



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

Institut für Nukleare Sicherheitsforschung

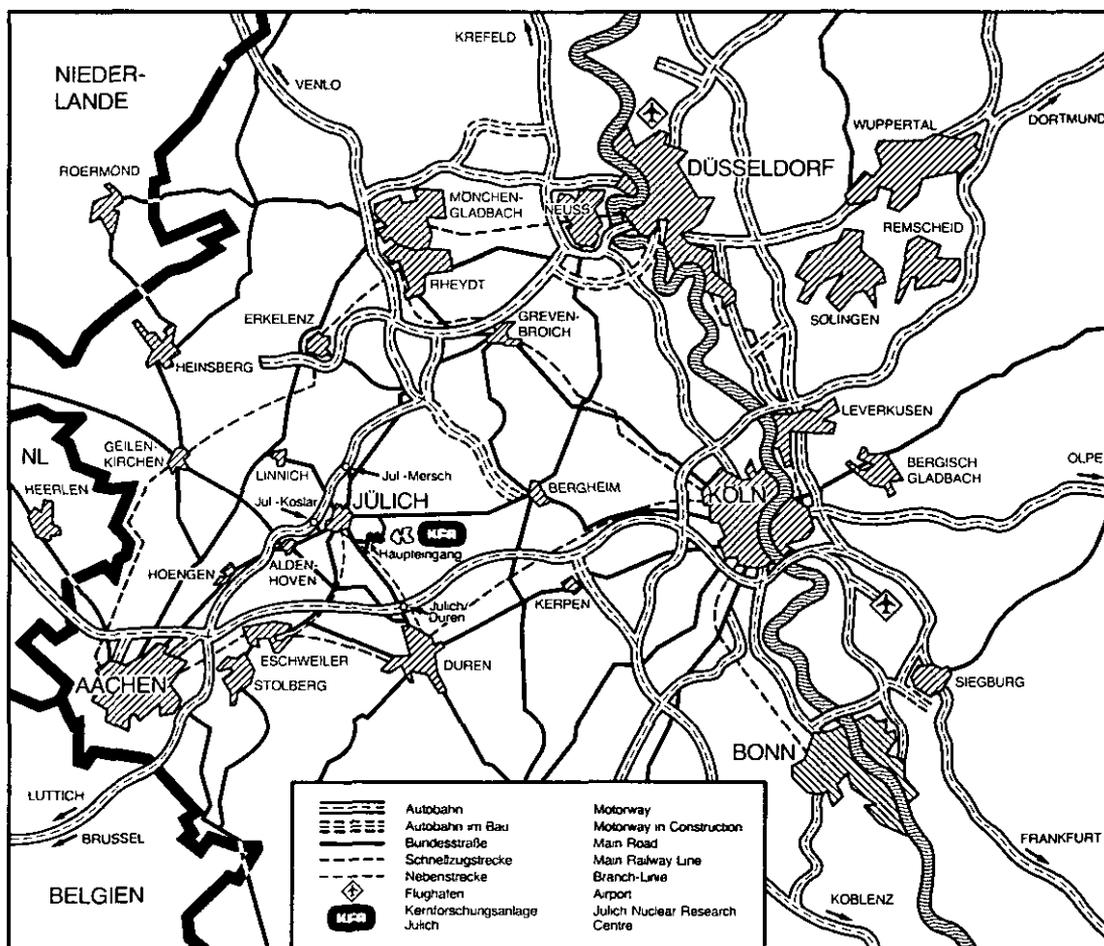
PANAMA

**Ein Rechenprogramm zur Vorhersage
des Partikelbruchanteils
von TRISO-Partikeln
unter Störfallbedingungen**

von

K. Verfondern, H. Nabielek

Jül - Spez - 298
Februar 1985
ISSN 0343-7639



Als Manuskript gedruckt

Spezielle Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 298

Institut für Nukleare Sicherheitsforschung Jül - Spez - 298

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH

Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)

Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

PANAMA
Ein Rechenprogramm zur Vorhersage
des Partikelbruchanteils
von TRISO-Partikeln
unter Störfallbedingungen

von

K. Verfondern, H. Nabielek

P A N A M A
A Computer Code to Predict
TRISO Particle Failure
under Accident Conditions

K. Verfondern, H. Nabielek

SUMMARY

The computer code PANAMA and its underlying modeling assumptions are presented. The models are based on independent measurements of the properties of TRISO particles with a SiC interlayer. Essential features are the calculation of internal gas pressure, of coating strength and its decrease during irradiation and its weakening due to fission product interaction during accidents. At very high temperatures, particle life is determined by SiC thermal decomposition. Good comparison is obtained in the temperature range 1600 - 2500 °C when applying PANAMA to a wide variation of existing accident simulation experiments with spherical fuel elements. At lower temperatures, PANAMA tends to be over-conservative. Predictions of particle failure during the depressurized accident sequence with the worst temperatures of the 200 MW_{th} side-by-side Modular Reactor System remain below the level of normal operations. The same holds true for the HTR-500 MW_e accident sequence with the system under pressure. In the depressurized case, however, failure of all particles has to be expected after approximately 100 hours in the least favourable core position.

P A N A M A

Ein Rechenprogramm zur Vorhersage des
Partikelbruchanteils von TRISO-Partikeln
unter Störfallbedingungen

K. Verfondern, H. Nabielek

ZUSAMMENFASSUNG

Der Computercode PANAMA und die zugrunde liegenden Modellannahmen werden vorgestellt. Die Modelle basieren auf unabhängigen Messungen der Eigenschaften von TRISO-Partikeln mit einer SiC-Zwischenschicht. Wesentliche Merkmale sind die Berechnung des internen Gasdrucks, der Zugfestigkeit der Beschichtung sowie deren Abnahme bei Bestrahlung und deren Schwächung infolge der Wechselwirkung mit Spaltprodukten bei Störfällen. Bei hohen Temperaturen wird das Partikelversagen bestimmt durch thermische Zersetzung der SiC-Schicht. Eine gute Übereinstimmung erhält man für den Temperaturbereich zwischen 1600 und 2500 °C, wenn PANAMA auf das weite Spektrum von Störfallsimulationsexperimenten mit Kugelbrennelementen angewendet wird. Bei niedrigeren Temperaturen scheint PANAMA sehr konservativ zu sein. Vorhersagen des Partikelbruchs im Druckentlastungsstörfall mit den höchsten Temperaturen im 200 MW_{th} HTR-Modul bleiben unterhalb des Niveaus bei Normalbetriebsbedingungen. Dieselbe Aussage erhält man für den HTR-500 MW_e für die Störfallsequenz "Reaktor unter Druck". Dagegen muß im Fall des druckentlasteten Reaktors nach etwa 100 h mit dem Versagen sämtlicher Partikel (an der ungünstigsten Stelle) gerechnet werden.

INHALTSVERZEICHNIS

1.0	Einleitung	1
2.0	Beschreibung des Rechenmodells	7
2.1	Modellvorstellung	7
2.2	Eigenschaften des Rechenprogramms	8
2.3	Aufbau und Ablauf des Rechenprogramms	9
2.3.1	Programmstruktur	9
2.3.2	Codierung des Rechenmodells	11
2.3.2.1	Partikelbruch nach dem Drückkessel-Modell	11
2.3.2.2	Partikelbruch aufgrund von thermischer Zersetzung der SiC-Schicht	24
3.0	Anwendungsbeispiele	27
3.1	Parametrische Untersuchung des Partikelbruchs	27
3.1.1	Störfalltemperatur	28
3.1.2	Bestrahlungsbedingungen	34
3.1.3	Partikeleigenschaften	36
3.2	Nachrechnung von Störfallsimulationsexperimenten	41
3.2.1	CHST-Rampenexperimente	41
3.2.2	Bestrahlungsexperiment R2-K13	47
3.2.2.1	Ausheizung mit Temperaturrampe	47
3.2.2.2	Ausheizung mit konstanter Glühtemperatur	50
3.3	Partikelbruch unter HTR-Störfallbedingungen	51
3.3.1	HTR-Modul	52
3.3.2	HTR-500	55
4.0	Zusammenfassung	59
	Literaturverzeichnis	61
	Verzeichnis der häufig verwendeten Symbole	65

Danksagung	67
A.0 Input-Beschreibung	69
B.0 PANAMA - Programmschema und -Listing	79
C.0 Input - Output	95

1.0 EINLEITUNG

Im Jahre 1979 ist der Referenz-Brennstoffzyklus für künftige Hochtemperaturreaktoren von Brennstoff mit hoch angereichertem (HEU) auf Brennstoff mit niedrig angereichertem Uran (LEU) umgestellt worden. Aus verschiedenen Konzepten hat man sich auf ein Referenz-Kugelbrennelement geeinigt, welches ca. 10000 Partikeln mit UO_2 -Brennstoffkern und TRISO-Beschichtung¹ enthält. Die wichtigsten Zieleigenschaften dieses Referenzkonzeptes sind in der Tabelle 1.1 zusammengetragen. Charakteristisches Merkmal der TRISO-Beschichtung ist eine Siliziumkarbid-Schicht, die als wesentliche Spaltproduktbarriere fungiert. Kriterium für ein defektes Partikel ist die nicht mehr intakte SiC-Schicht.

Der Anteil defekter Partikeln unter Normalbetriebsbedingungen ist durch den herstellungsbedingten und den bestrahlungsbedingten Bruch der beschichteten Brennstoffteilchen gegeben. Die jeweiligen Zielvorgaben sind aus dem Entwicklungsprogramm für den früheren HEU-Referenzbrennstoff übernommen worden. Der Relativanteil für herstellungsbedingten Partikelbruch beträgt $\leq 6 * 10^{-5}$ und ist bei der Produktion von AVR-Nachladungen (insgesamt 40000 Stück) bereits bestätigt worden; für den bestrahlungsbedingten Partikelbruch liegt der Zielwert bei $\leq 2 * 10^{-4}$, der im Rahmen des laufenden LEU Erprobungsprogramms abgesichert werden muß.

Die Beschichtung von Brennstoffkernen erfüllt drei wichtige Funktionen: die Trennung des Spaltstoffs von der Umgebung, die Rückhaltung von Spaltprodukten und den Schutz des Spaltstoffs gegen mechanische und chemische Einflüsse von außen. Auch wenn das kugelförmige Brennelement diese

¹ TRISO kennzeichnet die Beschichtungsfolge: poröse Pufferschicht / dichte Pyrokohlenstoffschicht (iLTI) / dichte Siliziumkarbidschicht (SiC) / dichte Pyrokohlenstoffschicht (oLTI)

Tabelle 1.1: Referenz-Brennelement mit UO_2 -TRISO-Partikeln

Brennelement	Brennstoffpartikel	
	Partikelkern	Beschichtung
Kugelbrennelement \varnothing 6 cm	UO_2 -Kern \varnothing 500 μ m	Puffer Dicke 95 μ m
Brennstoffzone \varnothing 5 cm	LEU - Zyklus	iLTI " 40 μ m
Schwermetallgehalt 7 g/BE	U-235-Anr. 8 Prozent	SiC " 35 μ m
		oLTI " 35 μ m

Eigenschaften in sekundärer Rolle übernimmt, muß in erster Linie die mechanische Integrität der Partikelbeschichtung erhalten bleiben. Dies wird durch den Aufbau des Spaltgas- und Kohlenmonoxid drucks während der Bestrahlung und in Störfällen erschwert (im Extrem: Druckkesselversagen); außerdem können einzelne Schichten durch Bestrahlungseinfluß, chemische Wechselwirkung mit Spaltprodukten, etc. geschwächt bzw. zerstört werden.

In den letzten 17 Jahren der Brennstoffentwicklung für den Hochtemperaturreaktor wurde beträchtlicher Aufwand getrieben, um mathematische Methoden zu entwickeln, die verschiedenen Formen des Partikelbruchs vorherzusagen. Die frühen Modelle konzentrierten sich auf die Berechnung der Spannungsverteilung innerhalb der Schichten. Erst mit der Einführung von Bruchkriterien wurde die Berechnung der mittleren Partikellebensdauer möglich. Als besonders erfolgreich erwies sich das Konzept des Vergleichs der in der SiC-Schicht induzierten Spannung mit dem Wert für die SiC-Zugfestigkeit, die unabhängig ermittelt werden kann.

Ein weiterer wichtiger Schritt in der Modellentwicklung war die Kombination der gemessenen Verteilung der SiC-Festigkeit mit der berechneten

Spannungsverteilung; erst dies erlaubte die Nachrechnung von Experimenten mit kleinen Bruchraten.

Zwischenzeitlich war die Partikelentwicklung soweit fortgeschritten, daß klassisches Druckkesselversagen innerhalb vorgegebener experimenteller Erfassungsgrenzen nicht mehr beobachtet werden konnte. Auch der Erweiterung der Modelle auf chemische Effekte blieb der experimentelle Nachweis weitgehend versagt, da wegen des fortgeschrittenen Stands der Brennstoffentwicklung die ausgewählten Referenzpartikeln unter weitgehend anlagenspezifischen Tests keine ausgeprägten Fehlermechanismen mehr zeigten.

Dennoch soll nicht vergessen werden, daß - vor mehr als 10 Jahren - Bestrahlungstests mit Sonderpartikeln zum experimentellen Nachweis der Modellvorstellungen herangezogen wurden. Die Nachweisbarkeit des Modells mit modernen TRISO-Partikeln beschränkt sich darauf, daß Bruchvorhersagen im Bereich 10^{-15} bis 10^{-4} mit experimentellen Befunden von durchgehend $\leq 10^{-4}$ konsistent sind.

