennt, daß mit zunehmendem Leervolumenanteil des Gitters dieses Absinken bei wachsenden Werten von Σ_p erfolgt.

Außerdem ist deutlich zu erkennen, daß sich dieser Effekt am stärksten auf die r-Komponente und am schwächsten auf die z-Komponente des mittleren Quadrats der freien Weglänge auswirkt. Dies ist unmittelbar einleuchtend, denn nur in r-Richtung ist das betrachtete Gitter endlich.

Die Abweichung der r- und z-Komponenten des mittleren Quadrats der freien Weglänge voneinander stellt ein Maß für die Anisotropie in einem vorgegebenen Gitter dar. Um die Anisotropieverhältnisse in Abhängigkeit vom totalen makroskopischen Querschnitt der Brennstäbe zu untersuchen, ist in Abbildung VII für eine schon der Abbildung V zugrunde gelegte Gitteranordnung die Kurve

$$g(\Sigma_p) = \frac{\sum_K R_{1 \rightarrow K, z}^2 - \sum_K R_{1 \rightarrow K, r}^2}{\sum_K R_{1 \rightarrow K, r}^2}$$

gezeichnet. Sie nimmt in einem großen Bereich mit dem totalen makroskopischen Querschnitt Σ_p linear zu. Für große Werte von Σ_p ist die Zunahme der Funktion schwächer als linear und bei Werten von Σ_p , die aus programmtechnischen Gründen nicht erreichbar sind, sollte sich ein Grenzwert ergeben. Extrapoliert man die Kurve in Richtung $\Sigma_p = 0$, so geht die Extrapolationsgerade im Rahmen der Zeichengenauigkeit durch den Nullpunkt. Auch dieses Ergebnis ist leicht erklärbar, da für diesen Grenzwert die Unterschiede in den nuklearen Eigenschaften von Brennstoff- und Kühlmittelzone verschwinden (homogenes Medium). In Abbildung VIII

ist die Kurve $g(\Sigma_p)$ in einem kleineren Σ_p -Bereich für drei Gitteranordnungen dargestellt. Man erkennt, daß die Anisotropieeigenschaften des Gitters mit dem Leervolumenanteil zunehmen. Die Extrapolationsgeraden treffen sich auch in diesem Fall im Rahmen der Zeichengenauigkeit im Nullpunkt des Koordinatensystems.

In allen betrachteten Fällen lieferte das Programm SRIJ für die mittlere freie Weglänge entsprechend der Gleichung(3.1.9)

$$\int_K R_{1 \rightarrow k, 0} = \frac{1}{\Sigma_{\text{hom}}}$$

und zwar mit einer Abweichung von maximal 0,25 %. Dieselbe Beziehung bestätigt sich auch erwartungsgemäß für die r- und z-Komponenten der mittleren freien Weglänge. (Im eindimensionalen Fall läßt sich die Gültigkeit der obigen Beziehungen auch für die einzelnen Komponenten leicht zeigen).

IV.2 Grenzwertbetrachtungen für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Kühlmittelzone

Wird das Kühlmittel mit berücksichtigt und sind die totalen makroskopischen Querschnitte der Kühlmittelzone von der Größenordnung wie sie für gasgekühlte schnelle Reaktoren typisch sind (um einen Faktor von ca. 10^{-2} kleiner als die der Brennstoffzone), so ergeben sich für die mittleren freien Weglängen und die mittleren Quadrate der freien Weglängen, bezogen auf die Brennstoffzone, keine bemerkenswerten Unterschiede zu den Ergebnissen

des vorangegangenen Abschnitts. Jedoch ist es interessant, das Verhalten der mittleren freien Weglängen und ihrer mittleren Quadrate, bezogen auf die Kühlmittelzone, für den Grenzfall zu untersuchen, daß der totale makroskopische Querschnitt in der Kühlmittelzone der Zellen gegen 0 strebt. Dies soll in diesem Abschnitt geschehen. Dabei wird jedoch nicht von den Gleichungen des III. Kapitels ausgegangen, die für eine relativ komplexe Geometrie abgeleitet wurden und die nur numerisch auszuwerten sind, sondern es wird der geometrisch sehr viel einfachere Fall eines zylindrischen Kanals (totaler makroskopischer Querschnitt Σ_c) in einem unendlich ausgedehnten Medium (totaler makroskopischer Querschnitt Σ) betrachtet. Die Figur IV.2.1 zeigt die Verhältnisse im Vertikal- bzw. Horizontalschnitt, wobei die Bezeichnungen des III. Kapitels beibehalten wurden.

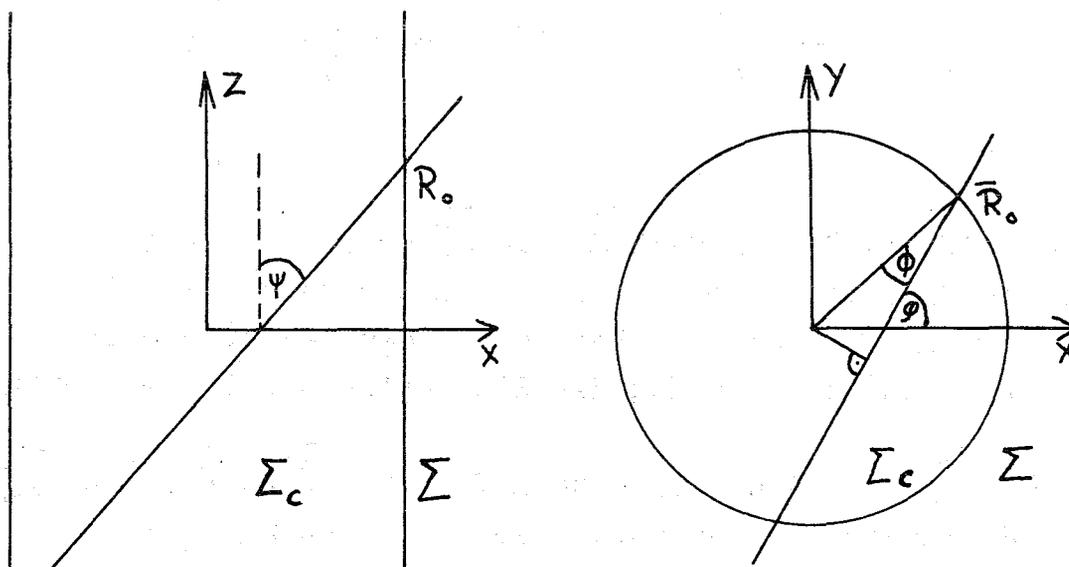


Fig. IV.2.1

Auf dieselbe Weise wie im III. Kapitel erhält man für die mittlere freie Weglänge $\bar{\lambda}_0$ und das mittlere Quadrat der freien Weglänge $\bar{\lambda}_0^2$, bezogen auf den Kanal:

$$\bar{\lambda}_0^2 = \frac{2}{\pi a} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos \phi \left\{ \frac{2a \cos \phi}{\Sigma_c^2} \text{Ki}_2(0) + \frac{2x_1 \cos \phi}{\Sigma_c} \cdot \text{Ki}_2(2\Sigma_c a \cos \phi) - \left(\frac{x_2}{\Sigma_c} + \frac{x_1}{\Sigma_c^2} \right) \left[\text{Ki}_3(0) - \text{Ki}_3(2\Sigma_c a \cos \phi) \right] \right\} \quad (4.2.1)$$

$$\bar{\lambda}_0 = \frac{1}{\pi a} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \cos \phi \left\{ \frac{2a \cos \phi}{\Sigma_c} \text{Ki}_2(0) - \frac{x_1}{\Sigma_c} \left[\text{Ki}_3(0) - \text{Ki}_3(2\Sigma_c a \cos \phi) \right] \right\} \quad (4.2.2)$$

wobei wie im III. Kapitel

$$x_1 = \frac{1}{\Sigma_c} - \frac{1}{\Sigma_p} \quad \text{und} \quad x_2 = \frac{1}{\Sigma_c^2} - \frac{1}{\Sigma_p^2}$$

bedeuten.

Die radialen Komponenten $\bar{\lambda}_r$ und $\bar{\lambda}_r^2$ ergeben sich auch in diesem Fall, indem man in den Gleichungen (4.2.1) und (4.2.2) die rechten Seiten mit dem Faktor $\frac{3}{2}$ multipliziert und die Ordnung der Bickleyfunktionen um 2 erhöht.

Ersetzt man in den Gleichungen für $\bar{\lambda}_0$, $\bar{\lambda}_r$, $\bar{\lambda}_0^2$ und $\bar{\lambda}_r^2$ die Bickleyfunktionen durch die in Gleichung (3.4.4) angegebenen Reihen, formt die Ausdrücke noch etwas um und führt schließlich den Grenzübergang $\Sigma_c \rightarrow 0$ durch, so streben $\bar{\lambda}_0$, $\bar{\lambda}_r$ und $\bar{\lambda}_r^2$ gegen endliche Grenzwerte. Dagegen strebt $\bar{\lambda}_0^2$ für $\Sigma_c \rightarrow 0$ wie $-\ln(\alpha \cdot \Sigma_c)$ gegen unendlich und damit auch $\bar{\lambda}_r^2$. Jedoch geht das Produkt $\Sigma_c \cdot \bar{\lambda}_0^2$ bzw. $\Sigma_c \bar{\lambda}_r^2$ gegen 0. Dieses Ergebnis läßt sich

auf das hexagonale Gitter übertragen, und in Gleichung (2.9.4) bleibt die richtungsabhängige Diffusionskonstante endlich, auch wenn Σ_c gegen 0 strebt.

In Abbildung IX ist für ein hexagonales Gitter (Brennstabradius 0,468 cm, Zentrumsabstand der Brennstäbe 1,08 cm) der Verlauf der radialen (r-) und axialen (z-) Komponente der mittleren freien Weglänge sowie der r- und z-Komponente des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone, als Funktion des totalen makroskopischen Querschnitts der Kühlmittelzone (Σ_c) aufgetragen. Man erkennt deutlich, daß die radiale und axiale Komponente der mittleren freien Weglänge wie auch die radiale Komponente des mittleren Quadrats der freien Weglänge für $\Sigma_c \rightarrow 0$ gegen einen Grenzwert streben. Dagegen läßt sich in der halblogarithmischen Darstellung durch die berechneten Punkte für die axiale Komponente des mittleren Quadrats der freien Weglänge eine flach ansteigende Gerade legen. In der Abbildung IX sind noch auf der Ordinate die Werte der radialen Komponenten der mittleren freien Weglänge und des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone, für den Fall $\Sigma_c = 0$ vermerkt. Man erkennt, daß sie nicht allzu weit von den auf die Kühlmittelzone bezogenen Größen abweichen. Dieses Ergebnis ist plausibel, da bei kleinen totalen Querschnitten in der Brennstoffzone ($0,3 \text{ cm}^{-1}$) die Neutronen mit Flugbahnen in der Horizontalebene zwischen zwei Stöben eine größere Zahl von Zellen durchfliegen und deshalb der Ausgangspunkt in der Zelle keinen großen Einfluß besitzt.

In dem Beispiel in Abbildung IX sind die Brennstabradien des hexagonalen Gitters so groß gewählt worden, daß für kein Neutron aus der Kühlmittelzone die Möglichkeit

bestand, zwischen zwei Brennstabreihen hindurchzufliegen, ohne je einen Brennstab zu berühren. In einem für gasgekühlte schnelle Brutreaktoren typischen Gitter sind jedoch die Zentrumsabstände der Stäbe so groß, daß diese Möglichkeit für einen Teil der Neutronen besteht. Dadurch würde auch die radiale Komponente wie $-\ln(\beta \Sigma_c)$ gegen unendlich streben, wenn Σ_c gegen null strebt. In einem realen Reaktor ist jedoch - wie schon mehrfach erwähnt - diese Möglichkeit ausgeschlossen und im Programm SRIJ wird dem durch die Begrenzung der Gitterausdehnung in solchen Richtungen Rechnung getragen. In Abbildung X sind für das Zellgitter des Reaktorentwurfs des KFZ die radialen und axialen Komponenten des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Kühlmittelzone, in Abhängigkeit von Σ_c dargestellt. Auf Grund der Begrenzung ergibt sich auch in diesem Fall ein endlicher Grenzwert für die radiale Komponente. Dagegen steigt die axiale Komponente in der halblogarithmischen Darstellung wiederum linear an, jedoch ist die Steigung wesentlich größer als im Beispiel aus Abbildung IX.

IV.3 Einfluß der heterogenen Gitterstruktur auf die Kritikalität gasgekühlter schneller Brutreaktoren

Nachdem in den beiden vorangegangenen Abschnitten die Eigenschaften der mittleren freien Weglängen und ihrer mittleren Quadrate ausführlich diskutiert wurden, soll

in diesem Abschnitt für mehrere Reaktorkonzepte die richtungsabhängige Diffusionskonstante bestimmt und bei der Berechnung des effektiven Multiplikationsfaktors verwendet werden.