Im Rahmen dieser Entwicklung spielte die Weiterverfolgung von Teilmodellen und die Etablierung der wesentlichen Eingabeparameter eine wichtige Rolle: neben den mittleren Partikeldimensionen ist auch deren Verteilung erforderlich. Heutzutage sind verlässliche Angaben aus der Qualitätskontrolle jeder einzelnen Beschichtungscharge eine Selbstverständlichkeit. Die Freisetzung der Spaltedelgase Xenon und Krypton wird für die verschiedenen Brennstoffsorten als Funktion der Temperatur, der Zeit und des Abbrandzustandes beschrieben. Für die lange Zeit quantitativ nicht faßbare CO-Freisetzung liegen erste brauchbare Modelle, auch für Temperaturtransienten, vor. Nach der Spröbruchtheorie von Griffith wird eine Weibullverteilung für die Zugfestigkeit des SiC erwartet. Dies konnte in aufwendigen Messungen experimentell mit hoher Präzision verifiziert werden.

Trotz aller Erfolge wird das Modell zur Vorhersage des Partikelbruchs gegenwärtig kaum noch angewendet. Die Spezifikationen sind eingefroren,

Bestrahlungstests dienen der Ermittlung der Spaltproduktfreisetzung aus intakten bzw. einem sehr kleinen Anteil ($\approx 10^{-5}$) von herstellungsbedingt defekten Partikeln. Die vorliegenden, verfeinerten Modellvorstellungen sind für technische Anwendungen nur mühsam brauchbar.

Ein neuer Anwendungsbereich ergibt sich nunmehr bei der Partikelbruchvorhersage im Störfallbereich. Dies steht im Zusammenhang mit der Entwicklung von Hochtemperaturreaktoren, bei denen auch in extremen Störfällen aufgrund der inhärenten Sicherheitseigenschaften keine Evakuierung der Bevölkerung erforderlich ist, und bei denen der kommerzielle Anlagenschaden begrenzt bleibt.

Glücklicherweise vereinfachen sich die erforderlichen Modelle beim Übergang vom Normalbetrieb zum Störfall beträchtlich. Ab Temperaturen oberhalb von 1200 °C bis 1400 °C und in Abwesenheit von Neutronen brauchen nur mehr die Eigenschaften der SiC-Beschichtung für die mechanische Festigkeit betrachtet werden.

Auf der Grundlage des Bruchmodells für TRISO-Partikel nach Nabielek und Martin /1/ ist ein Computercode - PANAMA - entstanden, der die theoretische Vorhersage des TRISO-Partikelbruchs als Funktion der Zeit und der Temperatur infolge des Druckkessel-Modells ermöglicht. Dieser Code ist anschließend um einen weiteren Versagensmechanismus von TRISO-Partikeln erweitert worden, nämlich der thermischen Zersetzung der SiC-Schicht /8/, so daß auch eine Vorhersage von Partikeldefekten bei Störfalltemperaturen oberhalb von 2000 °C möglich ist.

Der vorliegende Report gibt nun zunächst in Kapitel 2 eine Beschreibung des dem Code PANAMA zugrunde liegenden Rechenmodells. Hier werden die Eigenschaften sowie der Aufbau und Ablauf des Rechenprogramms für die beiden erwähnten Versagensmechanismen von TRISO-Partikeln dargestellt. In dem nachfolgenden Kapitel 3 werden dann anhand verschiedener Anwendungsbeispiele einerseits die Funktionsweise des Rechenprogramms, andererseits die Nachrechnung bestimmter Bestrahlungs- und Ausheizexperimente sowie ggfs. ihr Vergleich mit experimentellen Werten dargestellt. Im Anhang

schließlich wird eine genaue Beschreibung der INPUT-Daten für das Rechenprogramm geliefert.

Für potentielle Anwender in der KFA steht der Code PANAMA als Object auf "USER.ISF000.OBJECT" unter der Bezeichnung "ISF34PAN" zur Verfügung.

2.0 BESCHREIBUNG DES RECHENMODELLS

2.1 MODELLVORSTELLUNG

Das Versagen eines TRISO-beschichteten Partikels während der Bestrahlung und unter Störfallbedingungen mit Temperaturen bis 2000 °C basiert auf dem Druckkessel-Modell, wobei die Siliziumcarbid-Schicht die eigentliche Rückhaltebarriere für Spaltprodukte darstellt. Danach wird ein Partikel defekt, sobald die infolge des sich im Innern aufbauenden Gasdrucks in der SiC-Schicht induzierte Spannung die Zugfestigkeit für das SiC übersteigt.

Die Materialeigenschaft "Zugfestigkeit" wird durch die Bestrahlungsgeschichte sowie durch eine evtl. Korrosion der SiC-Korngrenzen bei ansteigenden Störfalltemperaturen beeinflusst.

Das Versagen von TRISO-Partikeln bei Störfalltemperaturen oberhalb von 2000 °C ist auf eine thermische Zersetzung oder Dissoziation der Siliziumcarbidsschicht zurückzuführen, wobei sich das SiC in gasförmiges Silizium und festes Graphit zerlegt. Dieser Vorgang kann mit Hilfe einer Verdünnungsrate der SiC-Schicht beschrieben werden. Der Anteil der Defektpartikeln infolge der thermischen Zersetzung wird dann dargestellt als Funktion eines sogenannten "Aktionsintegrals", einem Parameter, in dem die integrale Temperatur- und Zeitgeschichte der Partikeln eingeht. Weiterhin notwendige Konstanten sind aus Experimenten gewonnen worden.

Die Kopplung der verschiedenen Versagensmechanismen zu einem Gesamtpartikelbruchmodell ist gegeben durch

$$\phi_{\text{gesamt}} = 1 - (1 - \phi_0) * (1 - \phi_1) * (1 - \phi_2)$$

ϕ_1 und ϕ_2 entsprechen dabei den beiden oben beschriebenen Arten des Versagens von TRISO-Partikeln. ϕ_0 steht für den herstellungsbedingten Parti-

kelbruchanteil. Für die in diesem Bericht beschriebenen Anwendungen des Rechenmodells wurde

$$\phi_0 = 0$$

angenommen, kann jedoch ohne weiteres bei der Betrachtung von Reaktorkonzepten auf seinen Zielwert von $6 * 10^{-5}$ gesetzt werden.

2.2 EIGENSCHAFTEN DES RECHENPROGRAMMS

Mit der Erweiterung des Rechenmodells auf den TRISO-Partikelbruch infolge thermischer Zersetzung der SiC-Schicht kann der Code PANAMA hinsichtlich des Temperaturbereiches auf alle Störfallsequenzen eines HTR mit kleiner und mit großer Leistung angewendet werden. Durch Vorgabe von Zeitschrittweiten läßt sich die Temperatur im Störfall dabei auch als Transiente erfassen.

Als weitere wichtige, den Partikelbruch beeinflussende Komponente geht die Bestrahlungsvorgeschichte in das Rechenmodell ein. Diese kann ebenfalls als Funktion der Bestrahlungszeit vorgegeben werden und dient dazu, mit Hilfe des sich während der Bestrahlung im Partikel aufbauenden Gasdrucks einen Mittelwert für die Bestrahlungstemperatur zu erzeugen, der in der nachfolgenden Rechnung dann weiter verwendet wird.

Die Geometrie der TRISO-Partikeln kann beliebig vorgegeben werden, wobei nur die Anzahl der Zonen (5) und deren Position fest vorgegeben ist. Hinsichtlich der Art des Partikelkerns ist das Rechenmodell derzeit ausgelegt für Partikel mit $(Th,U)O_2$ - oder mit UO_2 -Kernen.

2.3 AUFBAU UND ABLAUF DES RECHENPROGRAMMS

2.3.1 PROGRAMMSTRUKTUR

Das Programm startet mit dem Lesen und der Aufarbeitung der für die Rechnung notwendigen Eigenschaften. Hierzu gehören die Geometrie des Partikels und seiner Beschichtung sowie die Art des Partikelkerns. Zur Beschreibung des 1. Versagensmechanismus - Druckkessel-Modell - sind andere einzulesende Partikeleigenschaften die Zugfestigkeit der SiC-Schicht sowie der Weibull-Parameter, beide im unbestrahlten Zustand, außerdem Parameter, die im wesentlichen die Bestrahlungsgeschichte der Partikel betreffen, wie der Abbrand, die Fluenz schneller Neutronen sowie Bestrahlungszeit und -temperatur. Für die Beschreibung des 2. Versagensmechanismus sind neben der Temperatur- und Zeitgeschichte des Störfallaufbaus noch zwei empirisch ermittelte Konstanten notwendig, die ebenfalls per Input vorgegeben werden.

Eine ausführliche Beschreibung der Input-Daten wird im Anhang A gegeben.

Für die Berechnung der jeweiligen Anteile defekter Partikel entsprechend den beiden modellierten Versagensmechanismen ϕ_1 und ϕ_2 wird die Störfallzeit in Intervalle unterteilt, für die jeweils eine mittlere Störfalltemperatur vorherrscht. Die Länge des Zeitintervalls hat bei konstanter Temperatur keinen Einfluß auf das Rechenergebnis. Sie ist eine Input-Größe und sollte so festgelegt sein, daß eine Temperaturtransiente hinreichend genau nachvollzogen wird. ϕ_1 und ϕ_2 werden unabhängig voneinander ermittelt und anschließend - wie oben beschrieben - miteinander kombiniert.

Bei der Berechnung von ϕ_1 wird in einem ersten Schritt zunächst der Anteil der Defektpartikeln bei Ende der Bestrahlung als Funktion der Bestrahlungsgeschichte ermittelt. Diese ist wesentlich insbesondere für den De-

fektanteil von TRISO-Partikeln mit UO_2 -Kernen aufgrund des sich dabei aufbauenden CO-Drucks. Aus diesem Grund wird bei einer zeitlich variabel vorgegebenen Bestrahlungstemperatur der CO-Druckaufbau während der Bestrahlungszeit sukzessive nachvollzogen und aus dem Endwert rückwärts wieder eine mittlere Bestrahlungstemperatur gebildet, mit der dann weitergerechnet wird. Die Intervalllänge für die Bestrahlungszeit (z.B. 1 d) ist wiederum eine Input-Größe.

Während des Störfalls (bzw. des Glühversuchs) wird nun für das Zeitintervall zwischen t_1 und t_2 sowie der zugehörigen mittleren Störfalltemperatur T_m der Anteil der Defektpartikeln infolge des Druckkesselversagens (ϕ_1) zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 errechnet. Die Differenz zwischen beiden Werten

$$\Delta\phi_1 = \phi_1(t_2, T_m) - \phi_1(t_1, T_m)$$

wird - falls sie größer als 0 ist - dann zum aktuellen ($= t_1$) Gesamtanteil des Partikelbruchs addiert und der neue Wert dem Zeitpunkt t_2 zugeordnet. Der Anfangswert des Partikelbruchs ϕ_1 zum Zeitpunkt $t = 0$ ist durch den Wert bei Ende der Bestrahlung gegeben.

Zur Berechnung von ϕ_2 , dem Anteil der Defektpartikeln infolge thermischer Zersetzung, genügt im wesentlichen die Auswertung einer Exponentialfunktion, in deren Basis, das bereits erwähnte "Aktionsintegral" ζ , die gesamte Störfalltemperatur- und -zeitgeschichte eingeht. ζ ist eine mit jedem Zeitintervall stetig wachsende Größe, mit deren Wert zum Zeitpunkt t_2 dann unmittelbar der Partikelbruchanteil zu diesem Zeitpunkt $\phi_2(t_2)$

bestimmt wird. Die Defektrate ϕ_2 ergibt sich somit aus der Differenzbildung von $\phi_2(t_2)$ und $\phi_2(t_1)$ sowie der Zeitschrittweite. Auf dieselbe Art und Weise wird auch die Gesamtpartikelbruchrate ermittelt.

Eine Beschreibung der Ausgabe wird zusammen mit einem Beispiel im Anhang C gegeben.

2.3.2 CODIERUNG DES RECHENMODELLS

2.3.2.1 Partikelbruch nach dem Druckkessel-Modell

Der Anteil der defekten Partikeln zum Zeitpunkt t nach Störfallbeginn bei einer Temperatur T wird bestimmt durch /1/:

$$\phi_1(t, T) = 1 - e^{-\ln 2 * (\sigma_t / \sigma_o)^m} \quad (1)$$

Dabei ist

σ_o die SiC-Zugfestigkeit bei Ende der Bestrahlung [Pa]

σ_t die aufgrund des inneren Gasdrucks in der SiC-Schicht induzierte Spannung [Pa]

Die Festigkeitswerte für das SiC streuen entsprechend einer Weibull-Verteilung, wobei m den Weibull-Parameter angibt (siehe auch Abb. 3.9).

Die Berechnung der unbekanntenen Größen σ_t , σ_o und m wird in den folgenden Abschnitten erläutert.

Induzierte Spannung im Siliziumcarbid σ_t

Die im SiC induzierte Spannung wird - unter Annahme einer dünnen Schale - bestimmt gemäß der Gleichung

$$\begin{aligned}\sigma_t &= r * p / (2 * d_{akt}) \\ &= r * p / (2 * d_o * (1 - v * t))\end{aligned}$$

jedoch beschreibt die folgende Näherungsformel für σ_t den Sachverhalt insbesondere für kleine "aktuelle" SiC-Schichtdicken (d_{akt}) realistischer

$$\sigma_t = r * p / (2 * d_o) * (1 + v * t / d_o) \quad (2)$$

Hierbei bedeuten

r der mittlere Radius der SiC-Schicht [m]

$$r = ((r_a^3 + r_i^3) / 2)^{1/3}$$

mit dem Innenradius r_i und dem Außenradius r_a

d_o die ursprüngliche Dicke der SiC-Schicht [m]

$$d_o = r_a - r_i$$

p der Spaltgasdruck im Partikel [Pa]

v die Korrosionsrate als Funktion von T [m/s]

Spaltgasinnendruck p

Der Spaltgasinnendruck p aus Gleichung (2) läßt sich aus der idealen Gasgleichung ermitteln

$$p = (F_d * F_f + OPF) * F_b / (V_f / V_k) * R * T / V_m \quad (3)$$

Dabei bedeuten

F_d der Relativanteil der Spaltgasfreisetzung

OPF die Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung

V_m das molare Volumen im Partikelkern [m^3 /Mol]

sowie

$F_f = 0.31$ die Spaltproduktausbeute der stabilen Spaltgase

F_b der Schwermetallabbrand [FIMA]

V_k das Kernvolumen [m^3]

V_f das Leervolumen [m^3], entsprechend 50 Prozent des Puffervolumens

$R = 8.3143$ [J/(Mol*K)] die Gaskonstante

Letztere Größen sind vorgegeben oder lassen sich aus den Eingangsdaten ableiten. Die ersten drei Größen werden nach den im folgenden erklärten Gleichungen berechnet.

Relativanteil der Spaltgasfreisetzung F_d

Für die relative Freisetzung der Spaltgase Xe und Kr gilt /2/:

$$F_d = ([\tau_i + \tau_a] * f(\tau_i + \tau_a) - \tau_a * f(\tau_a)) / \tau_i \quad (4)$$

wobei

$$f(\tau) = 1 - 6/\tau \sum_{n=1}^{\infty} ((1 - e^{-n^2 \pi^2 \tau}) / n^4 \pi^4)$$

Die "unendliche" Summe wird abgebrochen entweder nach 1000 Summanden (Warnung!), oder wenn sich zwei aufeinanderfolgende Summanden um nicht mehr als 10^{-20} unterscheiden. Der Verlauf der Funktion $f(\tau)$ ist in der folgenden Abbildung 2.1 dargestellt.

Die dimensionslosen Argumente τ der Funktion f sind gegeben durch

$$\tau_i = DS(T_B) * t_B$$

$$\tau_a = DS(T) * t$$

Dabei bedeuten

T_B die Bestrahlungstemperatur [K]

t_B die Bestrahlungszeit [s]

t die Störfallzeit [s]

DS der *reduzierte*² Diffusionskoeffizient [s^{-1}] der Spaltgase im Partikelkern

$DS(T)$ ist von der Art des Partikelkerns abhängig (Abb. 2.2).

² $DS := D_{\text{eff}} / r_o^2$ mit r_o : Partikelkernradius

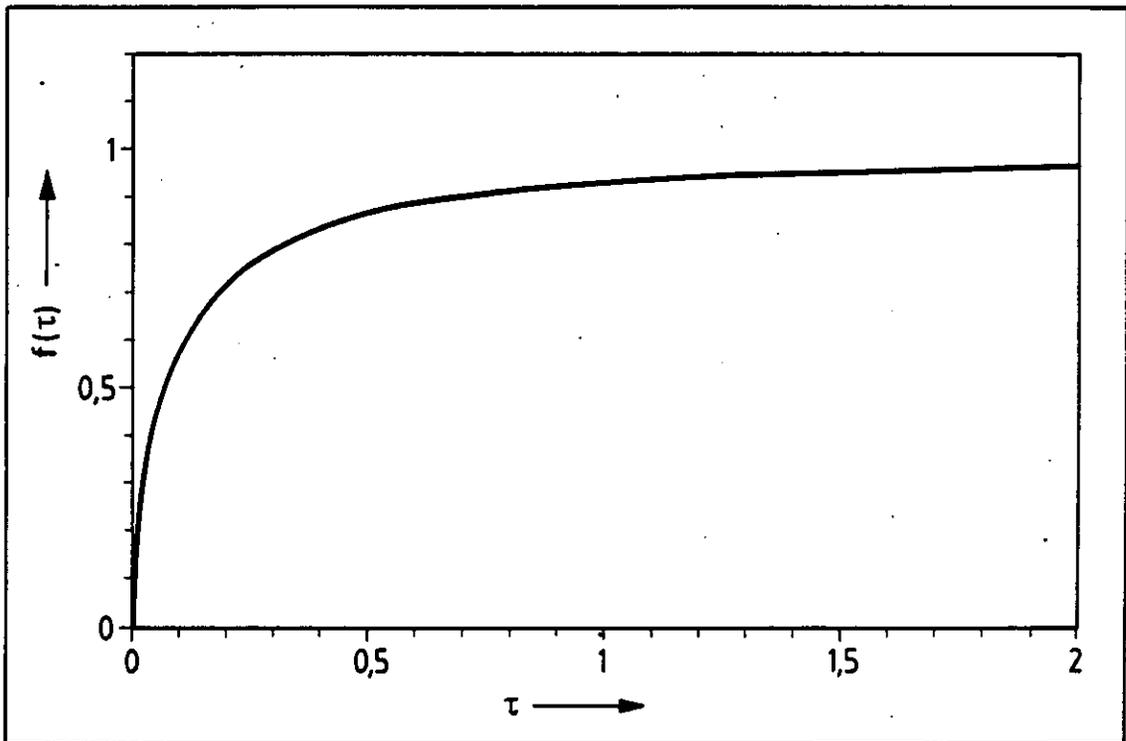


Abb. 2.1: Qualitativer Verlauf der Funktion $f(\tau)$

Für $(\text{Th,U})\text{O}_2$ gilt eine vom Abbrand F_b abhängige Beziehung /3/:

$$\log DS = - 5.94 + 3.24/(1+0.11/F_b) - 0.5460 \cdot 10^4/T$$

Für UO_2 gilt /4/:

$$\log DS = - 2.30 - 0.8116 \cdot 10^4/T$$

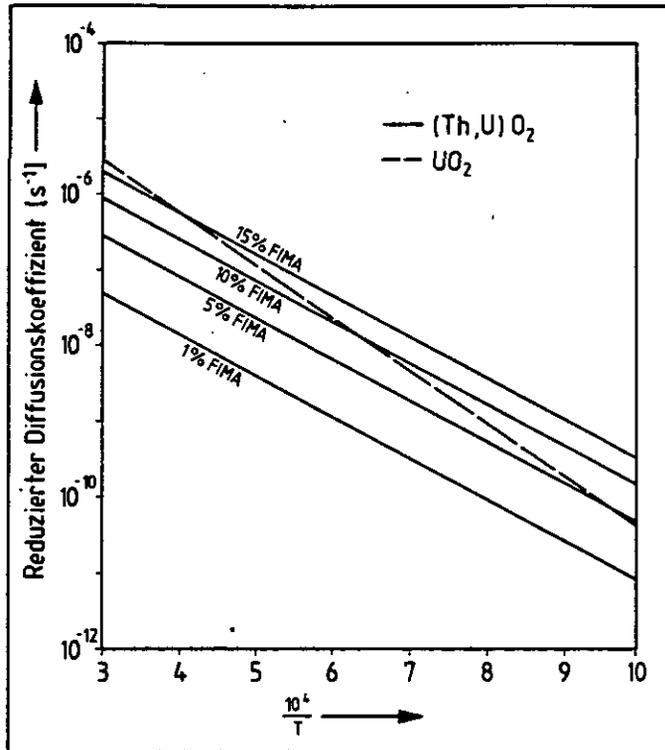


Abb. 2.2: Reduzierter Diffusionskoeffizient für die Spaltgase
im Partikelkern

Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung OPF

Die Anzahl der Sauerstoffatome, die bei der Spaltung eines U-235- oder Pu-239-Kerns freigesetzt werden und damit für eine CO-Bildung zur Verfügung stehen, bestimmt den sich im Partikelkern aufbauenden Gasdruck, der von der Temperatur und der Zeit sowie in hohem Maße auch von der Art des Partikelkerns abhängt.

Für $(\text{Th,U})\text{O}_2$ gilt /5/ (gestrichelte Kurve in Abb. 2.3):

$$\log \text{OPF} = 1.00 - 0.441 \cdot 10^4 / T + 0.5 \cdot \log (N \cdot F_b) \quad (5a)$$

mit

N Verhältnis Thorium/Uran-235

(z.B. N = 5 für AVR, N = 10 für THTR)

Die Sauerstoffbildung in UO_2 -Kernen ist stark von der Bestrahlungsvorgeschichte abhängig. Aus den Untersuchungsbereichen des vorliegenden Datenmaterials von einer Bestrahlungszeit zwischen 66 und 550 VLT und einer Bestrahlungstemperatur zwischen 950 und 1525 °C läßt sich folgende Beziehung /6/ ableiten:

vor Beginn der Glühung:

$$\log OPF = - 10.08 - 0.85 \cdot 10^4 / T_B + 2 \cdot \log t_B \quad (5b)$$

während der Glühung:

$$\begin{aligned} \log OPF = & - 10.08 - 0.85 \cdot 10^4 / T_B + 2 \cdot \log t_B \\ & - 0.404 \cdot (10^4 / T - 10^4 / (T_B + 75)) \end{aligned} \quad (5c)$$

Die Korrektur der Bestrahlungstemperatur um 75 Grad in Gleichung (5c) trägt der Tatsache Rechnung, daß T_B als Oberflächentemperatur definiert ist, während die die Freisetzung bestimmende Temperatur in einem UO_2 -TRISO-Partikel etwa 75 Grad darüber liegt /19/.

Die Gleichungen (5b) und (5c) beinhalten eine quadratische Abhängigkeit von der Bestrahlungsdauer t_B . Die Kurvenschar in der Abb. 2.3 veranschaulicht eine Variation der Bestrahlungstemperatur T_B und -zeit t_B .

Die Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung wird nach oben begrenzt durch

$$OPF_{\max} = 0.625 \quad (5d)$$

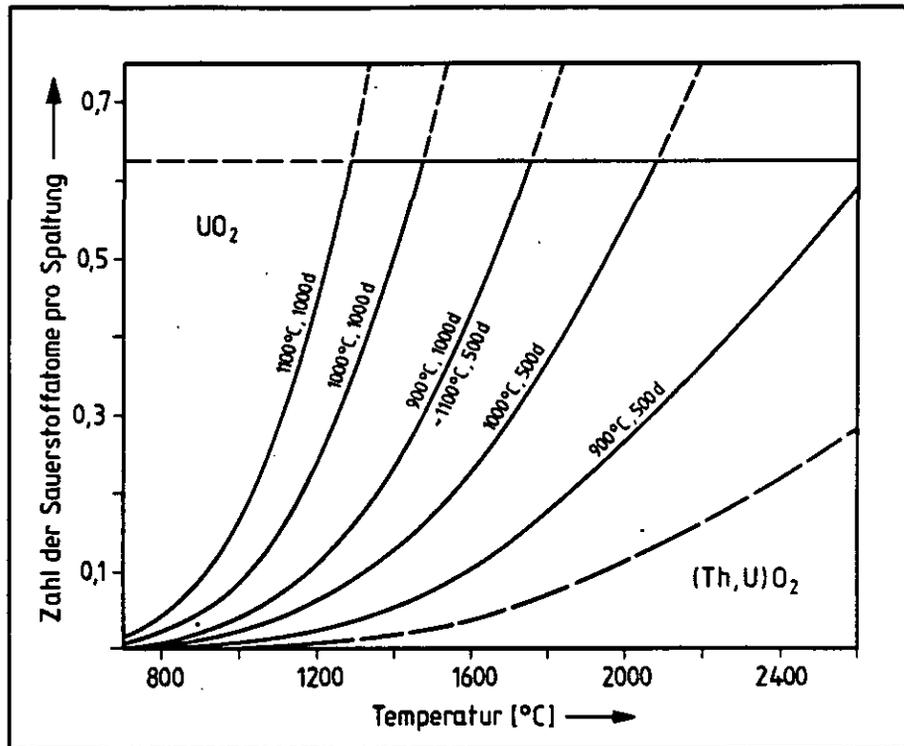


Abb. 2.3: Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung für $(\text{Th,U})\text{O}_2$ - und UO_2 -Partikel als Funktion der Störfalltemperatur. Im Falle von UO_2 spielen die Bestrahlungstemperatur T_B und die Bestrahlungszeit t_B eine wesentliche Rolle.

ein Wert, der bei $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Brennstoff allerdings erst bei Glühtemperaturen oberhalb von 5700 K überschritten würde.

Die Gleichungen (5b) und (5c) bei Partikeln mit UO_2 -Kern gelten für eine konstante Bestrahlungstemperatur. Wie die Abb. 2.3 zeigt, bildet bei solchen Partikeln die Bestrahlungsvorgeschichte einen entscheidenden Parameter für den im Partikelinneren entstehenden CO-Druck.

Aus diesem Grunde wird im Falle variabler Bestrahlungsbedingungen, wie sie im Normalbetrieb eines HTR vorherrschen, zur Festlegung der Größe OPF

zum Zeitpunkt $t = 0$ sowie einer mittleren Bestrahlungstemperatur die Vorgeschichte der Bestrahlung realistischer nachvollzogen. Dazu wird die Bestrahlungszeit in verschiedene Zeitintervalle (Festlegung der Länge z.B. auf 1 d) unterteilt und für jedes der von der zugehörigen Bestrahlungstemperatur abhängigen Beitrag der Sauerstoffbildung ermittelt und zu einem Gesamtwert von OPF aufaddiert.