Im einzelnen wurden folgende Konzepte betrachtet:

1. Ein Reaktorkonzept des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KFZ) [20]. Dieses Konzept ist ein Beispiel für einen typischen gasgekühlten schnellen Brutreaktor mit einem Kühlmittelvolumenanteil im Gitter von ca. 57,5 %, bei einem Kühlmitteldruck von ca. 90 at.
2. Ein Reaktorkonzept der Firma Gulf-General-Atomic (GGA) mit karbidischem Brennstoff [20]. Dieses Konzept zeichnet sich durch einen höheren Kühlmittelvolumenanteil (61 %) aus.
3. Ein Reaktorkonzept der Firma Siemens [30], das eine verglichen mit anderen Reaktorkonzepten hohe Spaltstoffanreicherung (16 %) und einen Kühlmittelvolumenanteil von ca. 63 % aufweist. Dieser Kühlmittelvolumenanteil von 63 % kann ungefähr als obere, realistische Grenze bei gasgekühlten Reaktoren angesehen werden.

Die Tabelle IV.3.1 enthält eine Zusammenstellung der Daten dieser Konzepte soweit sie für die Berechnung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten und des effektiven Multiplikationsfaktors von Bedeutung sind.

Für die Berechnung des effektiven Multiplikationsfaktors stand leider kein zweidimensionales Diffusionsprogramm zur Verfügung, das eine richtungsabhängige Diffusionskonstante hätte verarbeiten können. Da der Haupteffekt der heterogenen Gitterstruktur von der z-Komponente der richtungsabhängigen Diffusionskon-

	Reaktorkonzept		
	KFZ	GGA	Siemens
Corehöhe			
H_c [cm]	120.0	110.1	127.5
Coreradius			
R_c [cm]	150.0	110.1	127.5
Dicke des axialen Blankets d [cm]	60.0	60.0	60.0
Volumenanteile [%]			
Brennstoff	33.87	33.19	26.58
Kühlmittel	57.42	60.74	62.69
Hüllmaterial	8.71	6.07	10.73
Brennstabradius			
a [cm]	0.37	0.385	0.3754
Zentrumsabstand der Brennstäbe R [cm]	1.08	1.1704	1.1704

Tab. IV.3.1: Ausgangsdaten der untersuchten Reaktorkonzepte

stanten wiedergegeben wird, wurden deshalb eindimensionale Diffusionsrechnungen in axialer Richtung für eine Reaktorkonfiguration mit Core und oberem und unterem axialen Blanket durchgeführt.

Im einzelnen wurde in der folgenden Weise vorgegangen: Mit Hilfe eines 208-Gruppen-Spektrums des zu untersuchenden Reaktors - es ergab sich aus einer nulldimensionalen Diffusionsrechnung - wurde aus dem im KARKOS-Programmsystem [31] vorhandenen Gruppensatz eine Gruppenkonstantendatei mit 26 Lethargiegruppen erzeugt, die die totalen makroskopischen Querschnitte sowohl für die homogenisierten Reaktorzonen als auch für die Brenn-

stab- und Kühlmittelzonen der Reaktorgitter enthielt. Die Grenzen der Lethargiegruppen entsprachen denen der Gruppensätze des KFZ. Anschließend wurden dann eindimensionale Diffusionsrechnungen in axialer Richtung für die homogenisierten Reaktorzonen durchgeführt, und der effektive Multiplikationsfaktor K_{hom} ermittelt. Bei den eindimensionalen Diffusionsrechnungen wurde der Reaktor einmal als in radialer Richtung unendlich ausgedehnt angesehen, zum andern wurde die endliche Ausdehnung betrachtet, und die radiale Leckage durch ein (gruppenunabhängiges) Buckling B_{rad}^2 beschrieben. Als nächstes wurden dann mit dem Programm SRIJ die richtungsabhängigen Diffusionskonstanten für Core- und axiale Blanketzone in Form von 26 Gruppenquerschnitten berechnet. Die Abbildung XI zeigt die Werte der Diffusionskonstanten einer homogenisierten Zone (Core) und die Werte der unter Berücksichtigung des heterogenen Zellgitters bestimmten Diffusionskonstanten \bar{D}_0 sowie ihrer axialen (\bar{D}_z) und radialen (\bar{D}_r) Komponenten in den 26 Lethargiegruppen. Man erkennt, daß \bar{D}_0 , \bar{D}_r und \bar{D}_z größer sind als D_{hom} . Die Berücksichtigung der heterogenen Gitterstruktur vergrößert also die Diffusionskonstante und damit die Leckage. Dabei ist die Änderung der axialen Komponente am stärksten, während die Abweichung der radialen Komponente von D_{hom} nur etwa $\frac{1}{3}$ der Abweichung der axialen Komponente ausmacht. Es wurden nun in der Gruppenkonstantendatei die Diffusionskonstanten der homogenisierten Core- und Blanketzone durch die entsprechenden axialen Komponenten der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten ersetzt. Anschließend wurden wiederum eindimensionale Diffusionsrechnungen in axialer Richtung durchgeführt. Für den in radialer Richtung endlichen Reaktor wurde die Leckage in radialer Richtung durch ein von der Lethargiegruppe abhängiges Buckling B_{rad}^{g2} beschrieben,

das nach der Gleichung

$$B_{\text{rad}}^{g2} \cdot \bar{D}_z^g = B_{\text{rad}}^2 \cdot D_{\text{hom}}^g \quad (4.3.1)$$

bestimmt wurde. Das heißt, es wurde versucht, die Leckage in radialer Richtung gegenüber der Rechnung mit homogenisierten Reaktorzonon nicht zu ändern. Dies ist mit der obigen Beziehung natürlich nur näherungsweise möglich, da sich der Fluß ändert. Die Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der radialen Leckage wurden durchgeführt, um festzustellen, ob und wie stark sich eine Niveauänderung (Spektrumsänderung) beim effektiven Multiplikationsfaktor auswirkt. Die Tabelle IV.3.2 enthält die Ergebnisse der Diffusionsrechnungen. Sie wurden ohne Berücksichtigung des Kühlmittels gewonnen (auf Kühlmittelleinflüsse wird im nächsten Abschnitt eingegangen).

Wie man aus Tabelle IV.3.2 ersieht, ist im Falle $B_{\text{rad}}^2 \neq 0$ die Leckage in radialer Richtung bei den Rechnungen mit D_{hom} und \bar{D}_z etwa gleich geblieben. Weiter erkennt man, daß die axiale Leckage ansteigt, wenn die endliche Ausdehnung des Reaktors in radialer Richtung berücksichtigt wird. Dies ist eine Folge des geänderten Spektrums. Dagegen ist der relative Unterschied in der axialen Leckage zwischen der Rechnung mit D_{hom} und \bar{D}_z nahezu unabhängig davon, ob die endliche Ausdehnung des Reaktors in radialer Richtung berücksichtigt wurde ($B_{\text{rad}}^2 \neq 0$). Der Leckageunterschied beträgt beim Reaktorentwurf des KFZ ca. 6,5 %, bei den beiden anderen Entwürfen ca. 7,5 %. Wegen des hohen Kühlmittelvolumenanteils macht sich der Heterogenitätseinfluß dort stärker bemerkbar. Der relativ geringe Unterschied zwischen den Reaktorentwürfen von GGA und Siemens rührt von Material-

Reaktor- entwurf	ohne Heterogenitätskorrektur Leckage aus dem Core [%]				mit Heterogenitätskorrektur Leckage aus dem Core [%]				$\frac{\Delta L_{ax}}{L_{ax}(\text{hom})}$ [%]	$\frac{\Delta K}{K}$ [%]	$\frac{\Delta K^+}{K}$ [%]	
	L_{ges}	L_{ax}	L_{rad}	K_{hom}	L_{ges}	L_{ax}	L_{rad}	K_{het}				
<u>KFZ</u>												
$B_{rad}^2 \neq 0$	22.47	14.16	8.31	1.004725	23.41	15.09	8.32	0.996115	6.53	0.86	0.9	
$B_{rad}^2 = 0$	-	13.76	-	1.087018	-	14.66	-	1.077452	6.54	0.88		
<u>Siemens</u>												
$B_{rad}^2 \neq 0$	28.35	15.19	13.16	1.010038	29.63	16.38	13.25	0.998864	7.78	1.11	1.2	1
$B_{rad}^2 = 0$	-	14.40	-	1.154771	-	15.54	-	1.141058	7.91	1.19	bis 1.3	1
<u>GGA</u>												
$B_{rad}^2 = 0$	-	16.54	-	1.006803	-	17.75	-	0.995549	7.38	1.12	1.3	

+ zweidimensionale, korrigierte Werte

Tab. IV.3.2: Einfluß der heterogenen Zonenstruktur auf die Leckage (L) und den effektiven Multiplikationsfaktor (K).

unterschieden her (karbidischer, oxidischer Brennstoff), deren Auswirkungen sich zum Teil gegenseitig kompensieren. Wie weiter aus Tabelle IV.3.2 hervorgeht, beträgt die relative Änderung von K_{eff} beim Entwurf des KFZ ca. 8,7 %, bei den beiden anderen Entwürfen ca. 11 %. Die unterschiedlichen Werte, die sich mit und ohne Berücksichtigung der endlichen Ausdehnung in radialer Richtung ergeben, werden hauptsächlich dadurch verursacht, daß die radiale Leckage nicht genügend genau konstant gehalten werden konnte.

Die in Tabelle IV.3.2 angegebenen Änderungen im effektiven Multiplikationsfaktor spiegeln nur den Einfluß der axialen Komponente der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten wider. Man kann den Einfluß der Heterogenitätskorrektur auf den Eigenwert eines realen (zweidimensionalen) Reaktors nach folgender Überlegung ungefähr abschätzen: Führt man eine eindimensionale Diffusionsrechnung in axialer Richtung mit der radialen Komponente \bar{D}_r durch, berechnet die Differenz von K_{eff} gegenüber dem homogenen Wert und berücksichtigt weiter die Unterschiede bei der axialen und radialen Leckage, so erhält man für die zweidimensionale Konfiguration des Reaktorentwurfs des KFZ einen Reaktivitätsunterschied von ca. 10,8 % gegenüber der Rechnung mit homogenisierten Zonen. Bei den Reaktorentwürfen von Siemens und GGA wurde die Rechnung mit der radialen Diffusionskonstanten nicht durchgeführt, aber wie aus Abbildung XI hervorgeht, ist die Abweichung der radialen Komponente der Diffusionskonstanten von D_{hom} nur etwa $\frac{1}{3}$ mal so groß wie die der axialen. Mit dieser Abschätzung ergibt sich beim Reaktorentwurf der Firma Siemens eine Reaktivitätsänderung von ca. 14 % und beim Reaktorentwurf von GGA etwas mehr als 14 %.

Wie schon erwähnt, führt der abgeleitete Ausdruck für \bar{D}_χ in homogenen Medien auf eine Diffusionskonstante, die der konsistenten P1-Näherung entspricht [31], während die mit homogenisierten Zonen durchgeführten Diffusionsrechnungen einer inkonsistenten P1-Näherung [31] entsprechen. Rechnungen im Rahmen des KARKOS-Systems [31] haben ergeben, daß allein aus diesem Grund die Reaktivität sich um 1 % erniedrigt. Berücksichtigt man weiter den im nächsten Abschnitt behandelten Kühlmiteleinfluß, so ergeben sich schließlich die in der letzten Spalte von Tabelle IV.3.2 angegebenen korrigierten Werte für die Reaktivitätsänderung.

Die in Tabelle IV.3.1 angeführten Ausgangsdaten bezogen sich nur auf das hexagonale Gitter. Volumenanteile der Strukturmaterialien wie Subassemblykästen und Volumenanteile des Kühlmittels, die auf den Raum zwischen Subassemblykästen entfallen, waren darin nicht enthalten. Nun beeinflussen diese Größen wahrscheinlich weniger die axiale als die radiale Komponente der Diffusionskonstanten. Um jedoch eine Abschätzung nach unten für den Heterogenitätseinfluß auf den effektiven Multiplikationsfaktor beim Reaktorentwurf des KFZ zu erhalten, wurde so viel Strukturmaterial zum Brennstab hinzugenommen, daß sich im Gitter der Volumenanteil der Brennstoffzone um 2 % erhöhte. Diese Änderung berücksichtigt in etwa die Vernachlässigung der oben erwähnten Volumenanteile. Eindimensionale Diffusionsrechnungen in axialer Richtung ergaben, daß durch diese Maßnahme der Heterogenitätseinfluß beim effektiven Multiplikationsfaktor nur um 0,5 % verringert wird. Dieses im ersten Augenblick überraschende Ergebnis erklärt sich dadurch, daß der zusätzliche Strukturmaterialanteil am Brennstab den totalen makroskopischen Querschnitt erhöht, und dieser Effekt kompensiert teilweise die Auswirkungen, die durch eine

Kühlmittelvolumenverminderung entstehen.

Um festzustellen, wie stark die Ergebnisse durch eine unterschiedliche Wichtung der Querschnitte beeinflußt werden, wurden schließlich noch bei der Berechnung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten an Stelle der mit der Stromdichte gewichteten totalen Querschnitte solche verwendet, die mit der Flußdichte gewichtet waren. Es ergab sich in allen Fällen beim effektiven Multiplikationsfaktor ein Unterschied von weniger als 0,4 %. Dieses Ergebnis bestätigt die im II. Kapitel erwähnte Tatsache, daß Leckageeffekte sich hauptsächlich oberhalb des Resonanzbereiches der schweren Kerne abspielen, so daß die Frage der Wichtung der Querschnitte, welche zur Berechnung der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten verwendet werden, von keiner praktischen Bedeutung ist.