In Analogie zum Gesetz des freien Falls läßt sich Gleichung (5b) umformulieren in

$$\text{OPF} = 0.5 * g(T) * t^2$$

mit

$$0.5 * g(T) := 8.32 * 10^{-11} * e^{-163000/(R*T)}$$

Bei zeitlich variabler Bestrahlungstemperatur folgt aus

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{d}{dt} \text{OPF} \right) = g(T)$$

durch 2-fache Integration über die Zeit

$$\begin{aligned} \text{OPF} &= \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' g(T(t')) \\ &= \int_0^t dt' (t-t') * g(T(t')) \end{aligned}$$

bzw. für die numerische Berechnung

$$\text{OPF} \approx \sum_{i=1}^n g(t_i) * (t-t_i) * \Delta t_i \quad (5e)$$

Dabei bedeuten

Δt_i i-tes Bestrahlungszeitintervall [s]

t_i Zeitpunkt in der Mitte von Δt_i [s]

t Gesamtbestrahlungsdauer [s]

n Anzahl der Bestrahlungszeitintervalle

Aus dem so ermittelten OFF-Wert bei Ende der Bestrahlung lässt sich dann rückwärts wiederum aus Gleichung (5b) eine mittlere (konstante) Bestrahlungstemperatur errechnen, die in den nachfolgenden Rechenschritten weiter verwendet wird.

Molares Volumen im Partikelkern V_m

Das molare Volumen des Schwermetalls in einem Partikelkern ist definiert durch das Verhältnis des Gewichts eines Mols des Kernmaterials zu seiner Dichte.

Für (Th,U)O₂ gilt

$$\begin{aligned} V_m &= 0.2645 \text{ [kg/Mol]} / 10500 \text{ [kg/m}^3\text{]} \\ &= 2.51905 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^3\text{/Mol]} \end{aligned} \quad (6a)$$

Für UO₂ gilt

$$\begin{aligned} V_m &= 0.2672 \text{ [kg/Mol]} / 10960 \text{ [kg/m}^3\text{]} \\ &= 2.43796 \cdot 10^{-5} \text{ [m}^3\text{/Mol]} \end{aligned} \quad (6b)$$

SiC-Schicht-Verdünnung durch Volumenkorrosion

Aus Gleichung (2) ergibt sich für die aktuelle Dicke der SiC-Schicht bei konstanter Temperatur

$$d_{\text{akt}} = d_o / (1 + \dot{v} \cdot t / d_o) =: d_o / \text{FKOR} \quad (7)$$

Der Wert der Größe FKOR zur Zeit t_2 am Ende des Zeitintervalls läßt sich somit aus dem Wert zur Zeit t_1 aufbauen:

$$\text{FKOR}(t_2) = \text{FKOR}(t_1) + \dot{v}(T_m) \cdot (t_2 - t_1) / d_o$$

$\text{FKOR}(t_2)$ wird später dann dem Startpunkt des nächstfolgenden Zeitintervalls zugeordnet.

\dot{v} entspricht einer Korrosionsgeschwindigkeit als Funktion der Temperatur T bzw. der mittleren Temperatur T_m . Sie ist nach Montgomery /7/ gegeben durch

$$\dot{v} = 5.87 \cdot 10^{-7} \cdot e^{-179500/(R \cdot T)} \quad [\text{m/s}]$$

In Abb. 2.4 ist die Verkleinerung der Dicke der SiC-Schicht durch Volumenkorrosion für verschiedene isotherme Ausheiztemperaturen dargestellt.

Zugfestigkeit der Siliziumcarbidschicht σ_o

Die SiC-Zugfestigkeit σ_{oo} eines noch unbestrahlten Partikels ist eine Eigenschaft, die gemessen wird. Während der Bestrahlung wird eine Abnahme dieser Zugfestigkeit angenommen /2/ gemäß der Gleichung:

$$\sigma_o = \sigma_{oo} \cdot (1 - \Gamma / \Gamma_s) \quad (8a)$$

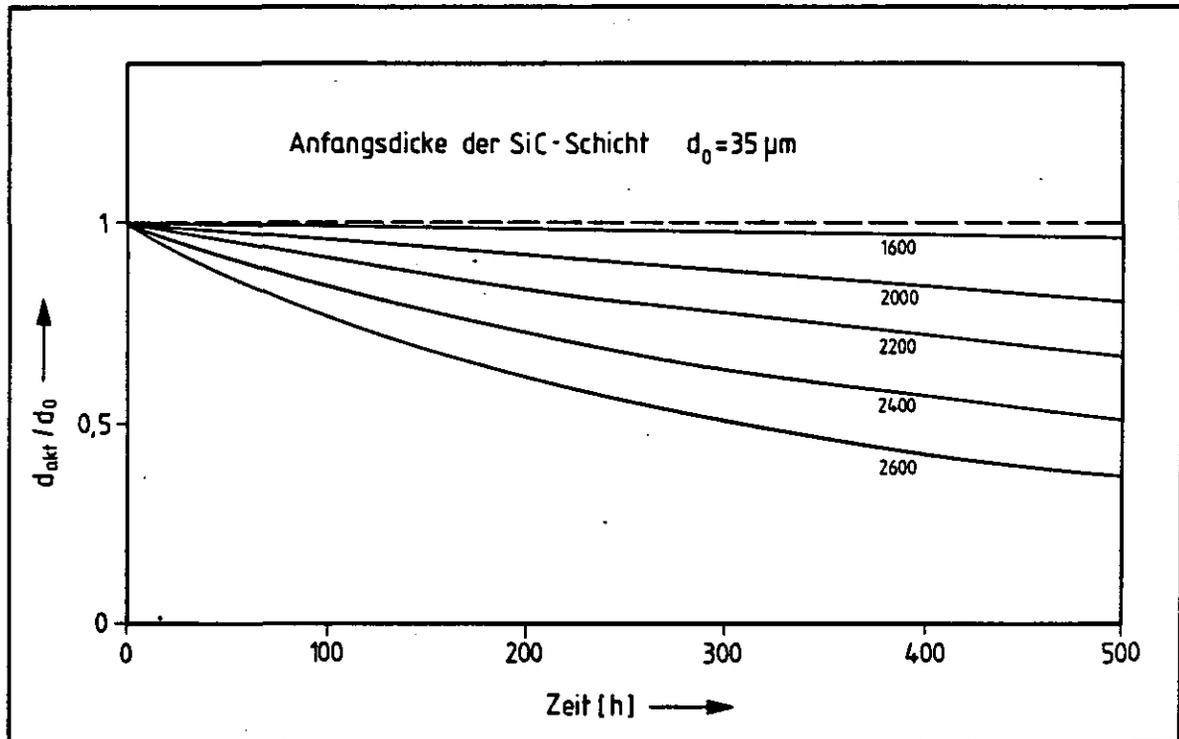


Abb. 2.4: Verringerung der SiC-Schichtdicke als Funktion der Zeit für verschiedene konstante Ausheiztemperaturen

Dabei bedeutet

Γ die Fluenz der schnellen Neutronen [$10^{25} \text{ m}^{-2} \text{ EDN}$]

Γ_s ist abhängig von der Bestrahlungstemperatur und wird bestimmt nach

$$\log \Gamma_s = 0.556 + 0.065 \cdot 10^4 / T_B$$

Als unterste Grenze für die SiC-Zugfestigkeit wird angesetzt:

$$\sigma_{o,\min} = 196 \text{ [MPa]} \quad (8b)$$

Weibull-Parameter m

Der Weibull-Parameter, der die Verteilung der SiC-Zugfestigkeit über eine Anzahl von Partikeln bestimmt, wird ebenso wie die mittlere SiC-Zugfestigkeit an noch unbestrahlten Partikeln gemessen (m_{oo}). Die Abnahme der Festigkeit bei Bestrahlung drückt sich ebenfalls in einer Verkleinerung des gemessenen Parameters m_{oo} aus, was zu einer Verbreiterung der Weibull-Verteilung führt (siehe auch Abb. 3.9).

Der Weibull-Parameter nach Ende der Bestrahlung $m_o / 2$ wird bestimmt durch die Gleichung

$$m_o = m_{oo} * (1 - \Gamma/\Gamma_m) \quad (9a)$$

mit

$$\log \Gamma_m = 0.394 + 0.065 * 10^4 / T_B$$

Auch hier wird eine unterste Grenze angesetzt, nämlich

$$m_{o,min} = 2 \quad (9b)$$

Im Regelfall wird der so errechnete Weibull-Parameter in Gleichung (1) eingesetzt.

$$m = m_o \quad (10a)$$

Festigkeitsverlust der SiC-Schicht durch Korngrenzenkorrosion

Die Annahme einer Korrosion der SiC-Korngrenzen durch Spaltprodukte wird in der Regel nicht berücksichtigt, kann aber durch Setzen eines Schalters per Input angewählt werden. Danach wird während des Störfalls eine

weitere Verbreiterung der Weibull-Verteilung in Abhängigkeit von der Zeit t und der Temperatur T unterstellt gemäß

$$m = m_0 * (0.44 + 0.56 * e^{-\eta * t}) \quad (10b)$$

mit der Korngrenzen-Korrosionsrate

$$\dot{\eta} = 0.565 * e^{-187400/(R*T)} \quad [s^{-1}] \quad (10c)$$

2.3.2.2 Partikelbruch aufgrund von thermischer Zersetzung der SiC-Schicht

Die thermische Zersetzung der SiC-Schicht bei hohen Temperaturen bewirkt einen (meßbaren) Gewichtsverlust der SiC-Schicht, deren zeitlicher Verlauf als eine "Verdünnungsrate" interpretiert werden kann. Bezogen auf die Dicke der SiC-Schicht ergibt sich eine Art "Zerfallskonstante", deren Temperaturabhängigkeit sich in Form einer Arrheniusbeziehung darstellen läßt:

$$k = k_0 * e^{-Q/(R*T)}$$

Dabei ist die Aktivierungsenergie Q aufgrund von Messungen sehr gut bekannt. Ausheizexperimente /8/ an insgesamt 63 Proben von HOBEG, KFA-IRW und GA, in denen das Siliziumcarbid bei Temperaturen zwischen 1600 °C und 2200 °C zersetzt worden ist, führten zu dem Wert

$$Q = 556 \quad [kJ/Mol]$$

während der Frequenzfaktor k_0 herstellungsbedingt unterschiedlich ist für die verschiedenen Partikelsorten.

Es wird nun angenommen, daß der Bruch der TRISO-Partikeln abhängig ist von dem sogenannten "Aktionsintegral"

$$\zeta = \int_{t_1}^{t_2} k(T) dt$$

das die gesamte Temperatur-Zeit-Geschichte beinhaltet, welche die Partikeln erfahren.

Bei der numerischen Auswertung stellt sich das Aktionsintegral ζ als Summe dar, wobei die einzelnen Summanden eine Funktion der Zeitschrittweite und der mittleren Temperatur T_m in diesem Zeitintervall sind

$$\zeta(t_2) = \zeta(t_1) + k(T_m) * (t_2 - t_1) \quad (11)$$

mit

$$k(T_m) = 375 * e^{-556000/(R*T_m)} / d_o \quad [s^{-1}] \quad (12)$$

Die Funktion für den Partikelbruchanteil ϕ_2 muß nun so gewählt werden, daß $\phi_2 \leq 1$ bleibt. Eine geeignete Darstellungsform ist

$$\phi_2 = 1 - e^{-\alpha*\zeta^\beta} \quad (13)$$

mit empirisch zu ermittelnden Konstanten α und β .

Die Parameter α und β sind unterschiedlich für Glühexperimente an losen Partikeln oder an Partikeln innerhalb eines Kugelbrennelements. Temperaturrampentests bis 2500 °C an losen UO₂-TRISO-Partikeln, bestrahlt in DR-S6, ergaben die Werte /9/:

$$\alpha = 0.693 \quad (= \ln 2) \quad (14a)$$

$$\beta = 0.88$$

Glühversuche an Partikeln, die in einer Kugel eingebettet waren, (Messungen von Schenk 1984 an AVR-Brennelement des Typs G02) führten zu den Werten:

$$\alpha = 0.0001$$

(14b)

$$\beta = 4.$$

wobei diese Ergebnisse unabhängig davon sind, ob es sich um bestrahlte oder unbestrahlte Brennelemente handelt.

3.1 PARAMETRISCHE UNTERSUCHUNG DES PARTIKELBRUCHS

Im folgenden soll für verschiedene Parameter gezeigt werden, welche qualitativen und quantitativen Auswirkungen diese auf den Bruch von TRISO-Partikeln haben. Diese Empfindlichkeitsanalyse wird einerseits durchgeführt anhand von Rechnungen mit willkürlich gewählten Randbedingungen und andererseits anhand von Nachrechnungen konkreter Bestrahlungs- und Ausheizexperimente.

Wenn nicht anders angegeben, werden folgende Daten den Rechnungen als Randbedingungen zugrunde gelegt:

Tabelle 3.1: Randbedingungen für PANAMA-Rechnungen aus Kapitel 3.1
(wenn nicht anders angegeben)

Partikelkern	(Th,U)O ₂
Durchmesser Partikelkern	500 µm
Bestrahlungstemperatur	1000 °C
Bestrahlungsdauer	500 Vollasttage
Fluenz	1*10 ²⁵ m ⁻² EDN
Schwermetallabbrand	0.10 FIMA
SiC-Zugfestigkeit	834 MPa
Weibull-Parameter	8.02
Korngrenzen-Korrosionsrate	$\eta = 0$ (Gleichung (10c))
Störfalltemperatur	1600 °C
Störfallzeit	300 h
Thermische Zersetzung (ϕ_2)	$\alpha = 0.0001, \beta = 4$ (Gleichung (14b))

3.1.1 STÖRFALLTEMPERATUR

Einer der wichtigsten Parameter für den Anteil defekter Partikel unter Störfallbedingungen ist der zeitliche Verlauf der Brennelement- bzw. Partikeltemperatur. Bisher wurden Partikelbruchmodelle an experimentellen Ergebnissen mittels einer temperatur- bzw. temperatur- und zeitabhängigen Funktion angepaßt. Dagegen werden in dem hier beschriebenen Bruchmodell für TRISO-Partikel die physikalischen Prozesse, die zum Partikelversagen führen, wie z.B. der Aufbau des internen Spaltgasdrucks als Funktion der Temperatur modelliert.

Im ersten Rechenbeispiel wird ausgehend von einem Partikel mit festgelegten Eigenschaften und Bestrahlungsrandbedingungen eine willkürliche und unrealistische Temperatur-Zeit-Geschichte im Störfall angenommen. Abb. 3.1 zeigt die beiden untersuchten Fälle. Dabei werden im Untersuchungszeitraum von 300 h sowohl Temperaturrampen (Anstieg $1000\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ bzw. Abfall $2000\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 1000\text{ }^{\circ}\text{C}$) als auch konstante Temperaturen ($1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ bzw. $2000\text{ }^{\circ}\text{C}$) angenommen.

Die Temperaturverläufe sind so gewählt, daß in beiden Fällen die Partikel die gleichen Temperaturen erfahren, nur zu unterschiedlichen Zeiten.

In den Abbildungen 3.2 und 3.3 ist der Anteil des Partikelbruchs über der Zeit aufgetragen, in Abb. 3.2 für Partikel mit UO_2 -Kern und in Abb. 3.3 für Partikel mit $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Kern, jeweils für die beiden Temperaturrandbedingungen.

Der Vergleich zeigt, daß Partikel mit UO_2 -Kern einen um mehrere Größenordnungen höheren Defektanteil aufweisen als Partikel mit $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Kern. Die Ordinate erstreckt sich über 10 Größenordnungen, so daß nur die Partikelbruchzunahme bei Temperaturen um $2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ deutlich zu sehen ist. Trotz des Erreichens von $2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ erlangt der Beitrag zum Partikelbruch in-

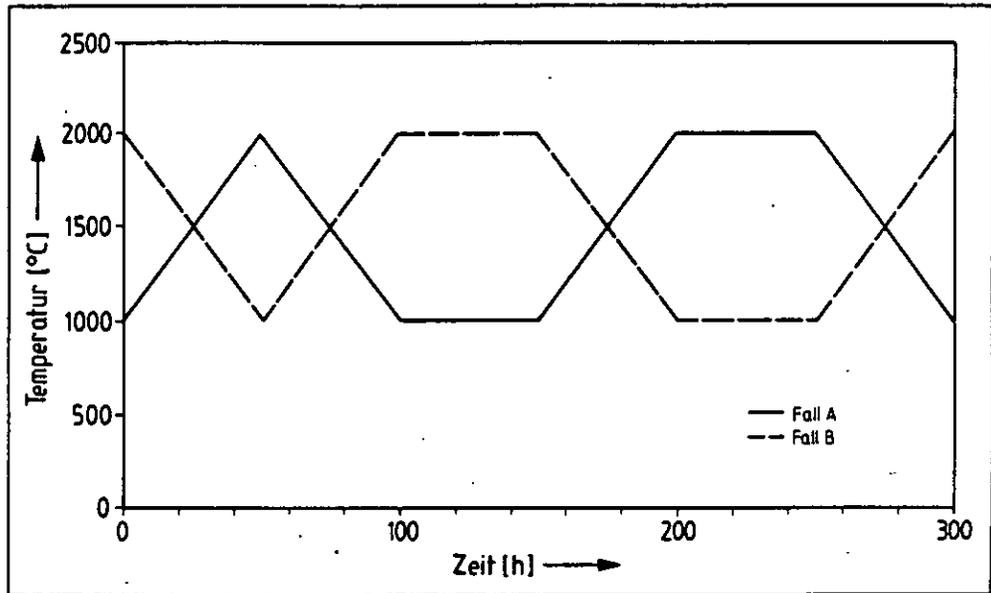


Abb. 3.1: Temperaturrandbedingung

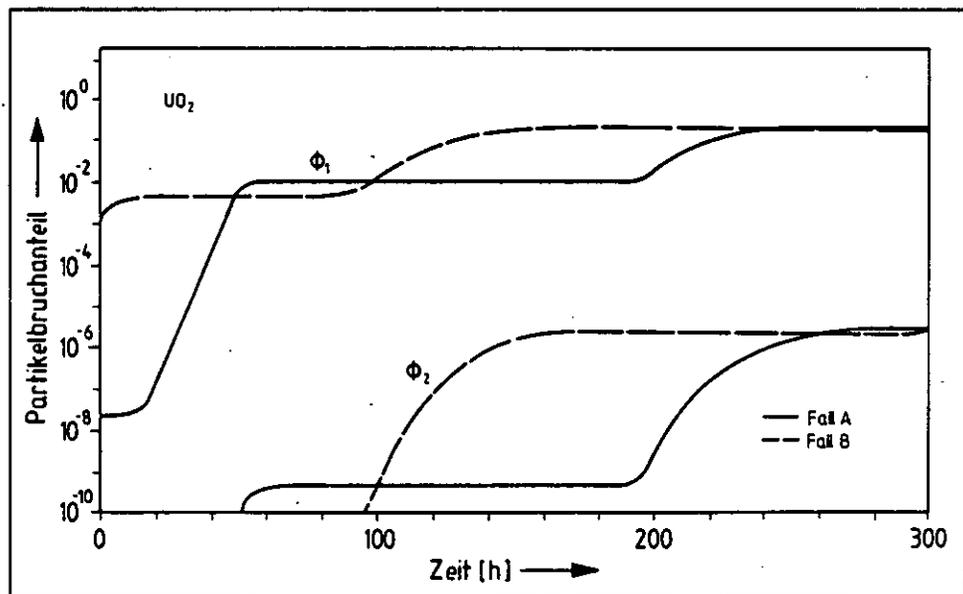


Abb. 3.2: Anteil defekter Partikel ϕ_1 bzw. ϕ_2 für UO_2 -Partikel

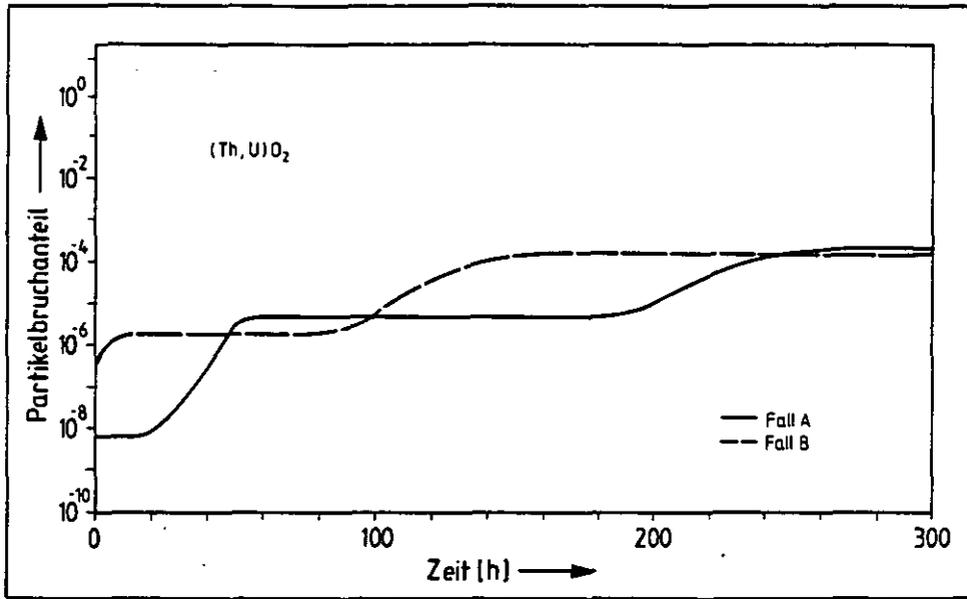


Abb. 3.3: Anteil defekter Partikel ϕ_1 für (Th,U)O₂-Partikel

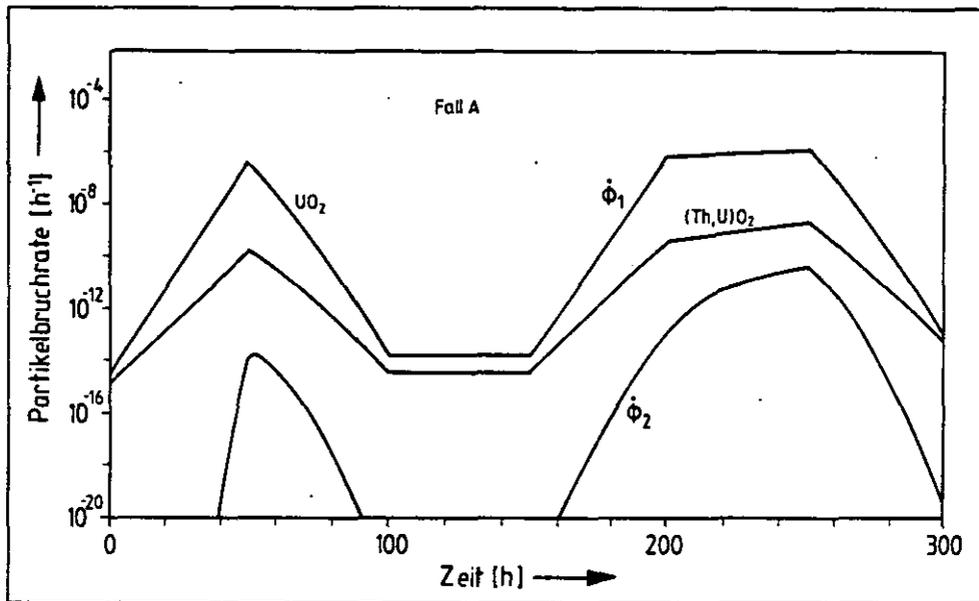


Abb. 3.4: Partikelbruchraten ϕ_1 und ϕ_2

folge von thermischer Zersetzung der SiC-Schicht im Untersuchungszeitraum keine dominierende Bedeutung, wie die zusätzlichen Kurven unten in der Abb. 3.2 zeigen. Dieser ist unabhängig von der Art des Partikelkerns und liegt hier um einige Größenordnungen niedriger als der Beitrag entsprechend dem Druckkessel-Modell, so daß letzterer praktisch dem Gesamtpartikelbruch entspricht.

Die Partikelbruchraten $\dot{\phi}_1$ und $\dot{\phi}_2$ sind in der folgenden Abb. 3.4 für den Fall A dargestellt, $\dot{\phi}_1$ darüberhinaus für Partikel mit UO_2 - und mit $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Kern.

Der qualitative Verlauf von $\dot{\phi}_1$ ähnelt stark der vorgegebenen Temperaturrandbedingung, wie man dem nahezu symmetrischen Verlauf bei den Temperaturrampen entnehmen kann. Bzgl. der Art des Partikelkerns vergrößert sich der Unterschied zwischen UO_2 und $(\text{Th,U})\text{O}_2$ mit zunehmender Temperatur. Beim Verlauf von $\dot{\phi}_2$ erkennt man deutlich die Abhängigkeit von den hohen Temperaturen z.B. an dem steileren Anstieg bei konstanten 2000°C zwischen 200 h und 250 h.

Die bisherigen Abbildungen zeigten bereits die Endergebnisse. Die folgenden Abbildungen, in denen der aus den Partikelkernen freigesetzte Anteil der Spaltgase F_d (Abb. 3.5), die Anzahl der pro Spaltung freigesetzten Sauerstoffatome OPF (Abb. 3.6) sowie als Folge dieser Größen der Spaltgasdruck im Partikelinnern p (Abb. 3.7) dargestellt ist, zeigen den direkten Einfluß der Temperatur bzw. der Art des Partikelkerns.

Der unterschiedliche Verlauf für die beiden Partikelarten bei der relativen Freisetzung F_d der Spaltgase Xe und Kr ist auf die verschiedenen Diffusionskoeffizienten für die Spaltgase im jeweiligen Kern zurückzuführen. Aus dem UO_2 -Kern sind hierbei gegen Ende des Untersuchungszeitraum praktisch sämtliche Spaltgase freigesetzt, wohingegen im $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Kern noch ca. 22 Prozent zurückgehalten werden.