IV.4 Einfluß der Heterogenität auf den Kühlmittelverlustkoeffizienten bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren

Der Kühlmittelverlustkoeffizient ΔK_L ist definiert als die relative Änderung des effektiven Multiplikationsfaktors bei totalem Kühlmittelverlust (K_{loss}), bezogen auf den effektiven Multiplikationsfaktor im Normalbetrieb (K), also:

$$\Delta K_L = \frac{K_{loss} - K}{K}$$

Um diese Größe berechnen zu können, wurden zusätzlich zu den Rechnungen des vorangegangenen Abschnitts entsprechende Rechnungen unter Berücksichtigung des Kühlmittels durchgeführt. Es zeigte sich, daß der Unterschied zwischen

den Diffusionskonstanten mit und ohne Helium dann größer ist, wenn die Heterogenität der Reaktorzonen berücksichtigt wird. Dies erkennt man an Hand von Abbildung XII, in der die Differenzen

$$D_{\text{hom}} \text{ (ohne He)} - D_{\text{hom}} \text{ (mit He)}$$

bzw. $\bar{D}_z \text{ (ohne He)} - \bar{D}_z \text{ (mit He)}$

für einige Lethargiegruppen gezeichnet sind (Reaktor-konzept des KFZ). Zusätzlich ist auch noch der Verlauf des totalen makroskopischen Querschnitts der Kühlmittelzone (Σ_c) in den einzelnen Lethargiegruppen mit eingezeichnet. Die Kurven I und II zeigen in grober Näherung denselben Verlauf wie Σ_c . Bei großen Werten von Σ_c (Gruppe 4 und 5) nimmt auch der Abstand zwischen den Kurven I und II zu. Außerdem wird der Abstand trotz kleiner werdendem Σ_c in Richtung zu niedrigeren Lethargiegruppen hin größer. Dies erklärt sich dadurch, daß der totale makroskopische Querschnitt der Brennstoffzone kleiner wird, so daß die Neutronen eine größere Zahl von Zellen und damit größere Wegstrecken im Kühlmittel durchlaufen, was den Einfluß des Kühlmittels verstärkt. Der Unterschied in den Kurven I und II bedeutet mit andern Worten, daß bei Berücksichtigung der heterogenen Zonenstruktur der Reaktoren die Leckageunterschiede beim Übergang vom Zustand mit in den Zustand ohne Kühlmittel größer sind, und damit wird ΔK_L^{het} kleiner als ΔK_L^{hom} . Die Tabelle IV.4.1 enthält die Ergebnisse der Rechnung für die Reaktorkonzepte des KFZ und der Firma Siemens. Man erkennt, daß der Kühlmittelverlustkoeffizient beim Reaktorentwurf der Firma Siemens kleiner ist als der für das Konzept des KFZ. Dies liegt daran, daß beim Reaktorkonzept von Siemens die Leckage wesentlich größer ist. Weiter ergibt sich aus der letzten Spalte von Tabelle IV.4.1, daß ΔK_L^{het} um ca. 0,8 %

Reaktor- konzept	ohne Heterogenitätskorrektur			mit Heterogenitätskorrektur			ΔK_L^{hom}
	K_{loss}^{hom}	K^{hom}	ΔK_L^{hom} [%]	K_{loss}^{het}	K^{het}	ΔK_L^{het} [%]	$-\Delta K_L^{het}$ [%]
<u>KFZ</u>							
$B_{rad}^2 \neq 0$	1.004725	1.001735	2.98	0.996115	0.994037	2.09	0.89
$B_{rad}^2 = 0$	1.087018	1.082489	4.18	1.077452	1.073837	3.36	0.82
<u>Siemens</u>							
$B_{rad}^2 \neq 0$	1.010038	1.007687	2.33	0.998864	0.997140	1.72	0.61
$B_{rad}^2 = 0$	1.154771	1.148848	5.15	1.141058	1.136012	4.45	0.70

Tab. IV.4.1: Berechnung des Heterogenitätseinflusses auf den Kühlmittelverlustkoeffizienten ΔK_L

beim Reaktorkonzept des KFZ und um ca. 0,7 % beim Reaktorentwurf der Firma Siemens kleiner ist als ΔK_L^{hom} . Das entspricht einer Reduktion um ca. 27 - 30 % bei den beiden Konzepten (Werte für $B_{rad}^2 = 0$). Daß die Werte in der letzten Spalte von Tabelle IV.4.1 für $B_{rad}^2 = 0$ bzw. $\neq 0$ um ca. 0,1 % voneinander abweichen, rührt daher, daß nach Gleichung (4.3.1) die Leckage in radialer Richtung nur näherungsweise konstant gehalten werden kann. Schließlich sei noch bemerkt, daß bei der Berechnung des Kühlmittelverlustkoeffizienten nur der Einfluß der axialen Komponente der richtungsabhängigen Diffusionskonstanten berücksichtigt werden konnte. Der (kleine) Einfluß der radialen Komponente konnte nicht erfaßt werden.

IV.5 Änderung der Kritikalität beim Reaktorentwurf des KFZ mit der Wasserdampfdichte im Primärkreislauf

Bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren mit sekundärem Dampfkreislauf kann der Fall eintreten, daß durch ein Leck in einem Wärmetauscher (z.B. ein Rohrbruch) Wasserdampf in den Primärkreislauf eindringt. In [32] ist dieser Störfall für das Reaktorkonzept des KFZ eingehend untersucht worden. Es wurde in dem zitierten Bericht zuerst einmal abgeschätzt, mit welchen Werten der Wasserdampfdichte bei einem solchen Störfall zu rechnen ist. Auf Grund der einfachen Überlegung, daß im schlimmsten Fall nur so lange Wasserdampf vom Sekundärkreislauf in den Primärkreislauf eindringen kann, solange ein Druckunterschied in den beiden Kreisläufen besteht, ergab sich ein maximaler Wert der Dampfdichte im Primärkreislauf von ca. $0,042 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Dieser Wert errechnet sich aus dem Druckunterschied in den beiden Kreisläufen (80 at)

unter der Annahme, daß der Wasserdampf gesättigt ist. Anschließend wurde in [32] untersucht, wie sich die Kritikalität beim Reaktorkonzept des KFZ ändert, wenn die Wasserdampfdichte im Kühlmittel von 0 auf ca. $0,042 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ansteigt. Dazu wurden mit dem zweidimensionalen Diffusionscode DIXY [33] Rechnungen zur Bestimmung des effektiven Multiplikationsfaktors bei verschiedenen Werten der Dampfdichte durchgeführt. Die Zahl der Lethargiegruppen des Querschnittsatzes betrug 26, und die Reaktorzonen wurden homogenisiert. Als Resultat ergab sich für den Reaktor in frischem Zustand, d.h. ohne Spaltprodukte, die Kurve I in Abbildung XIII. Es ist interessant zu untersuchen, wie stark sich die Ergebnisse aus [32] ändern, wenn die heterogene Struktur der Reaktorzonen auf die in dieser Arbeit beschriebene Weise berücksichtigt wird. Auch in diesem Fall muß der Heterogenitätseinfluß mit Hilfe von eindimensionalen Diffusionsrechnungen ermittelt und auf die zweidimensionalen Größen entsprechend übertragen werden. Zu diesem Zweck wurden, wie in den beiden vorangegangenen Abschnitten, für verschiedene Werte der Wasserdampfdichte die effektiven Multiplikationsfaktoren mit und ohne Heterogenitätskorrektur berechnet. Die Tabelle IV.5.1 enthält die Ergebnisse der Rechnungen. Bildet man die Differenz ΔK der effektiven Multiplikationsfaktoren $K_{\text{hom}} - K_{\text{het}}$, so wird diese (Tab. IV.5.1) mit zunehmender Wasserdichte erwartungsgemäß geringer. Schließlich wurde noch die Reduktion des Heterogenitätseinflusses berechnet (letzte Spalte in Tab. IV.5.1), indem vom ersten ΔK -Wert ($\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 0$) die ΔK -Werte für die anderen Wasserdichten abgezogen wurden. Diese Werte geben also an, um wieviel die Kritikalität bei einer bestimmten Wasserdichte ansteigt, wenn die heterogene Struktur der Reaktorzonen berücksichtigt wird. Addiert man also in Abbildung XIII zu den Werten

Wasserdichte [g·cm ⁻³]	ohne Heterogeni- tätskorrektur K _{hom}	mit Heterogeni- tätskorrektur K _{het}	$\Delta K =$ K _{hom} - K _{het} ·10 ³	7.7 - ΔK ·10 ³
0.0	1.001735	0.994037	7.7	0.0
0.00594	1.001705	0.994802	6.9	0.8
0.01782	1.005637	0.999946	5.7	2.0
0.02574	1.008774	1.003477	5.3	2.4
0.03366	1.011613	1.007105	4.5	3.2
0.04158	1.013963	1.010191	3.8	3.9

Tab. IV.5.1: Berechnung der Heterogenitätseinflüsse bei verschiedenen Wasserdichten

der Kurve I an den entsprechenden Stützstellen die Werte der letzten Spalte von Tabelle IV.5.1, dann erhält man eine Kurve II (Abb. XIII), die den Verlauf der Kritikalität mit der Wasserdichte unter Berücksichtigung der heterogenen Gitterstruktur der Reaktorzonen wiedergibt. Man erkennt, daß im Gegensatz zu den Verhältnissen im Fall der Kurve I der untersuchte Reaktor schon bei kleineren Werten der Dampfdichte (etwa bei $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 0,023 \text{ g cm}^{-3}$) überkritisch werden würde.

V. Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde untersucht, inwieweit sich nukleare Größen gasgekühlter schneller Brutreaktoren ändern, wenn an Stelle der üblicherweise als homogen angenommenen Reaktorzonen die tatsächlich heterogene, gerichtete Struktur dieser Zonen (Zellgitter) berücksichtigt wird.

Zu diesem Zweck wurde aus der integralen Form der Boltzmann-Gleichung im Rahmen des Multigruppenformalismus ein Ausdruck für die Neutronenbilanz in der Gitterzelle einer Reaktorzone abgeleitet. Dabei wurde die elastische Streuung bis zum 1. Moment exakt berücksichtigt. Bei der Ableitung des Bilanzausdrucks mußten folgende Annahmen gemacht werden:

1. Sowohl von der Fluß- als auch von der Stromdichte in einem Zellgitter (Reaktorzone) wird angenommen, daß sie darstellbar sein soll als das Produkt zweier Faktoren. Der erste Faktor, die makroskopische Komponente, soll innerhalb der Abmessungen einer Zelle als konstant angesehen werden können, während der zweite Faktor, die mikroskopische Komponente, periodisch im Zellgitter sein soll.
2. Die makroskopischen Komponenten der Fluß- und Stromdichte sollen im Rahmen der Diffusionsnäherung der Boltzmann-Gleichung bestimmt werden können. Dies bedeutet unter anderem, daß sie über das Ficksche Gesetz zusammenhängen. Weiter bedeutet die Annahme, daß bei der Entwicklung der makroskopischen Komponente der Flußdichte in eine Taylorreihe diese Entwicklung nach dem dritten Term abgebrochen werden darf. Diese Näherung ist bei Leistungsreaktoren mit großem Corevolumen im allgemeinen gut erfüllt.

3. Zellrechnungen zur Bestimmung der Flußdichte in einem unendlich ausgedehnten Gitter ergaben, daß die mikroskopischen Komponenten von Fluß- und Stromdichte bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren in guter Näherung vernachlässigt werden können. Das vereinfacht die weitere Rechnung. Um aber den Anwendungsbereich nicht unnötig einzuengen, wurden innerhalb der Theorie die mikroskopischen Komponenten berücksichtigt, bei der Anwendung der Theorie auf gasgekühlte schnelle Reaktoren jedoch vernachlässigt.

Aus der abgeleiteten Bilanzgleichung können, wenn das Prinzip von der Erhaltung der Raten angewendet wird, über die Zelle gemittelte Querschnitte für Absorption, Streuung usw. bestimmt werden. Diese sind im Falle der schnellen gasgekühlten Brutreaktoren unter den angegebenen Voraussetzungen identisch mit den Querschnitten, die üblicherweise bei der Berechnung schneller Brutreaktoren mit homogenisierten Reaktorzonen verwendet werden. Für die Leckage aus der Zelle, die auf Grund der gerichteten Struktur der heterogenen Reaktorzonen richtungsabhängig ist - quer bzw. längs zu den Brennstäben ist die Leckage unterschiedlich - liefert die abgeleitete Bilanzgleichung jedoch einen Ausdruck, der verschieden von demjenigen für homogene Medien ist. (Es sollte ja gerade die in homogenen Medien nicht vorhandene Richtungsabhängigkeit (Streamingeffekt) berücksichtigt werden). Für die Leckage aus der Zelle in axialer und radialer Richtung wird ein der Diffusionsnäherung in homogenen Medien analoger Ansatz gemacht, durch den eine richtungsabhängige Diffusionskonstante definiert wird. Diese richtungsabhängige Diffusionskonstante stellt sich dar als eine Funktion von gerichteten mittleren freien Weglängen und gerichteten mittleren Quadraten der freien Weglängen. Der

Zusatz "gerichtet" wurde von P.R. Barret [15], dessen Arbeit der Ausgangspunkt für die vorliegende Untersuchung war, in Anlehnung an die von P. Benoist [12] eingeführten gerichteten Stoßwahrscheinlichkeiten gewählt. Im Falle homogener Medien geht der abgeleitete Ausdruck für die Diffusionskonstante in den Ausdruck über, der sich aus der P1-Näherung ergibt.

Um den Einfluß der heterogenen Gitterstruktur in einigen konkreten Fällen berechnen zu können, wurden numerische Verfahren zur Bestimmung der gerichteten mittleren freien Weglängen und ihrer gerichteten mittleren Quadrate entwickelt. Denn im Gegensatz zu den Verhältnissen bei thermischen Reaktoren müssen bei der Berechnung dieser Größen für schnelle Reaktoren eine große Anzahl kleiner Beiträge aus vielen Zellen bzw. Zellzonen betrachtet werden. Bei hohen Energien, d.h. kleinen Querschnitten, werden z.B. in einem Winkelsegment des hexagonalen Gitters von 30° ca. 2 000 Zellen berücksichtigt. Da weiter die Kühlmitteldichte bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren sehr klein ist, mußten, um Kühlmittel-einflüsse bestimmen zu können, Reihenentwicklungen für die gerichteten mittleren freien Weglängen und ihre mittleren Quadrate angegeben werden. Anschließend wurden die Eigenschaften der gerichteten mittleren freien Weglängen und ihrer gerichteten mittleren Quadrate bei den für gasgekühlte schnelle Reaktoren typischen Verhältnissen untersucht.

Bei der Anwendung der abgeleiteten Theorie war es von Nachteil, daß kein zweidimensionales Diffusionsprogramm zur Verfügung stand, das richtungsabhängige Diffusionskonstanten verarbeiten konnte. Deshalb wurden nur eindimensionale Diffusionsrechnungen durchgeführt, und nur

die Auswirkungen der axialen Diffusionskonstanten bestimmt. Der sehr viel kleinere Einfluß der radialen Diffusionskonstanten wurde entweder abgeschätzt oder überhaupt nicht berücksichtigt. In allen Fällen wurde durch diese Vernachlässigung der Einfluß der heterogenen gerichteten Struktur der Reaktorzonon auf die betrachteten Kenndaten des Reaktors (geringfügig) unterschätzt. Im einzelnen wurde der Einfluß der heterogenen Gitterstruktur in den folgenden Fällen untersucht:

1. Einfluß auf den effektiven Multiplikationsfaktor:

Es wurden drei gasgekühlte schnelle Brutreaktoren von 1000MW_e Leistung betrachtet:

- a.) Der Entwurf des Kernforschungszentrums Karlsruhe (KFZ) - als Beispiel eines typischen Reaktors - mit einem Kühlmittelvolumenanteil von ca. 57,5 % [20],
- b.) ein Reaktorentwurf mit karbidischem Brennstoff und ca. 61 % Kühlmittelvolumenanteil [20] und
- c.) ein Entwurf der Firma Siemens [30] mit oxidischem Brennstoff und ca. 63 % Kühlmittelvolumenanteil.

Da die Berücksichtigung der Heterogenität eine Erhöhung der Leckage, insbesondere in axialer Richtung, zur Folge hat, wurde gegenüber Rechnungen mit homogenisierten Reaktorzonon der effektive Multiplikationsfaktor beim Entwurf des KFZ um ca. 0,9 % kleiner. Auf Grund des höheren Kühlmittelvolumenanteils ergab sich bei den beiden anderen Konzepten eine Reduktion des effektiven Multiplikationsfaktors um ca. 1,3 %. Die Ursache dafür, daß sich bei den Konzepten mit 61 und 63 % Kühlmittelvolumenanteil ungefähr dieselbe Reaktivitätsänderung ergibt, ist eine Folge der unterschiedlichen Auslegungsdaten (Core-

höhe, Art des Brennstoffs), deren Einflüsse sich zum Teil kompensieren. Hinzu kommt noch, daß der Wert von 1,3 % auf Grund einer besonders groben Schätzung der radialen Leckage ermittelt wurde. Wie man aus den angeführten Werten erkennt, führt die Berücksichtigung der Gitterstruktur bei schnellen gasgekühlten Reaktoren mit großem Corevolumen nur zu verhältnismäßig kleinen Reaktivitätsänderungen. Der Heterogenitätseinfluß wird jedoch um so bedeutsamer, je größer die Leckage, d.h. je kleiner das Corevolumen wird.

2. Einfluß auf den Kühlmittelverlustkoeffizienten ΔK_L :
Der Kühlmittelverlustkoeffizient ist bei gasgekühlten schnellen Reaktoren im allgemeinen sehr klein. Beim Reaktorentwurf des KFZ beträgt er 3 %, bei dem der Firma Siemens wegen der größeren Leckage nur 2,3 %. Diese Werte wurden bei homogenisierten Reaktorzonen gewonnen. Eine Berücksichtigung der heterogenen Struktur (nur der Einfluß der axialen Komponente der Diffusionskonstanten) führt beim Entwurf der KFZ zu einer Reduktion um ca. 0,8 % auf 2,2 % und beim Entwurf der Firma Siemens um 0,7 % auf 1,6 %, d.h. in beiden Fällen zu einer Reduktion von ca. 27 - 30 %.

3. Einfluß auf den Verlauf der Kritikalität des Reaktorentwurfs des KFZ für den Fall, daß Wasserdampf in den Primärkreislauf eindringt: In einer früheren Arbeit [32] wurde gezeigt, daß durch ein Leck im Wärmetauscher Wasserdampf in den Primärkreislauf des Reaktors eindringen kann. Die maximale Dampfdichte beträgt nach jenem Bericht ca. $0,042 \text{ g.cm}^{-3}$. Weiter wurde mit zweidimensionalen Diffusionsrechnungen bei homogenisierten Reaktorzonen gezeigt, daß im allgemeinen Fall die Reaktivität mit zunehmender Dampfdichte kleiner wird, da die Absorption von Neutronen in den Spaltprodukten mit weicher werdendem Spektrum überwiegt. Nur im Anfangsstadium, wenn

keine Spaltprodukte vorhanden sind, nimmt mit zunehmender Dampfdichte die Kritikalität anfangs ab, erreicht bei Werten von ca. 0,01 bis 0,014 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ein flaches Minimum - ca. 3,5 % unter dem kritischen Zustand - um dann wieder langsam anzusteigen, so daß beim maximalen Wert der Dampfdichte gerade der kritische Zustand wieder erreicht wird. In der vorliegenden Arbeit ist der Einfluß der Heterogenität der Reaktorzonen auf den beschriebenen Kritikalitätsverlauf bestimmt worden. Die Rechnungen ergaben, daß das Minimum der Kritikalität bei einer Dampfdichte von ca. 0,006 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ liegt (ca. 2,5 % unter dem kritischen Zustand). Danach steigt die Kritikalität wieder an. Der kritische Zustand wird schon bei einer Dampfdichte von ca. 0,02 bis 0,024 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ erreicht, und beim maximalen Wert der Dampfdichte wäre der Reaktor um ca. 4 % überkritisch. Die Berücksichtigung der heterogenen Zonenstruktur des Reaktorentwurfs erhöht also die Kritikalität um maximal 4 % (bei der maximalen Dampfdichte). Es ist noch zu bemerken, daß es bei dieser Untersuchung des Kritikalitätsverlaufs mit der Dampfdichte nur darauf ankam, die Unterschiede zu den früher durchgeführten Rechnungen mit homogenisierten Reaktorzonen zu zeigen. Der Verlauf der Kurve hängt auch empfindlich von den bei der Rechnung verwendeten Kerndaten ab, so daß sich von daher Änderungen ergeben können, die jedoch den hier berechneten Einfluß der Heterogenität nicht berühren.

Kurz zusammengefaßt kann gesagt werden, daß in der vorliegenden Arbeit eine Methode entwickelt wurde, um den Einfluß der heterogenen gerichteten Struktur der Zonen schneller gasgekühlter Reaktoren auf die Leckage und damit auf Kenngrößen, wie z.B. den effektiven Multiplikationsfaktor, zu berechnen. An Hand von drei Anwendungs-

beispielen wurde dieser Einfluß explizit gezeigt. Während beim effektiven Multiplikationsfaktor auf Grund der großen Corevolumina der betrachteten Reaktorkonzepte und damit der relativ kleinen Leckage der Einfluß der Heterogenität nicht zu sehr ins Gewicht fällt, ist er bei der Betrachtung von Kühlmitteldichte-Variationen bedeutsam. Dies zeigte sich bei der Untersuchung des Kühlmittelverlustkoeffizienten und des Kritikalitätsverhaltens nach einem Wassereinbruch in den Primärkreislauf. Abgesehen von den betrachteten Beispielen könnte in Zukunft daran gedacht werden, die in dieser Arbeit entwickelten Methoden dazu zu verwenden, um die Leckage von Neutronen aus den Brutmänteln und damit z.B. die Strahlenbelastung der Trageplatte genauer zu bestimmen. Denn die Berücksichtigung der Heterogenität führt zu Änderungen in der axialen Leckage von ca. 6 bis 9 %. Weiter könnte auch daran gedacht werden, bei natriumgekühlten schnellen Brutreaktoren den Einfluß der Heterogenität auf den Natrium-Void-Koeffizienten zu untersuchen.

L i t e r a t u r

- [1] A.M. Weinberg, E.P. Wigner, "The Physical Theory of Neutron Chain Reactors", The University of Chicago Press (1958)
- [2] S. Glasstone, M.C. Edlund, "The Elements of Nuclear Reactor Theory", New York (1963)
- [3] D. Wintzer, KFK 743 (1969)
- [4] D. Wintzer, Private Mitteilung
- [5] E. Eisemann, KFK 864 (1968)
- [6] K. E. Schroeter, KFK 1180 (1970)
- [7] B. Davison, J.B. Sykes, "Neutron Transport Theory", Clarendon Press, Oxford/England (1957)
- [8] E. Kiefhaber, J.J. Schmidt, KFK 969 (1970)
- [9] D. J. Behrens, AERE T/R 103 (1958)
- [10] Y. V. Shevelev, J. Nucl. Eng. 6, (1957)
- [11] B. Davison, J. Nucl. Eng. 7, (1958)
- [12] P. Benoist, AERE-Trans 842 (1959)
- [13] P. Benoist, CEA-R 2278 (1964)
- [14] P. Benoist, Nucl. Sci. Eng. Vol. 34, No. 3 (1968)
- [15] P. R. Barret, Nukleonik Band 12, Heft 5 (1969)
- [16] G. Goertzel, E. Greuling, Nucl. Sci. Eng., 7 (1960)
- [17] H. Huschke, KFK 770 (1968)
- [18] C. Maeder, "Neutron Streaming in a 2 000 MW_e GCFR", Private Mitteilung (1969)
- [19] J. Ligou, EIR TM-PH-359 (1970)
- [20] Gasbrüter-Memorandum, KFK 1375 (1971)
- [21] J.R. Ackew, FJ. Fayers, P. B. Kemshell, J. British Nucl. Eng. Soc. 5 (1966)

- [22] L. P. Abagjan, N. O. Bazazjanc, I.I. Bondarenko, M. N. Nikolaev, KFK-tr-144
- [23] E. Günther, W. Kinnebrock, KFK 1381 (1971)
- [24] W. Höbel, H. Kraetsch, D. Sanitz, NUSYS I, "Grundgedanken, Konventionen und Subroutinen des Karlsruher Nuklear-Programm-Systems" (nicht veröffentlicht)
- [25] L. Amyot, P. Benoist, Nucl. Sci. Eng. 28 (1967)
- [26] T. M. Danielsen, T. Harvic, R. J. J. Stamm'ler, Kjeller Report KR-55 (1963)
- [27] Handbook of Math. Functions, U.S. Department of Commerce, National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series 55 (1964)
- [28] W. G. Bickley, J. Nayler, Phil. Magazine 20 (1935)
- [29] R. A. Bonalumi, CISE-N-146
- [30] M. Schatz, Private Mitteilung
- [31] H. Huschke, D. Woll, Private Mitteilung
- [32] E. Eisemann, KFK 1487 (1971)
- [33] W. Höbel, H. Bachmann, "Twodimensional Multigroup Diffusion Programme DIXY" (in Vorbereitung)

A n h a n g

Entwicklung nach Kugelflächenfunktion

Eine beliebige Funktion $F(\vec{\Omega})$ ($\vec{\Omega}$ Einheitsvektor) kann nach dem vollständigen System von Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\vec{\Omega})$ entwickelt werden

$$f(\vec{\Omega}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_l^m Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (1)$$

Definitionsgleichungen:

$$Y_l^m(\vec{\Omega}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} (-1)^{\frac{1}{2}(m+|m|)} P_{l|m|}(\mu) e^{im\vartheta} \quad (2)$$

$\mu = \cos \vartheta$; $P_{l|m|}$ assoziierte Legendrefunktionen

Im einzelnen ist

$$Y_l^0(\vec{\Omega}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\mu) \quad (3)$$

$$Y_l^{-m}(\vec{\Omega}) = (-1)^m Y_l^{m*}(\vec{\Omega})$$

(der * bezeichnet die konjugiert-komplexe Größe)