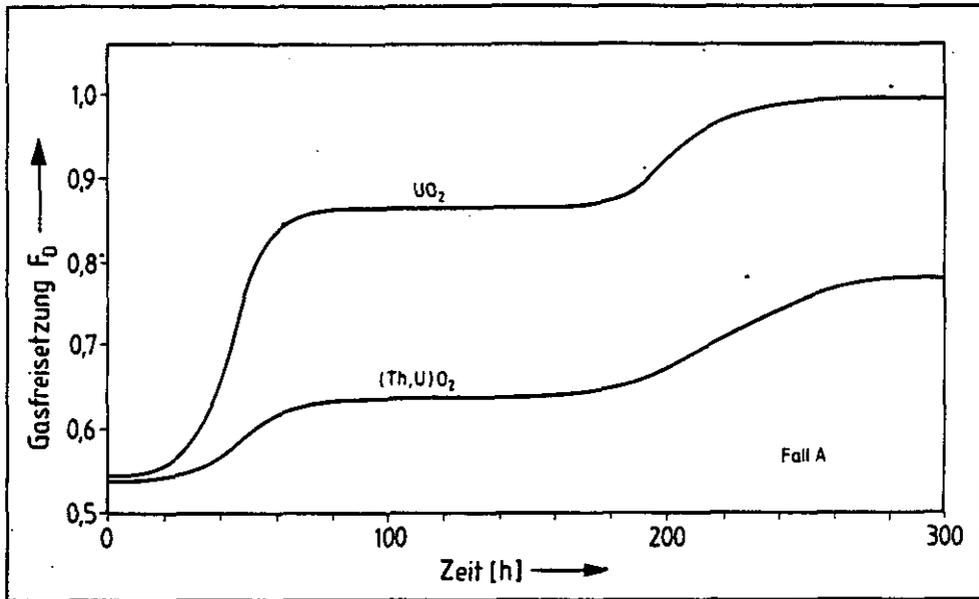


Abb. 3.5: Relative Gasfreisetzung

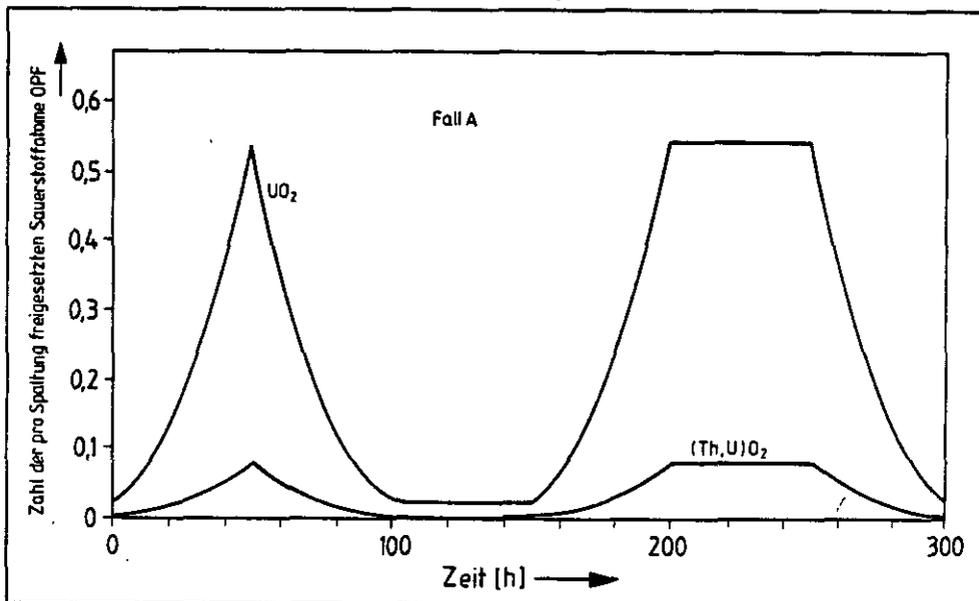


Abb. 3.6: Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung

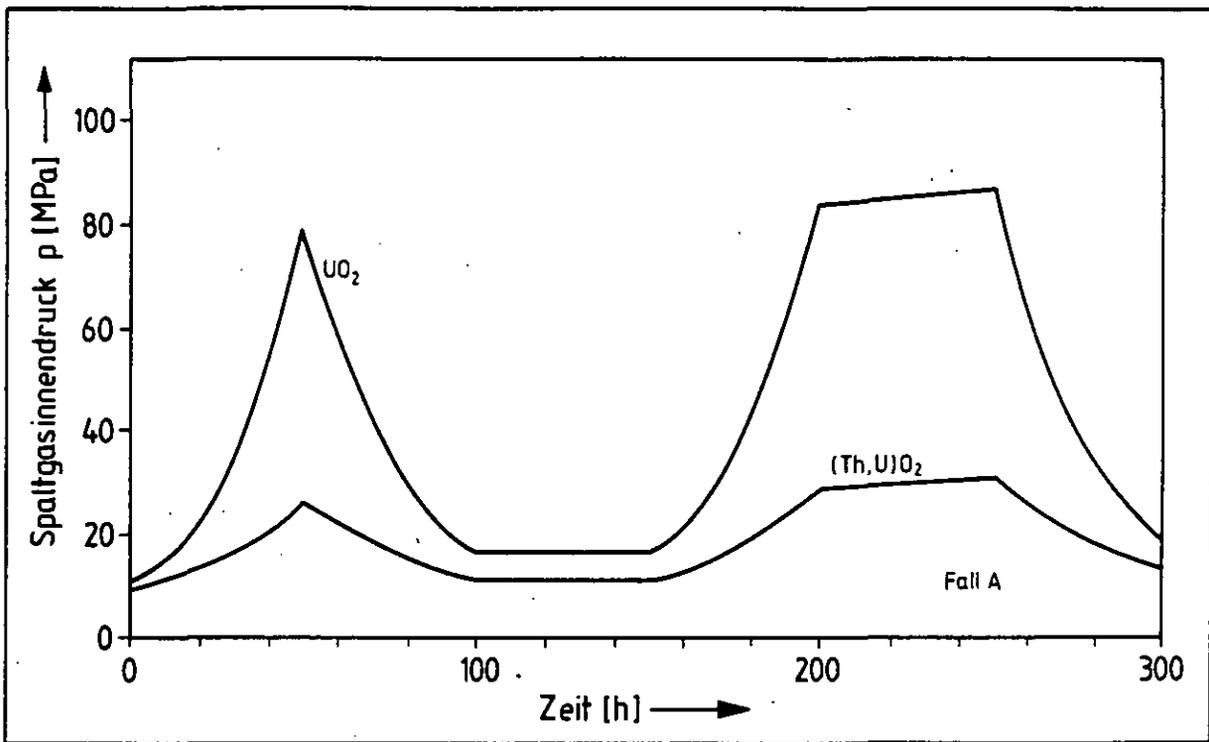


Abb. 3.7: Spaltgasinnendruck

Die Anzahl der im Partikelkern pro Spaltung entstehenden Sauerstoffatome ist bei 2000 °C für UO_2 rund 7 mal höher als für $(\text{Th,U})\text{O}_2$, was auf die zusätzliche Abhängigkeit von der hier gewählten Bestrahlungsvorgeschichte zurückzuführen ist.

Die beiden Größen F_d und OPF gehen linear in die Formel für den Spaltgasinnendruck p ein (Gleichung 3), dessen zeitlicher Verlauf in Abb. 3.7 folglich eine entsprechende Abhängigkeit von der Temperatur und Art des Kerns zeigt.

3.1.2 BESTRAHLUNGSBEDINGUNGEN

Die Bestrahlungsparameter, zu denen im einzelnen die Temperatur, die Zeit, der Abbrand und die Fluenz zählen, gehen in die Berechnung verschiedener Größen ein, die wesentlich für das Defektwerden der Partikel aufgrund des Druckkessel-Modells (ϕ_1) sind, hierbei insbesondere die durch die Bestrahlung geschwächte Zugfestigkeit der SiC-Schicht sowie der sich als Funktion von Temperatur und Zeit aufbauende Gasdruck im Partikelinnern. Auf die thermische Zersetzung (ϕ_2) haben die Bestrahlungsbedingungen keinen Einfluß.

Bestrahlungstemperatur und -zeit bestimmen entscheidend den Anteil defekter Partikel bei Bestrahlungsende bzw. Störfallbeginn. Der Aufbau des CO-Drucks ist insbesondere für Partikel mit UO_2 -Kern entscheidend. Dies zeigt die Abb. 3.8, in der für die konstanten Bestrahlungstemperaturen $800\text{ }^\circ\text{C}$ und $1200\text{ }^\circ\text{C}$ und für je zwei Bestrahlungszeiten 100 d und 500 d der Partikelbruchanteil ϕ_1 gegen die Störfallzeit aufgetragen ist.

Bei der kleineren Bestrahlungstemperatur macht sich die unterschiedliche Bestrahlungszeit nicht so stark bemerkbar wie bei der höheren Temperatur (weniger als 1 Größenordnung gegenüber rund 3 Größenordnungen). Die Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung für den Fall mit $1200\text{ }^\circ\text{C}$, 500 d liegt nahe der fest vorgegebenen oberen Grenze (Gleichung (5d)), so daß eine weitere Erhöhung der Temperatur oder der Zeit keinen wesentlichen Einfluß mehr auf den Partikelbruch hätte.

Der Bruch von Partikeln mit $(Th,U)O_2$ -Kernen ist nicht so empfindlich für die Größe OPF. Eine Variation der Parameter Temperatur und Zeit in den oben genannten Grenzen führt zu einer viel kleineren Streubreite von ϕ_1 , wobei die Kurve für $1200\text{ }^\circ\text{C}$, 500 d etwa derjenigen entspricht, die sich für UO_2 -Partikel bereits bei $800\text{ }^\circ\text{C}$, 500 d ergibt. Der Defektanteil von $(Th,U)O_2$ -Partikeln ist überwiegend bestrahlungstemperaturempfindlich;

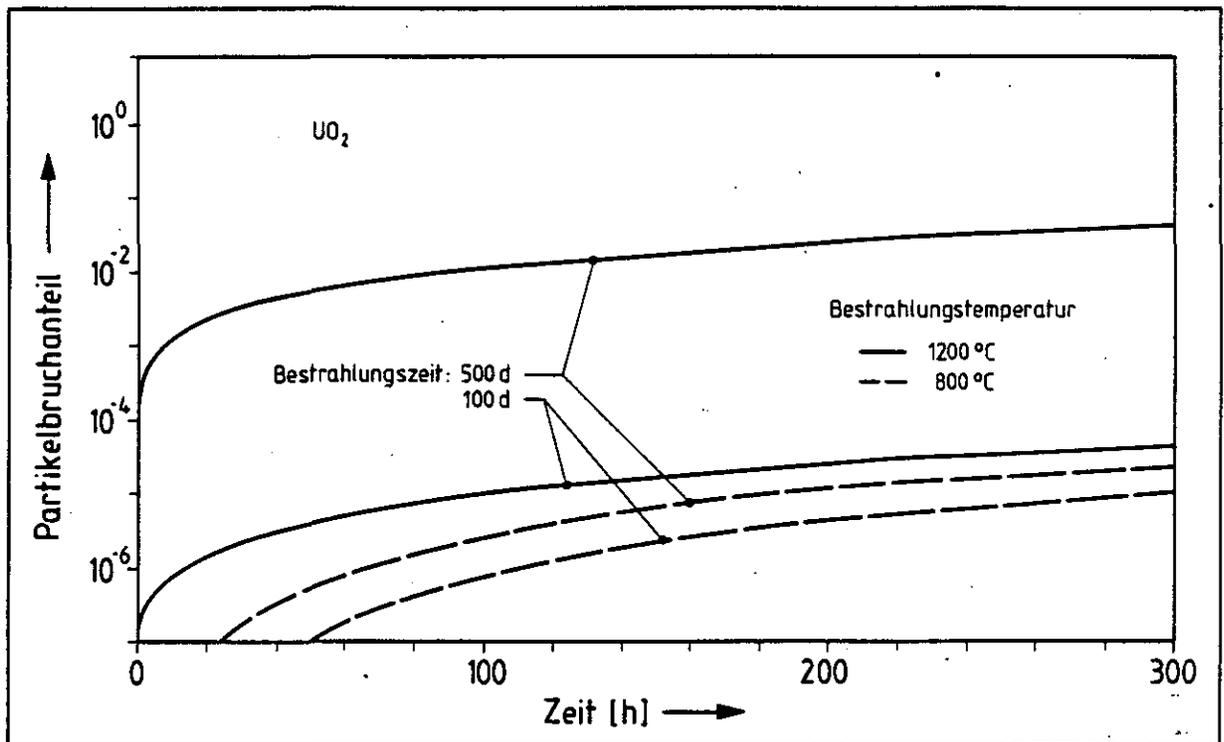


Abb. 3.8: Einfluß von Bestrahlungstemperatur und -zeit auf ϕ_1

die Zeit wirkt sich nur bei der relativen Freisetzung der Spaltgase (Gleichung (4)) aus.

Eine Variation der Neutronendosis (Fluenz) hat unmittelbar eine Änderung der Zugfestigkeit der SiC-Schicht σ_0 (Gleichung (8a)) sowie des Weibull-Parameters für die Festigkeitsverteilung m_0 (Gleichung (9a)) zur Folge. Bei Verdoppelung der Fluenz liegt nach 300 h Glühzeit der Partikelbruch bei $(Th,U)O_2$ -Kernen um etwa 1 Größenordnung höher; die Erhöhung bei UO_2 -Kernen fällt etwas geringer aus. Eine Vergrößerung der Fluenz um den Faktor 10 läßt den Partikelbruch bereits bei Störfallbeginn in den Prozent-Bereich ansteigen.