Für die Kugelflächenfunktionen gilt die Orthogonalitätsbeziehung:

$$\int_{4\pi} Y_l^{m*}(\vec{\Omega}) Y_{l'}^{m'}(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (4)$$

(δ Kronecker-Symbol)

Aus (1) und (4) folgt:

$$f_{em} = \int_{4\pi} f(\vec{\Omega}) Y_l^{m*}(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (5)$$

Weiter gilt das Additionstheorem:

$$P_l(\vec{a} \cdot \vec{b}) = \frac{4\pi}{2^{l+1}} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\vec{a}) \cdot Y_l^m(\vec{b}) \quad (6)$$

Die Komponenten des Einheitsvektors lassen sich in der Form schreiben:

$$\begin{aligned} \Omega_z &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(\vec{\Omega}) \\ \Omega_x &= \cos \varphi \sqrt{1-\mu^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left[-Y_1^1(\vec{\Omega}) + Y_1^{-1}(\vec{\Omega}) \right] \\ \Omega_y &= \sin \varphi \sqrt{1-\mu^2} = i \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left[Y_1^1(\vec{\Omega}) + Y_1^{-1}(\vec{\Omega}) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

Ist

$$\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{l,m} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \varphi_l^m(\vec{r}) Y_l^m(\vec{\Omega}) \quad (8)$$

so ergibt sich für die Komponenten des Stroms

$$\vec{J}(\vec{r}) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

mit Hilfe von (7)

$$\begin{aligned} J_z &= \varphi_1^0(\vec{r}) \\ J_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\varphi_1^1 + \varphi_1^{-1} \right] \\ J_y &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \left[\varphi_1^1 + \varphi_1^{-1} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

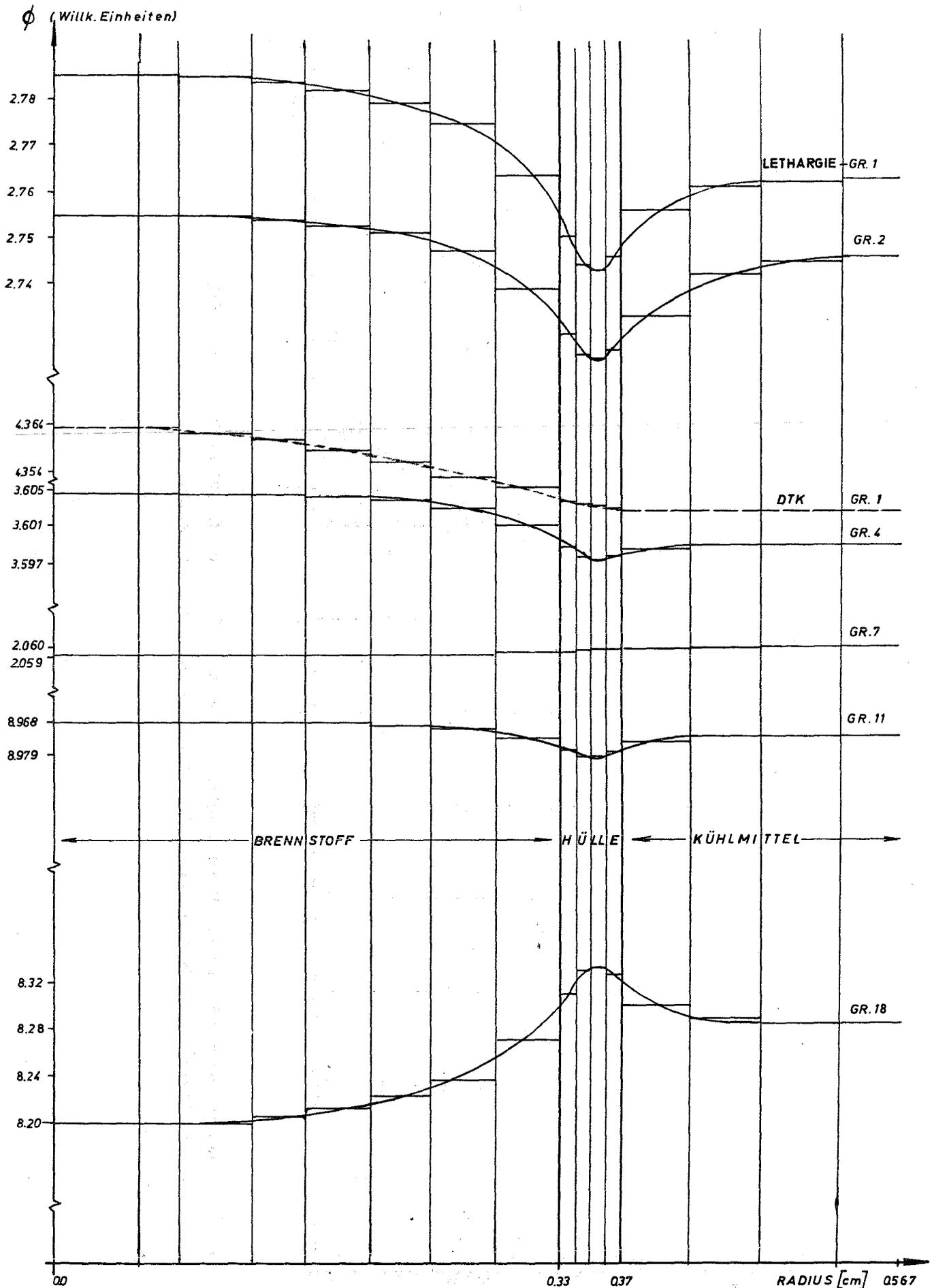


Abb.I: Verlauf der Flußdichte in der Zelle des Reaktorentwurfs des KFZ (Berechnet mit dem Programmsystem WIMS bzw. mit dem SN-Programm DTK)

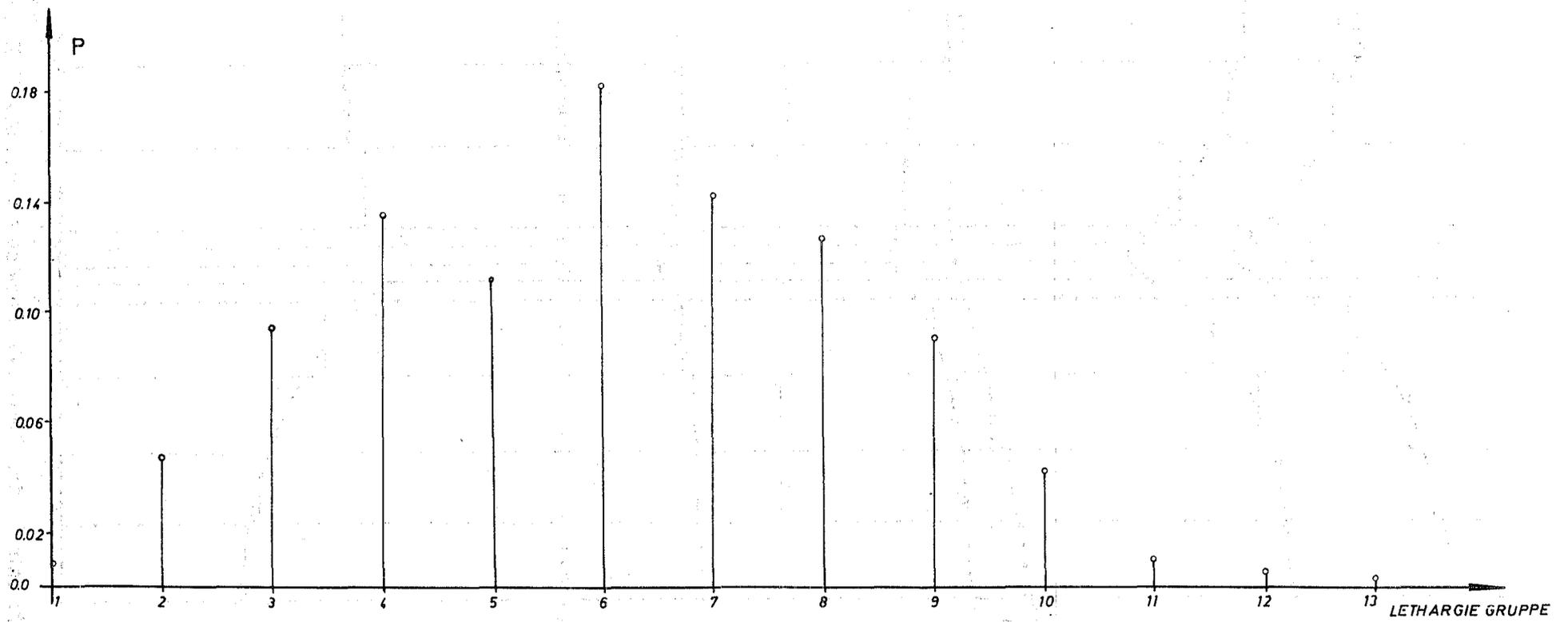


Abb. II: Entkommwahrscheinlichkeit P der Neutronen aus dem Core des Reaktorentwurfs des KFZ in den einzelnen Lethargiegruppen des verwendeten Querschnittsatzes

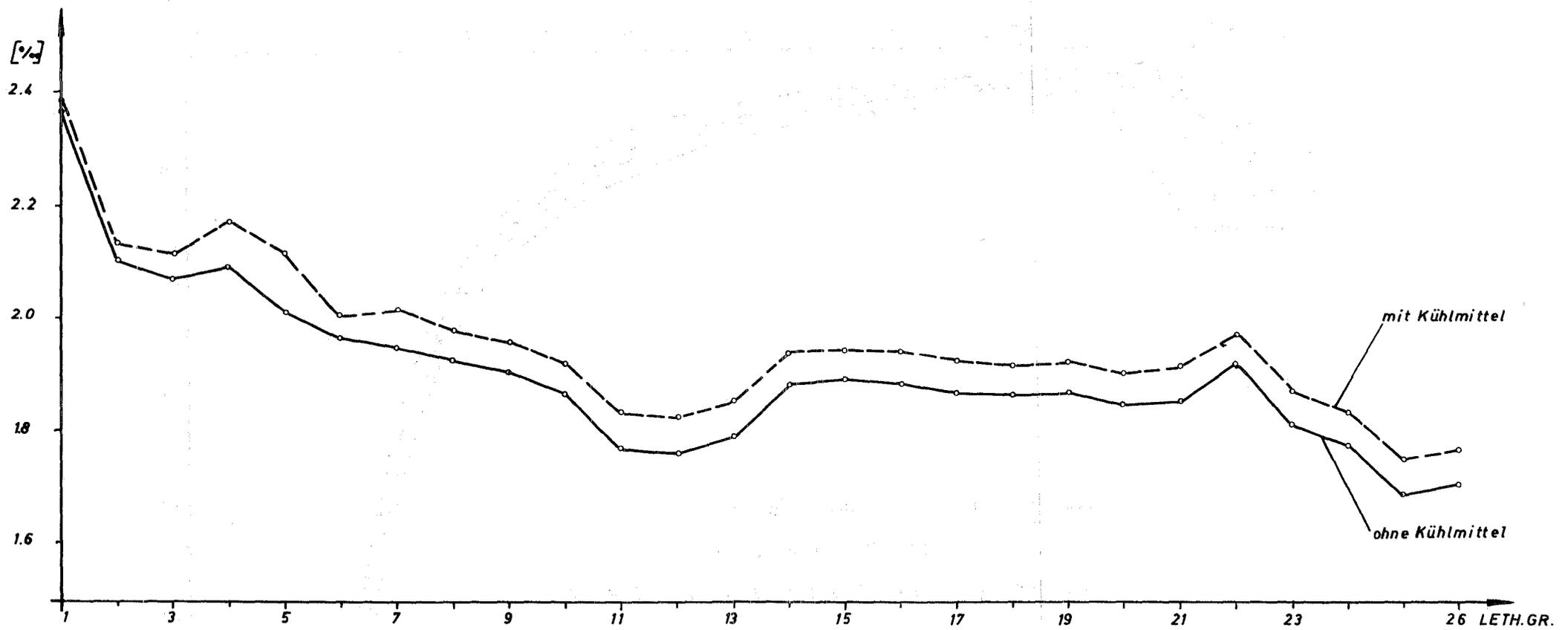
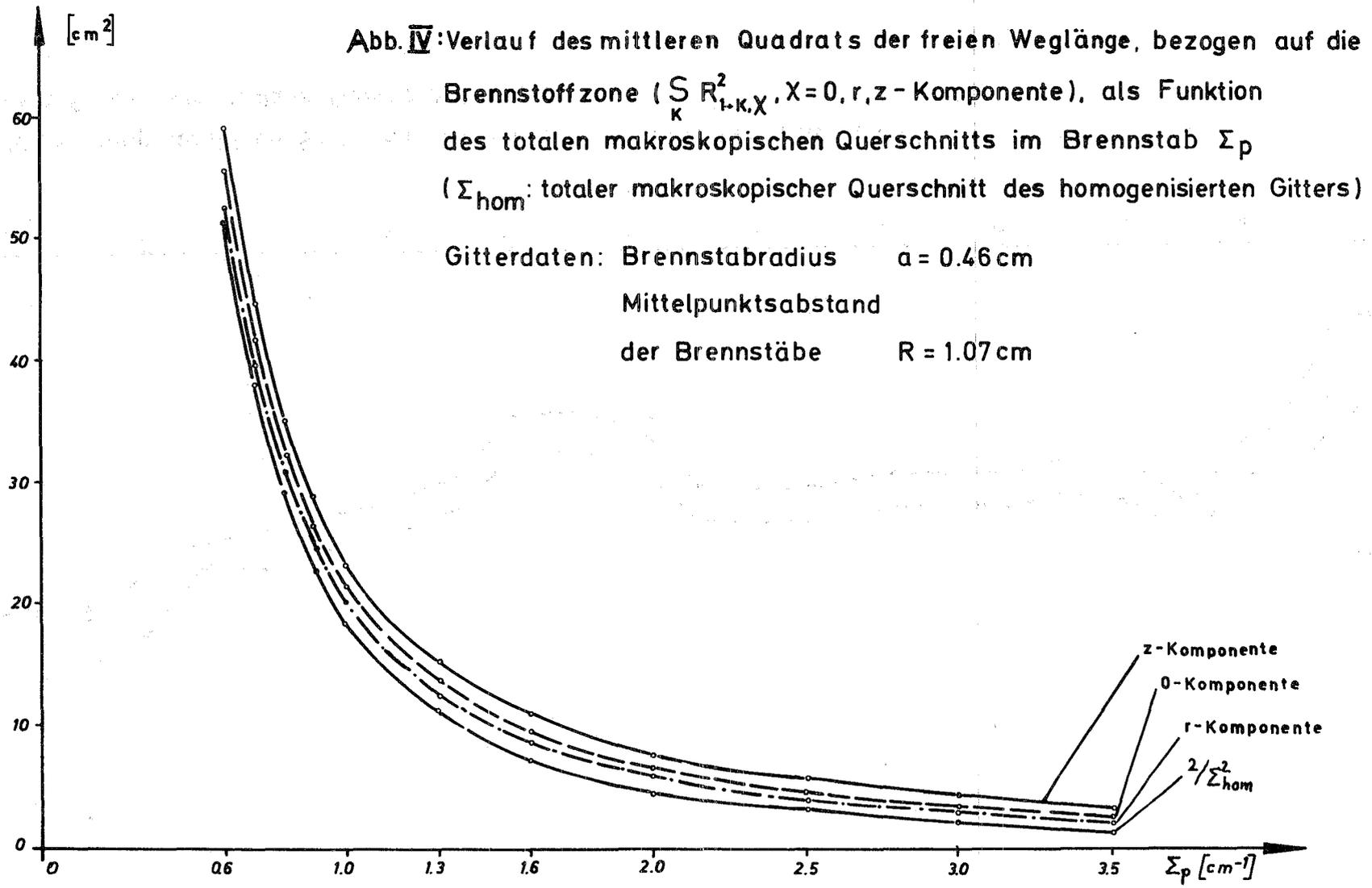


Abb. III: Abweichung der linken Seite von Gl.(3.1.9) vom theoret. Wert 1 in den 26 Leth. Gr. des verwendeten Querschnitts



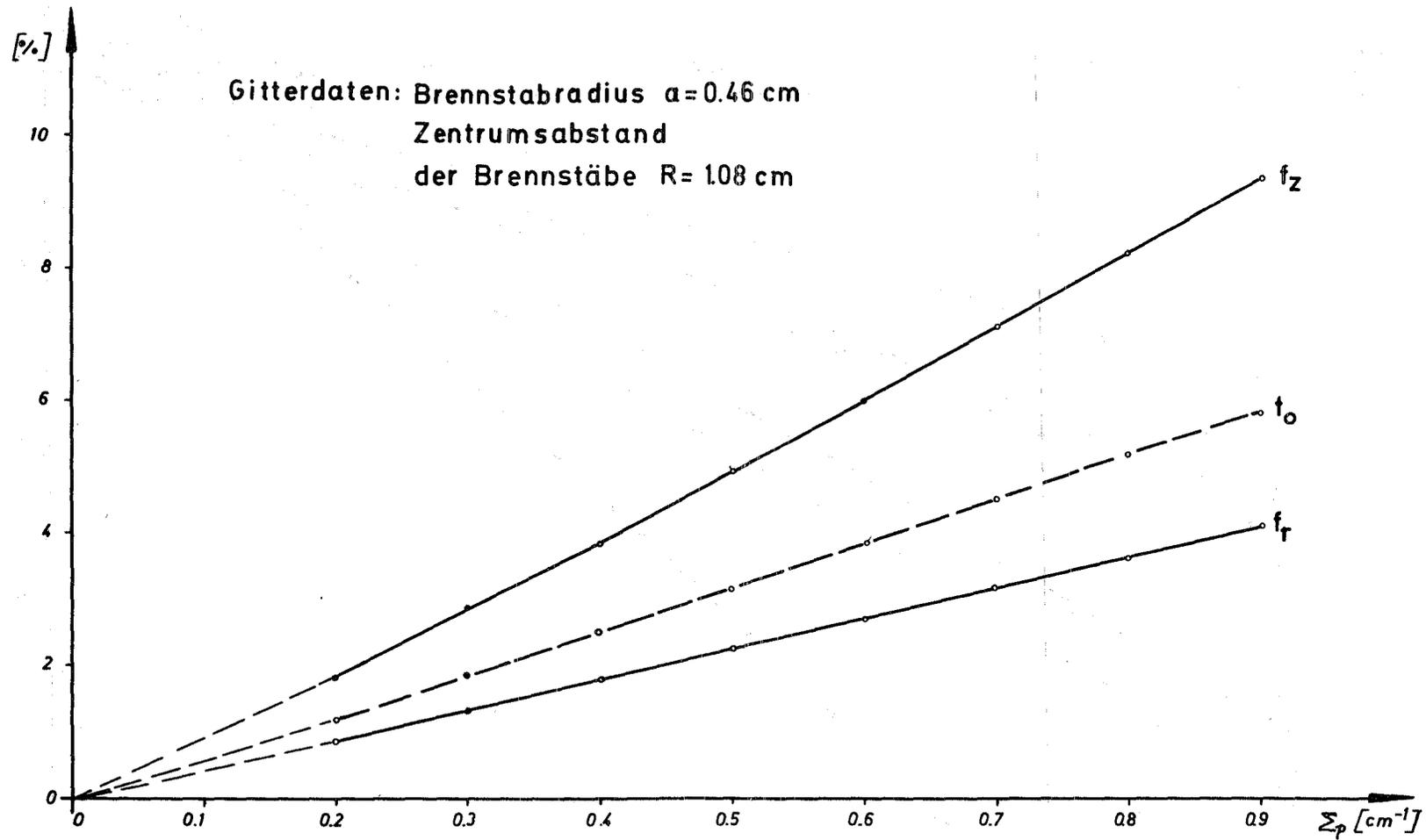


Abb. V: Abweichung der Komponenten des mittleren Quadrats der freien Weglänge, bezogen auf die Brennstoffzone, von $2 / \Sigma_{\text{hom}}^2$.

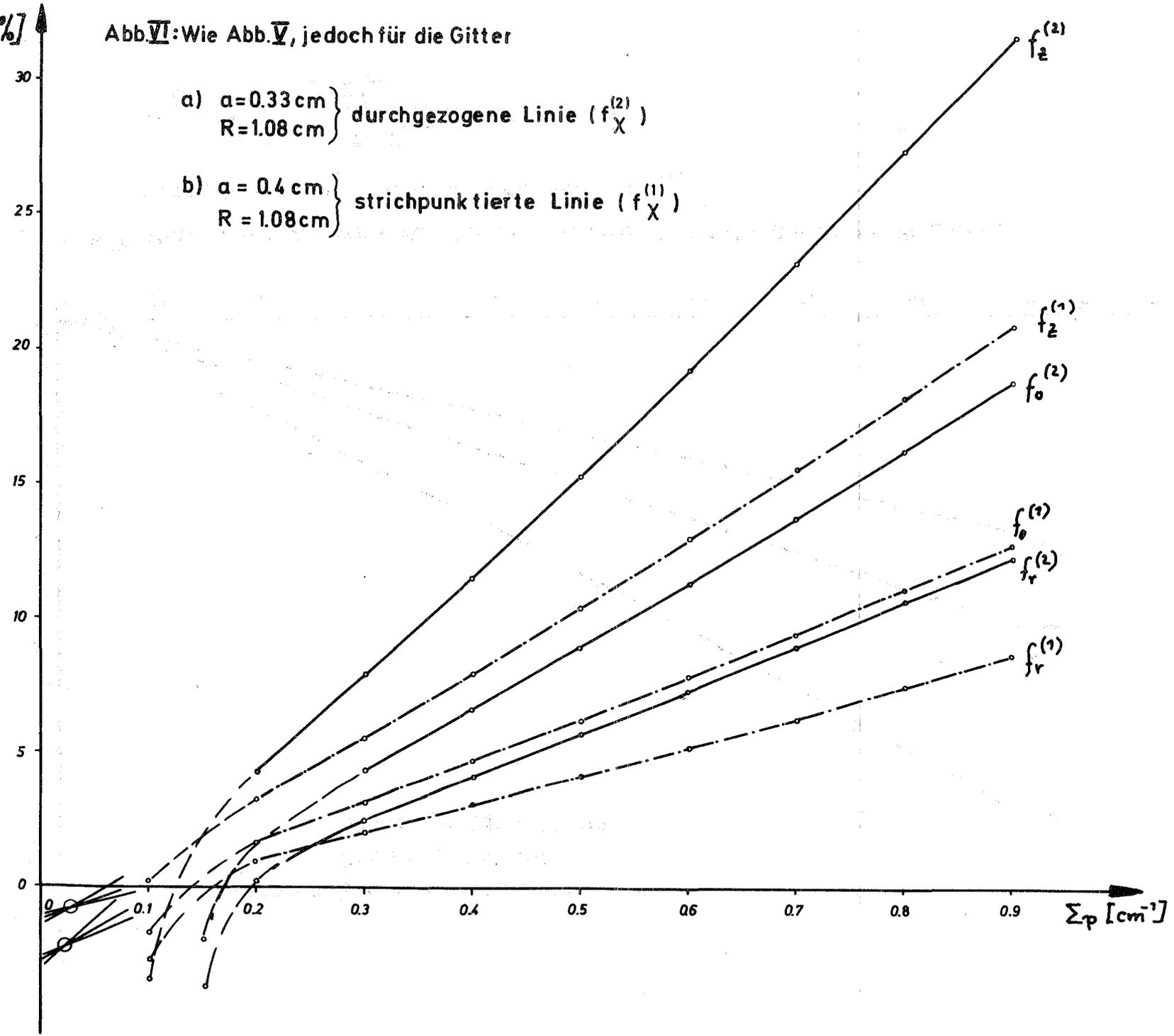
$$\left(f_X = \frac{S R^2_{l \rightarrow k, X} - 2 / \Sigma_{\text{hom}}^2}{2 / \Sigma_{\text{hom}}^2} ; X = 0, r, z \right)$$

[%]

Abb. VI: Wie Abb. V, jedoch für die Gitter

a) $a = 0.33 \text{ cm}$
 $R = 1.08 \text{ cm}$ } durchgezogene Linie ($f_X^{(2)}$)

b) $a = 0.4 \text{ cm}$
 $R = 1.08 \text{ cm}$ } strichpunktierte Linie ($f_X^{(1)}$)



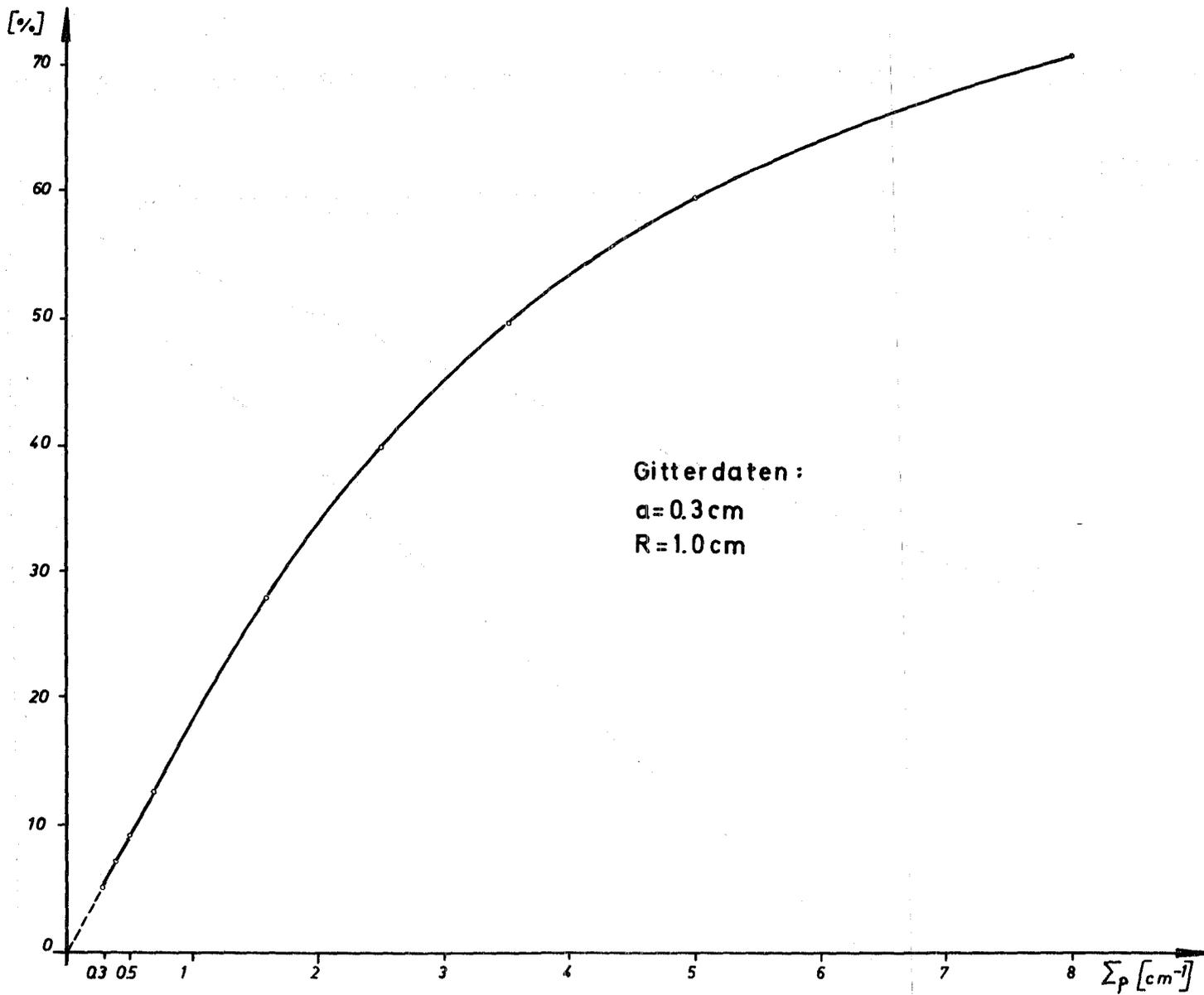


Abb. VII: Verlauf der Kurve $(\sum_k R_{1 \rightarrow k, 2}^2 - \sum_k R_{1 \rightarrow k, r}^2) / \sum_k R_{1 \rightarrow k, r}^2$ als Funktion von $\Sigma\rho$