Auch der vorzugebende Abbrand des Brennstoffs wirkt sich bei Verdoppelung bzw. Halbierung in einer Variation von ϕ_1 von mehreren Größenordnungen

aus. $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Partikel zeigen bei einem Abbrand unterhalb von 0.05 FIMA selbst nach 300 h einen Defektanteil von kleiner 10^{-8} . Derselbe Schwermetallabbrand bei UO_2 -Partikeln führt dagegen nach 300 h zu einem Anteil von 10^{-5} defekten Partikeln; 10 Prozent FIMA (entsprechend dem Referenzfall) bringen einen weiteren Anstieg um 2 Größenordnungen.

3.1.3 PARTIKELEIGENSCHAFTEN

Eine physikalische Eigenschaft, in der sich verschiedene Sorten Siliziumcarbid mit unterschiedlicher Herstellung voneinander unterscheiden, ist seine Festigkeit. Sie wird an abgeschliffenen SiC-Ringen gemessen, wobei sich die Verteilung der Meßwerte durch die statistische Theorie nach Weibull in geeigneter Weise beschreiben läßt. In der nachfolgenden Tabelle 3.2 sind einige SiC-Sorten mit den zugehörigen gemessenen Werten von Zugfestigkeit und Weibull-Parameter im unbestrahlten Zustand σ_{∞} bzw. m_{∞} aufgelistet.

Ihre Veränderung durch die Neutronenbestrahlung ist am Beispiel der Partikelsorte EO 1607 gemessen worden. Abb. 3.9 zeigt deren statistische Festigkeitsverteilung (Weibull) im unbestrahlten Zustand sowie im Falle einer Bestrahlungstemperatur von 1165°C und einer Neutronendosis von $1.8 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-2}$ EDN (Test HFR-GM1). Die daraus resultierenden Modellgleichungen (8a) und (9a) führen zu den ebenfalls in der Tabelle 3.2 verzeichneten Größen σ_0 und m_0 nach der Bestrahlung für die einzelnen Partikelsorten, wobei diese allein von der Bestrahlungstemperatur (hier: 1000°C) und der Fluenz (hier: $1 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-2}$ EDN) abhängen.

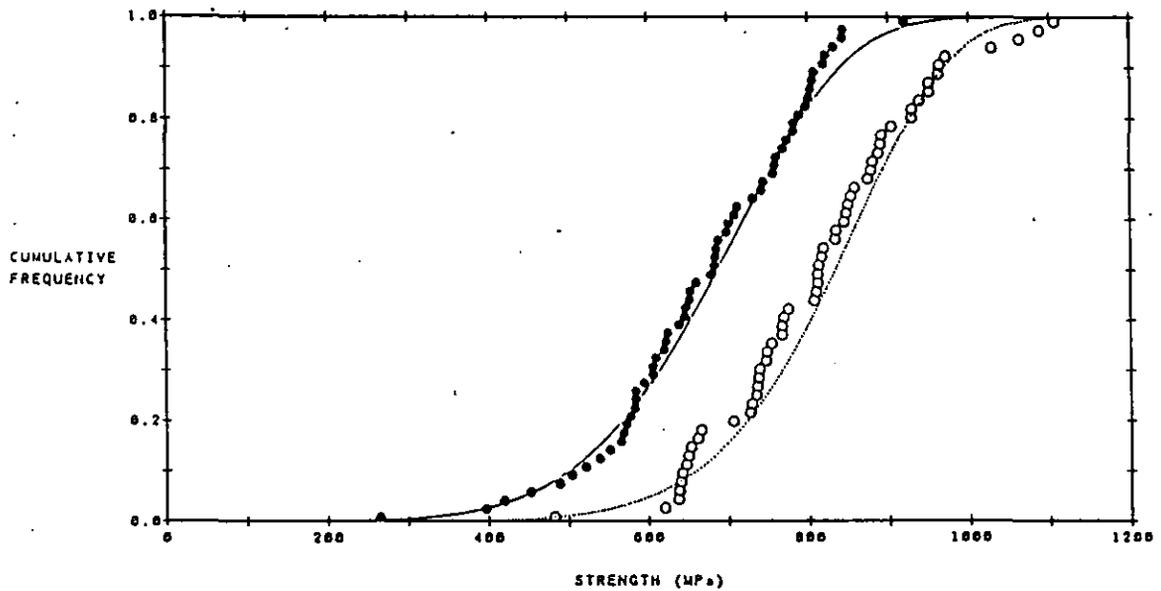


Abb. 3.9: Messung der SiC-Zugfestigkeitsverteilung an bestrahlten und unbestrahlten Proben der Partikelserie EO 1607

o unbestrahlt $1 - e^{-\ln 2 * (\sigma_t / 834)^{8.02}}$
 • bestrahlt ——— $1 - e^{-\ln 2 * (\sigma_t / 687)^{5.98}}$

Die gemessenen Werte für σ_{00} und m_{00} zeigen an, daß innerhalb einer gewissen Streubreite bei einer höheren Zugfestigkeit einer SiC-Sorte auch der zugehörige Parameter der Weibull-Verteilung ansteigt.

Darüberhinaus läßt sich aus Gleichung (1) ersehen, daß bei Zunahme sowohl der Zugfestigkeit als auch des Weibull-Parameters ein niedrigerer Anteil an defekten Partikeln zu erwarten ist.

Für TRISO-Partikel mit den in der Tabelle 3.2 aufgeführten SiC-Sorten ergeben sich somit die in der Abb. 3.10 dargestellten Partikelbruchkurven.

Die Abnahme des Weibull-Parameters m entsprechend der Gleichung (10b), durch die ein Festigkeitsverlust des SiC infolge von Korngrenzenkorrosion beschrieben werden soll, wird in der Regel nicht berücksichtigt. Die Mög-

Tabelle 3.2: Zugfestigkeits- und Weibull-Parameterwerte für verschiedene SiC-Sorten

Probe	vor Bestrahlung (Meßwerte)		nach Bestrahlung (Rechenwerte)	
	σ_{oo} [MPa]	m_{oo}	σ_o [MPa]	m_o
EO 1674	722	7.0	660	6.1
EO 1607	850	8.0	777	7.0
HT 150-167	600	6.0	549	5.3
EO 249-251	453	5.0	414	4.4
EO 403-405	867	8.4	793	7.4
EUO 1551	1060	8.5	969	7.4
ECO 1541	1080	6.4	987	5.6
EC 1338/1339	998	7.4	912	6.5

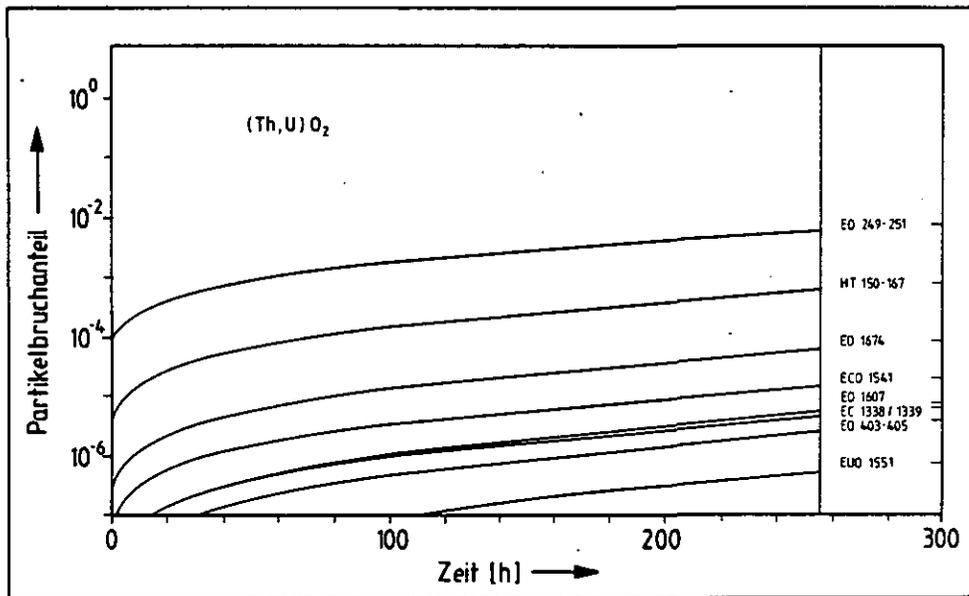


Abb. 3.10: Vergleich von Partikelarten mit unterschiedlichen SiC-Eigenschaften (Glühtemperatur 1600 °C)

lichkeit, einen höheren Partikelbruch zu erzielen, entstand aus der Tatsache, daß im Ausheizexperiment FRJ2-K11/03 (Schenk) ein relativ hoher Partikelbruchanteil (7 defekte Partikeln) registriert worden ist. Die Abb. 3.11 zeigt in einer Langzeitaufnahme über 1000 h Glühzeit die Nachrechnung des Partikelbruchanteils in diesem Ausheizexperiment unter Einbeziehung der vorangehenden Glühphasen von 100 h bei 1400 °C und 100 h bei 1500 °C.

Die Kurven zeigen, daß unter Berücksichtigung der Korngrenzenkorrosion des SiC die Meßwerte (schwarze Punkte) in konservativer Näherung modellmäßig erfaßt werden. Inzwischen scheint sich jedoch herauszustellen, daß das Defektwerden in dem Experiment FRJ2-K11/03 auf andere Ursachen zurückzuführen ist, so daß dieser zusätzliche Versagensmechanismus auszuschließen ist. (Aus diesem Grunde wird im Normalfall Gleichung (10a) anstelle von (10b) angewendet).

Dieselben Rechnungen sowie ihr Vergleich mit den Meßpunkten werden in Abb. 3.12 auch am Beispiel von Kugelbrennelementen des Typs GO 2, bestrahlt im AVR, veranschaulicht.

Das Entwicklungsprogramm für das Referenzpartikel sieht auch die Erprobung von Partikeln vor, die eine vergrößerte SiC-Schichtdicke von 50 µm gegenüber der "normalen" Auslegung von 35 µm besitzen. Die folgende Abb. 3.13 zeigt Vergleichsrechnungen für die konstanten Glühtemperaturen 1600 °C und 2000 °C.

Der Unterschied im Partikelbruch liegt bei der Glühtemperatur von 1600 °C während des ganzen Untersuchungszeitraums im Bereich einer Größenordnung. Im Falle der 2000 °C Glühtemperatur ist der Unterschied etwas größer.

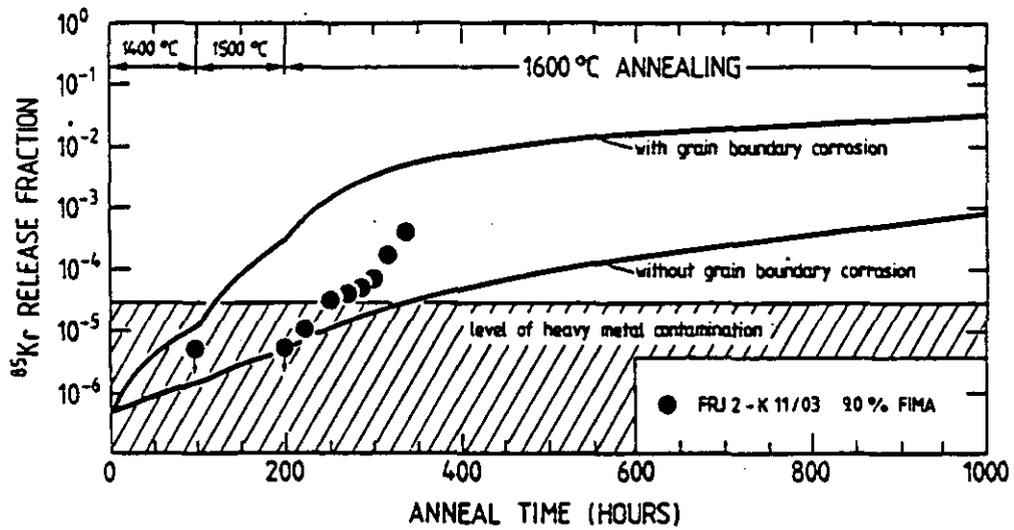


Abb. 3.11: Ausheizexperiment FRJ2-K11 (übernommen aus /10/)
mit $\sigma_{oo} = 600$ MPa, $m_{oo} = 6$, $T_B = 1160$ °C, $t_B = 260$ VLT,
 $F_B = 0.09$ FIMA, $\Gamma = 0.05 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-2}$ EDN, $\eta \equiv 0$ bzw. $\equiv \eta(T)$

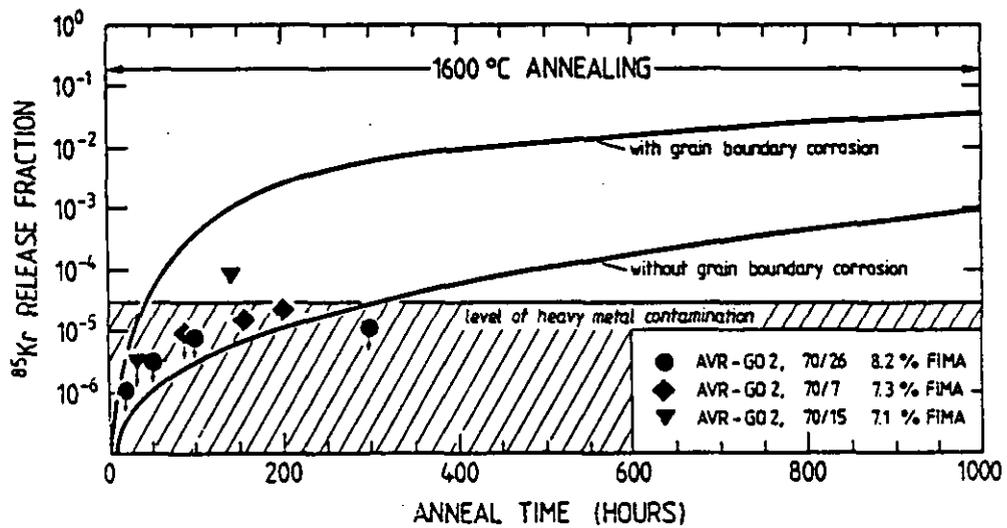


Abb. 3.12: Ausheizexperiment AVR GO 2 (übernommen aus /10/)
mit $\sigma_{oo} = 600$ MPa, $m_{oo} = 6$, $T_B = 950$ °C, $t_B = 500$ VLT,
 $F_B = 0.082$ FIMA, $\Gamma = 0.6 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-2}$ EDN, $\eta \equiv 0$ bzw. $\equiv \eta(T)$