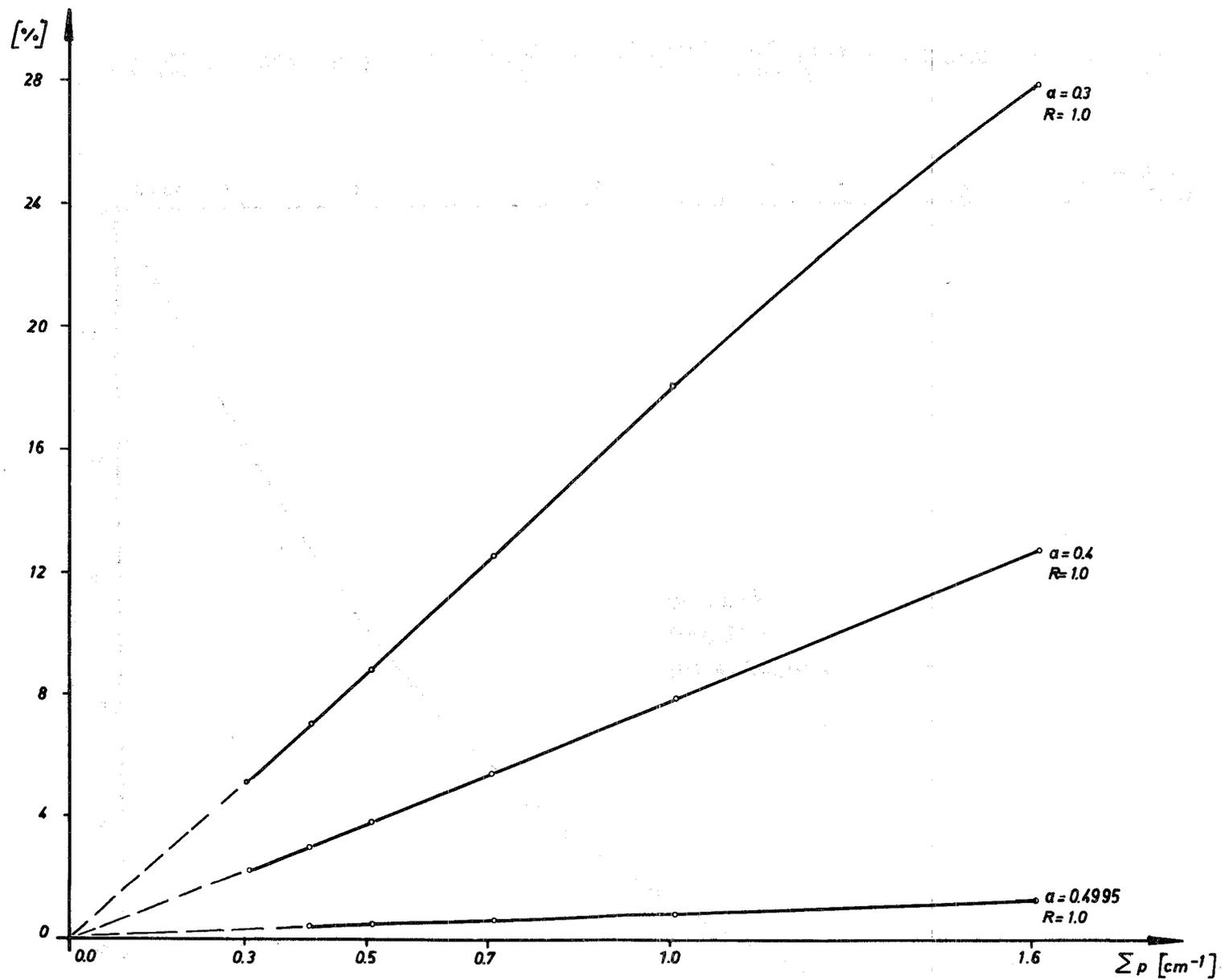
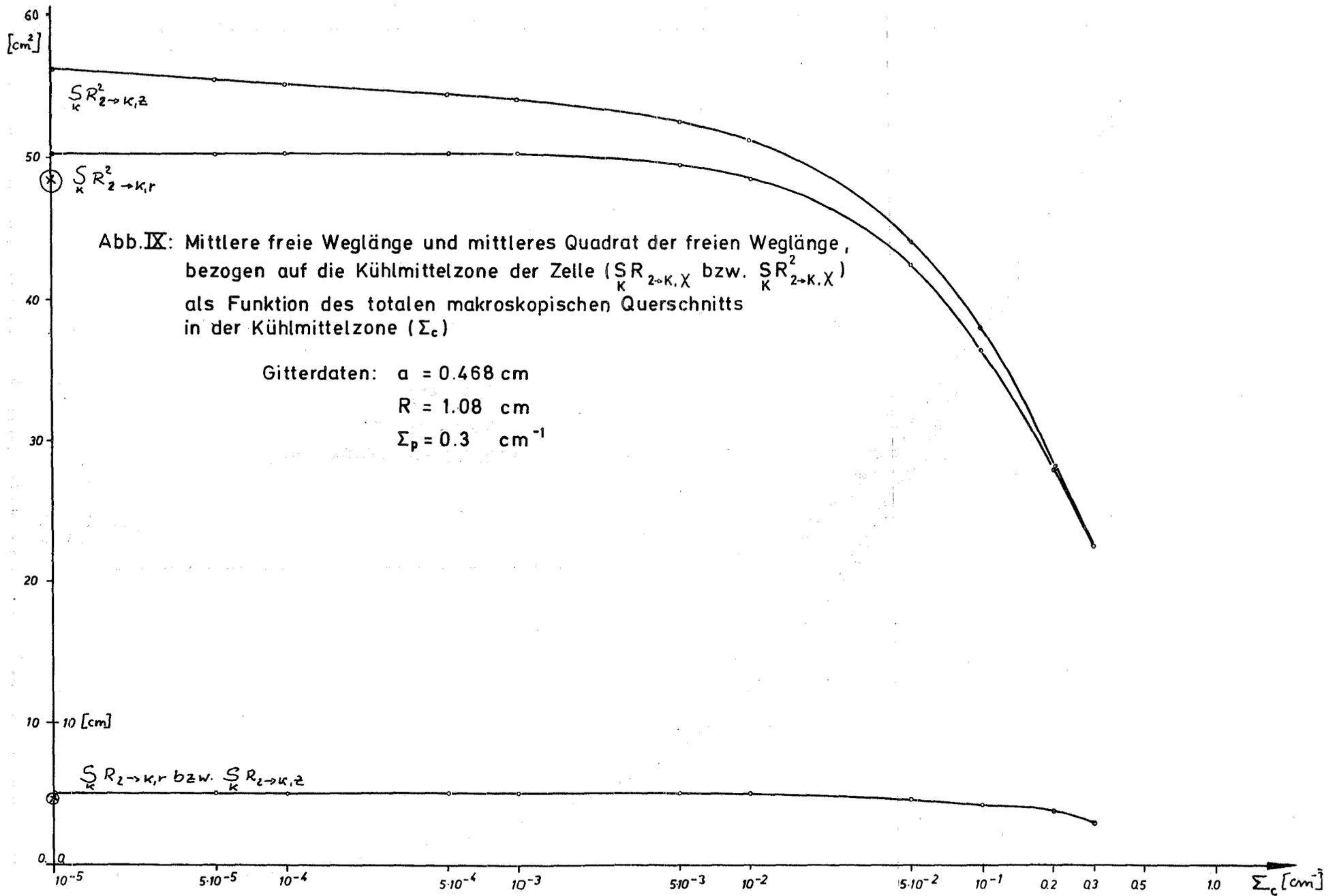


Abb. VIII: Wie Abb. VII, jedoch für 2 weitere Gitter in einem kleineren Variationsbereich von Σp



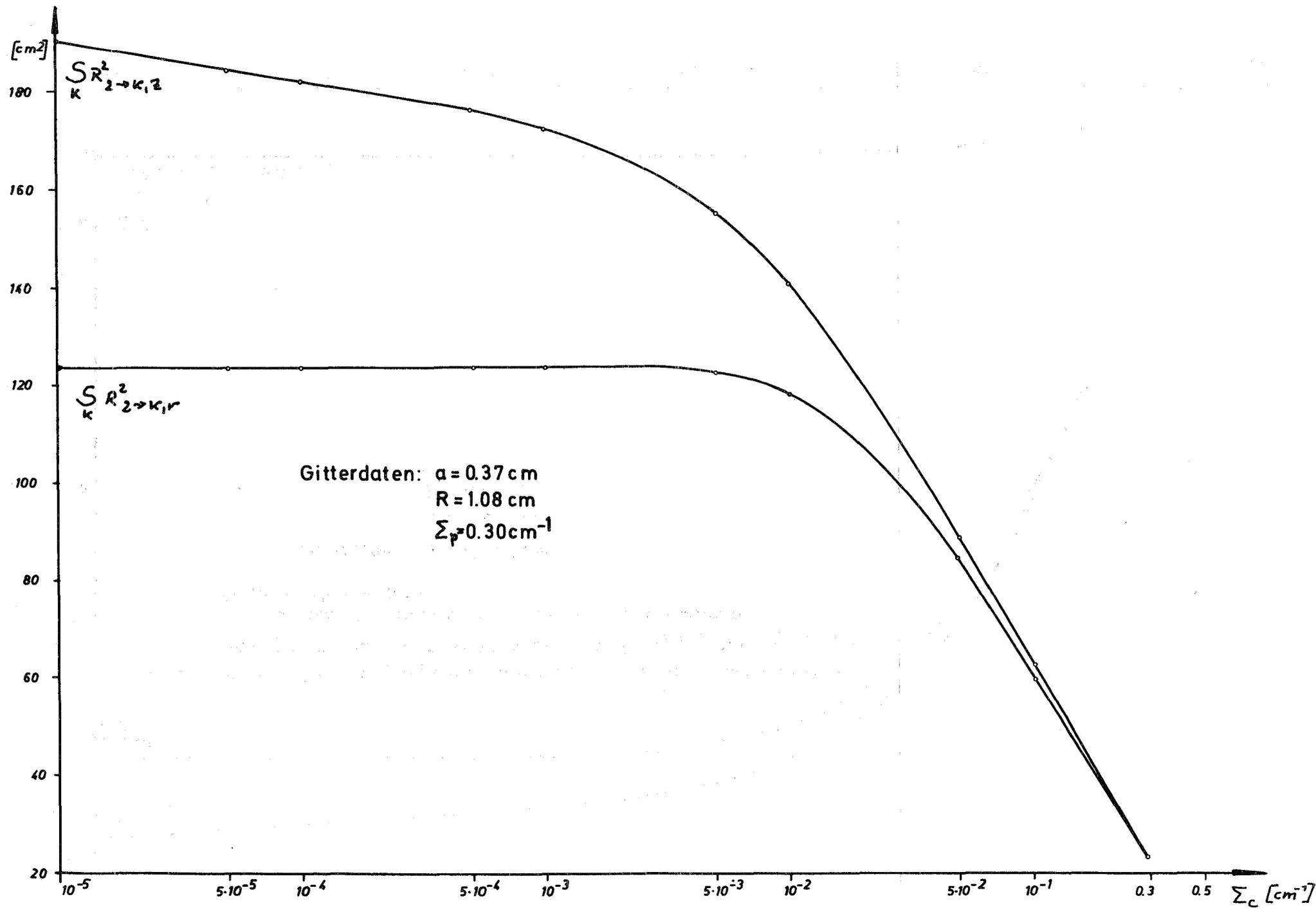


Abb. X: Wie Abb. IX, jedoch für ein Gitter mit höherem Leervolumenanteil

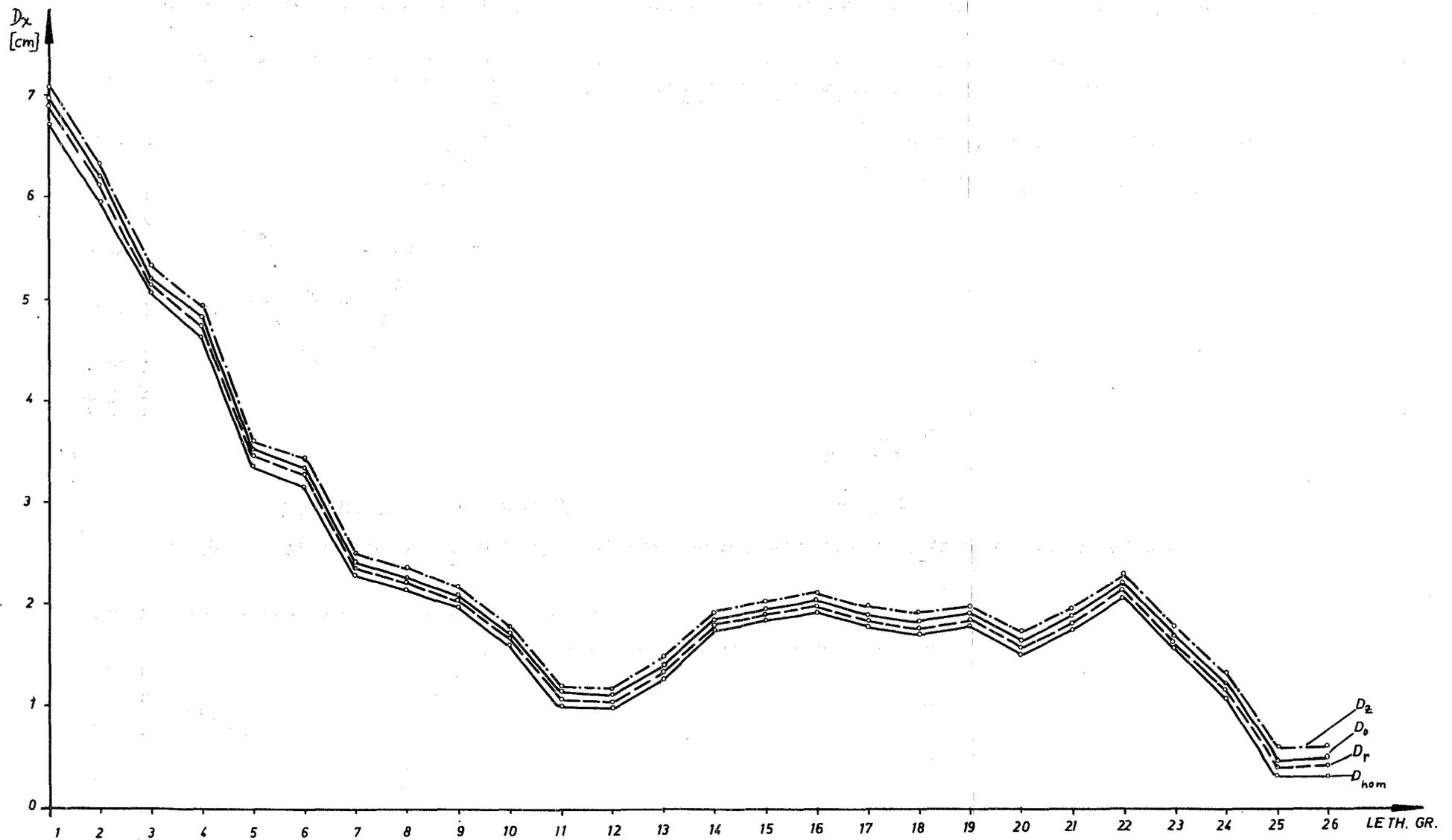


Abb. XI: Vergleich der Diff.-Konstanten im homogenisierten Gitter ($D_{hom.}$) mit D_0 , D_r und D_z (Reaktorentwurf des KFZ)

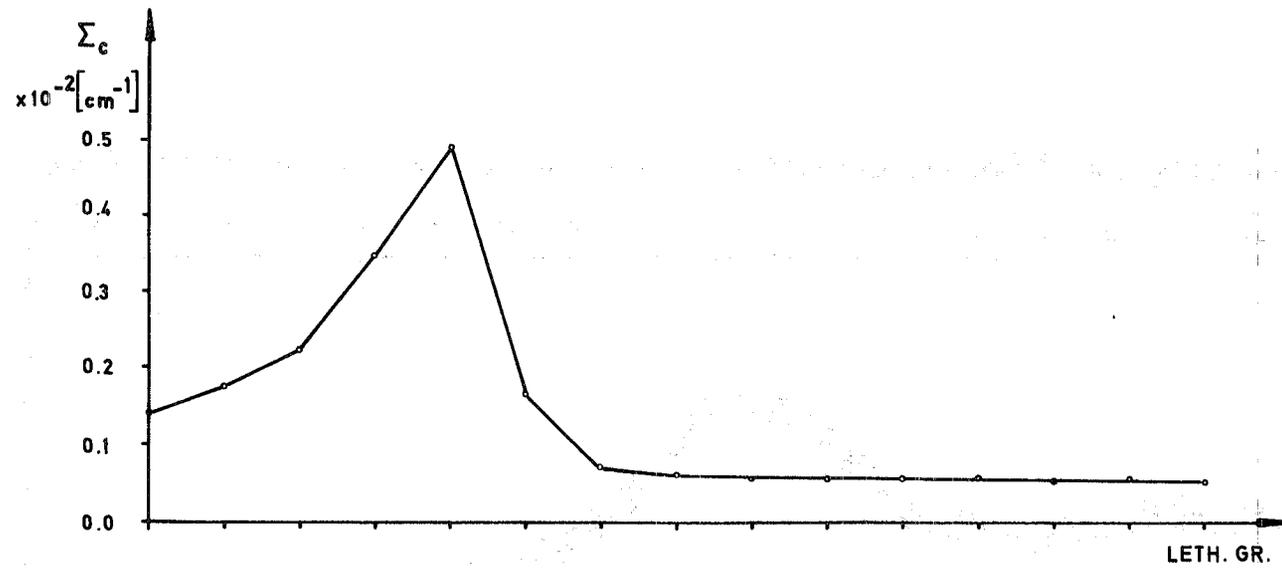


Abb. XII a: Reaktorentwurf des KFZ, totaler makroskopischer Querschnitt des Kühlmittels als Funktion der Lethargie

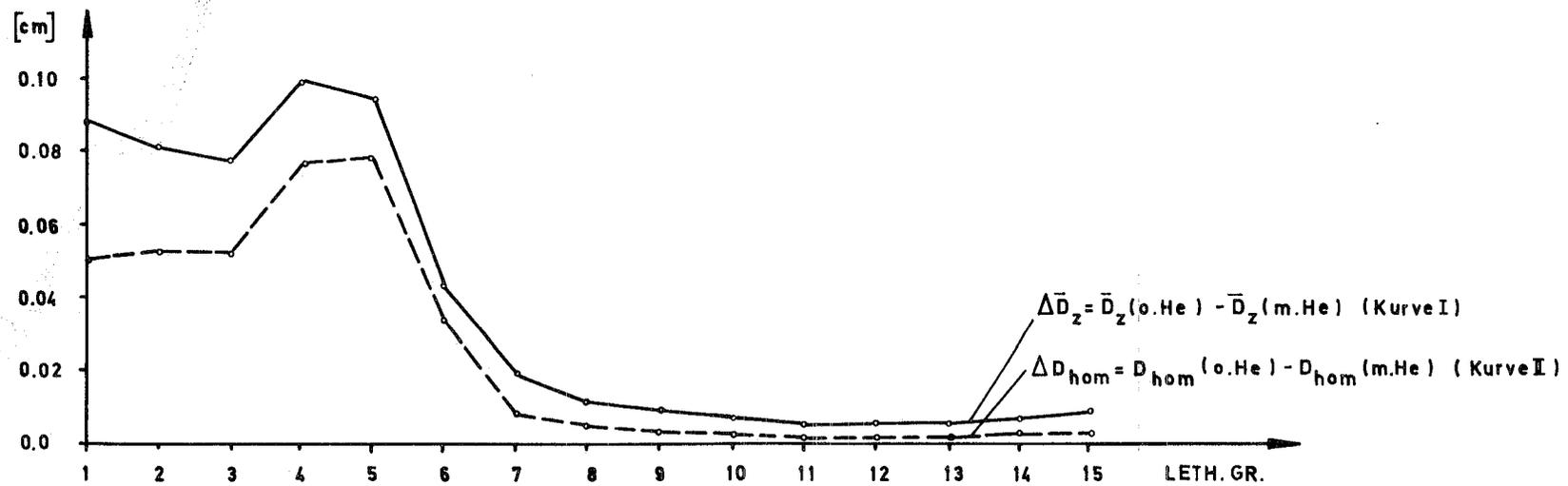


Abb. XII b: Reaktorentwurf des KFZ, Differenz der Diffusionskonstanten mit und ohne Kühlmittel (He) als Funktion der Lethargie

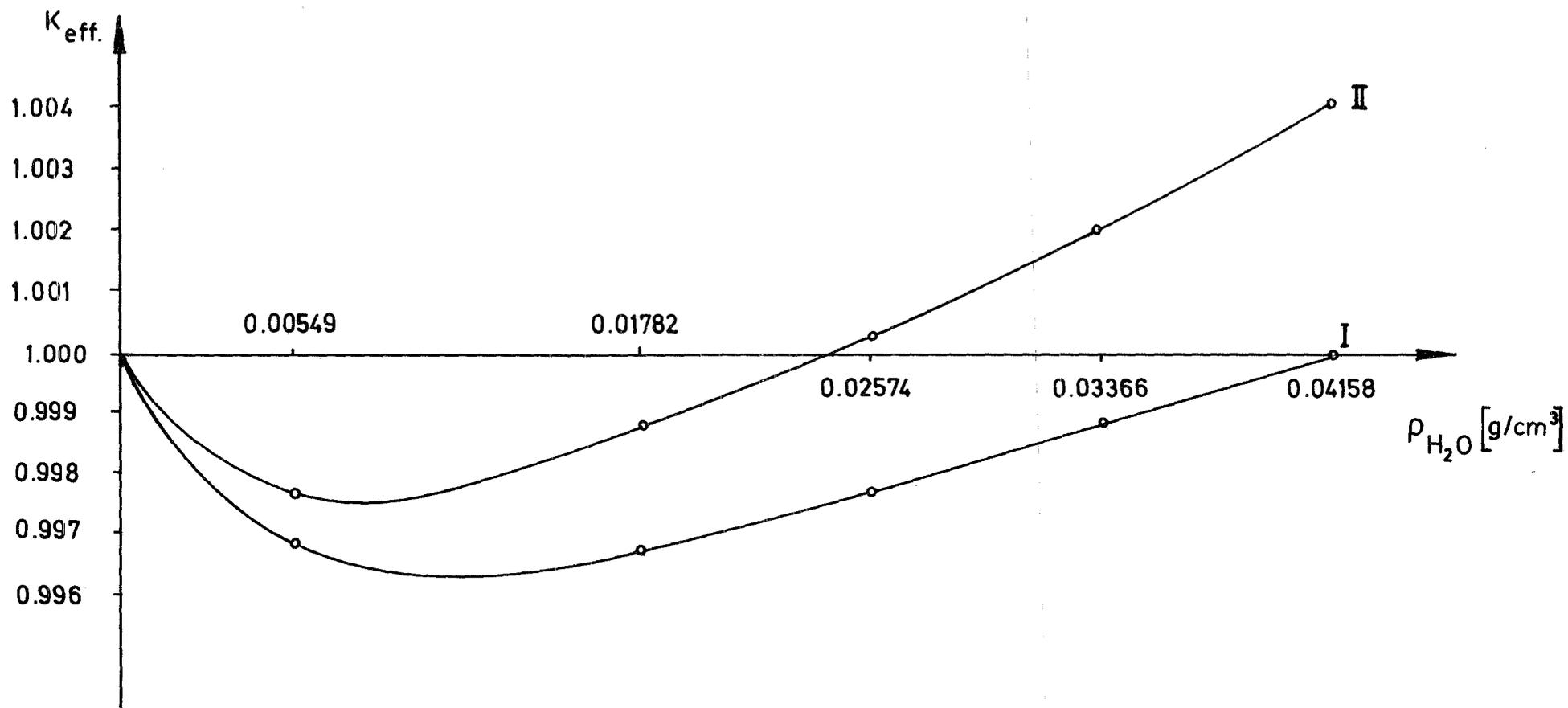


Abb. XIII: Verlauf der Kritikalität als Funktion der Dampfdichte im Primärkreislauf beim Reaktorkonzept des KFZ mit (Kurve II) und ohne (Kurve I) Heterogenitätskorrektur (Abbrand = 0 MWd/t)