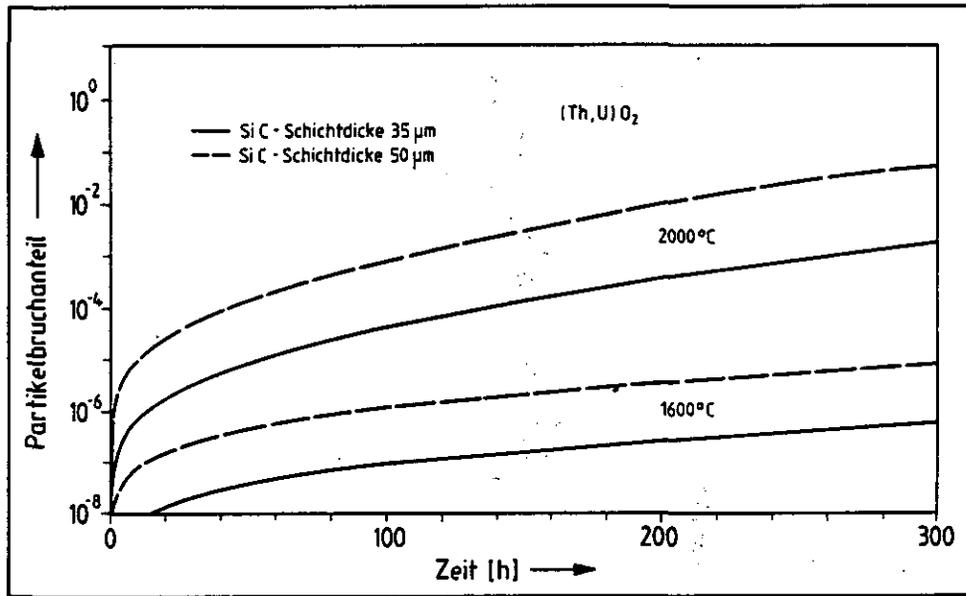


Abb. 3.13: Vergleich zwischen Partikeln mit einer SiC-Schichtdicke von 35 μm bzw. 50 μm für die Glühtemperaturen 1600 °C und 2000 °C

3.2 NACHRECHNUNG VON STÖRFALLSIMULATIONSEXPERIMENTEN

3.2.1 CHST-RAMPENEXPERIMENTE

Ein bei der GA von D. T. Goodin entwickeltes Modell zur Beschreibung des Bruchverhaltens von TRISO-Brennstoffteilchen unter Störfallbedingungen /11/ erlaubt eine gegenüber früheren Modellen bessere Vorhersage der Spaltproduktfreisetzung im mittleren Temperaturbereich von ≈ 1250 °C bis 1800 °C. Dieses weiterentwickelte Modell ist aus einer Vielzahl von Messungen verschiedener individueller Phänomene entstanden, deren Ergebnisse

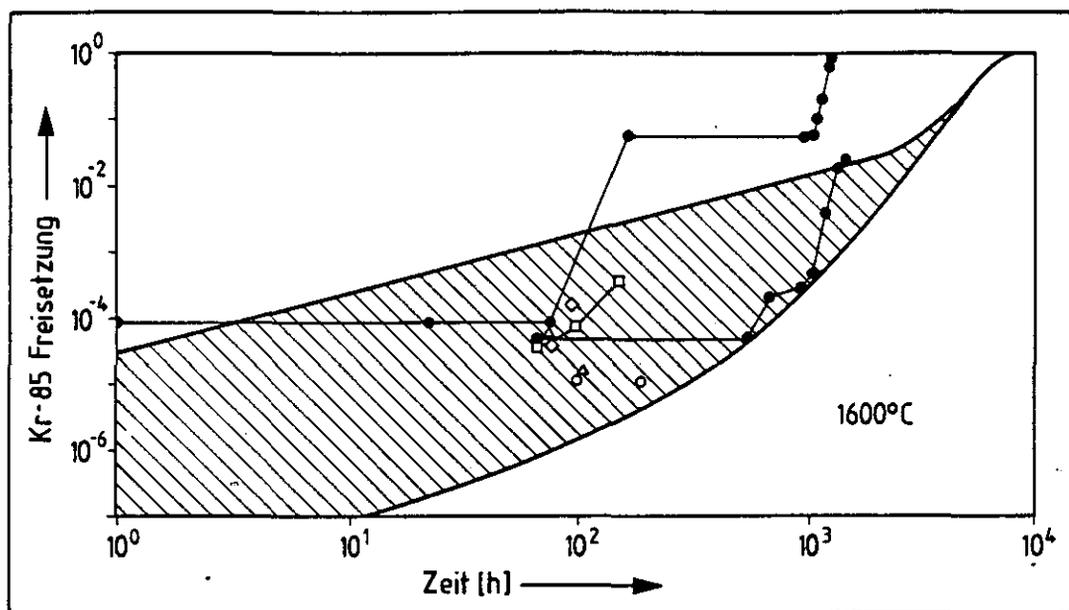


Abb. 3.14: Vergleich von Messungen der Kr-85-Freisetzung mit den Rechnungen des PANAMA-Modells, $T = 1600\text{ }^{\circ}\text{C}$

- GA HEU Tests □ KFA FRJ2 ◇ KFA R2-K12
- △ KFA AVR-70 BE ○ GA DR-S6

Schraffierte Fläche oberer Rand: PANAMA, lose Partikel
 unterer Rand: PANAMA, Partikel im Brennelement

so miteinander kombiniert worden sind, daß sie eine geeignete Freisetzungsvorhersage liefern.

Grundlage für das Versagen von TRISO-Partikeln ist ebenso wie in PANAMA das Druckkessel-Modell. Aufgrund neu gewonnenen Datenmaterials und deren Interpretation werden in dem GA-Modell weitere Effekte beschrieben:

- SiC-Qualität im Partikel
 Erfassung der starken Unterschiede zwischen einzelnen SiC-Chargen während des Herstellungsprozesses sowie der unterschiedlichen Methoden in der Feststellung der SiC-Defekte

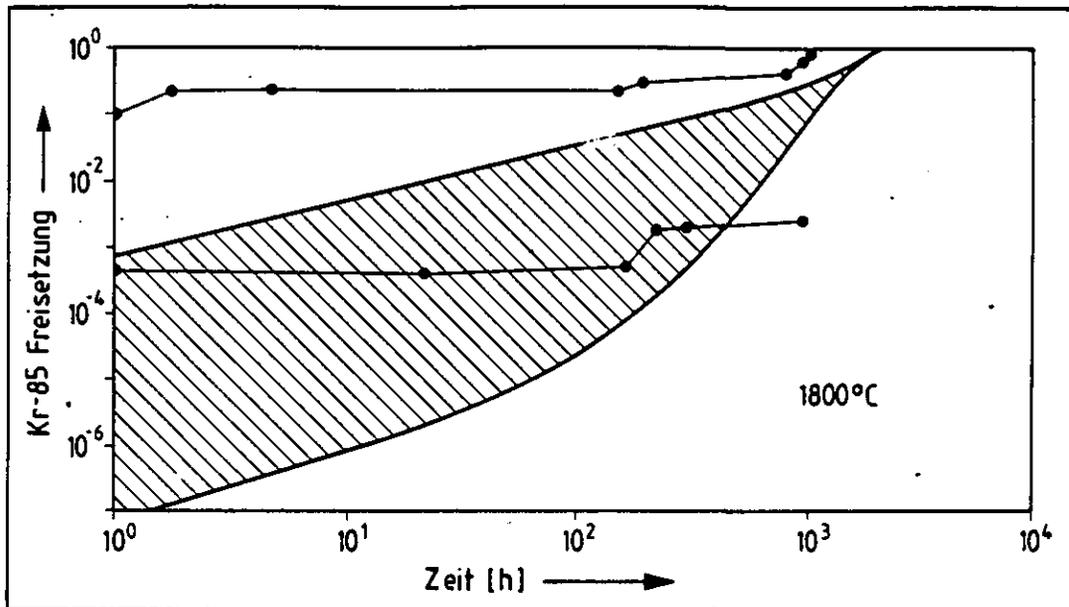


Abb. 3.15: Vergleich von Messungen der Kr-85-Freisetzung mit den Rechnungen des PANAMA-Modells, $T = 1800\text{ }^{\circ}\text{C}$

- GA HEU Tests

Schraffierte Fläche oberer Rand: PANAMA, lose Partikel
unterer Rand: PANAMA, Partikel im Brennelement

- Versagenswahrscheinlichkeit der äußeren Pyrokohlenstoffschicht (oLTI) in Abhängigkeit von der Bestrahlungstemperatur und dem Abbrand
- Änderungsrate der SiC-Schichtdicke infolge thermischer Zersetzung (additiver Beitrag zur SiC-Korrosion durch die Spaltprodukte) mit einer Aktivierungsenergie von 501 kJ (gegenüber 556 kJ im KFA-Modell) und einem vor-exponentiellen Faktor, der an die bei den Experimenten im Rahmen der "Core Heatup Simulation Tests" (CHST) bei der GA gemessenen und gerechneten Freisetzungswerte von Cäsium angepaßt worden ist.
- Diffusion der Spaltgase durch die intakte äußere Pyrokohlenstoffschicht bei defekter SiC-Schicht

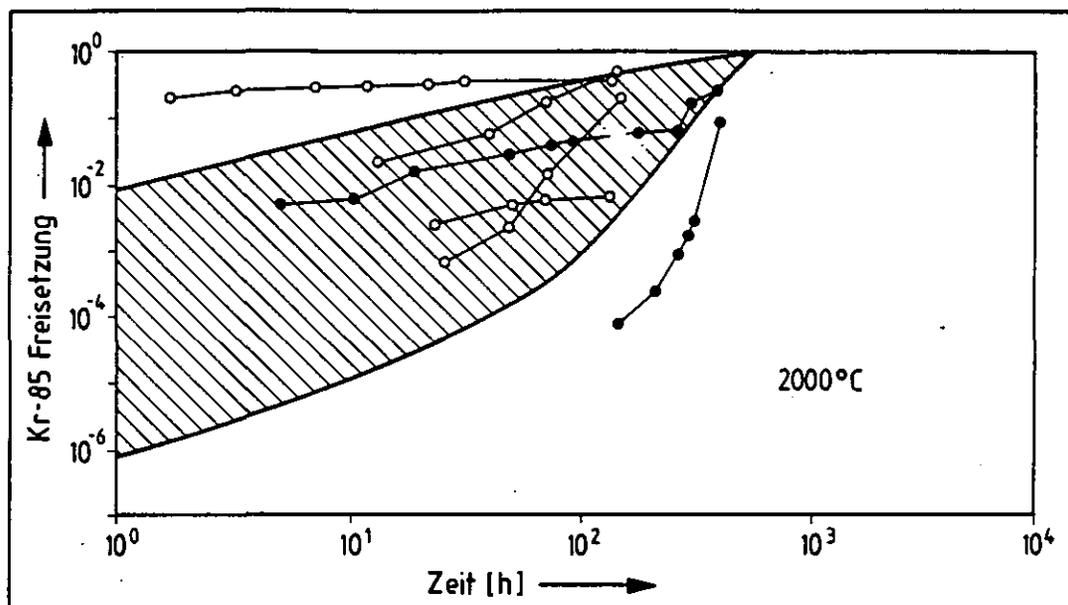


Abb. 3.16: Vergleich von Messungen der Kr-85-Freisetzung mit den Rechnungen des PANAMA-Modells, $T = 2000\text{ }^{\circ}\text{C}$

- GA HEU isotherme Tests bei $2000\text{ }^{\circ}\text{C}$
- o GA Rampentests bei $2050\text{ }^{\circ}\text{C}$

Schraffierte Fläche oberer Rand: PANAMA, lose Partikel
 unterer Rand: PANAMA, Partikel im Brennelement

entsprechend Experimenten, die zeigten, daß 90 Prozent aller Partikeln mit defekter SiC-Schicht nach der Bestrahlung bei $1250\text{ }^{\circ}\text{C}$ bis zum maximalen Abbrand noch eine intakte äußere Pyrokohlenstoffschicht aufwiesen.

Die Abbildungen 3.14 - 3.16 zeigen am Beispiel der bei der GA durchgeführten isothermen Glühexperimenten mit den Temperaturen $1600\text{ }^{\circ}\text{C}$, $1800\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ den Vergleich zwischen den Meßergebnissen und den Rechnungen mit PANAMA sowie am Beispiel von Temperaturrampen (Abb. 3.17) zusätzlich den Vergleich des GA-Modells mit der entsprechenden Vorhersage durch das GA-Modell.

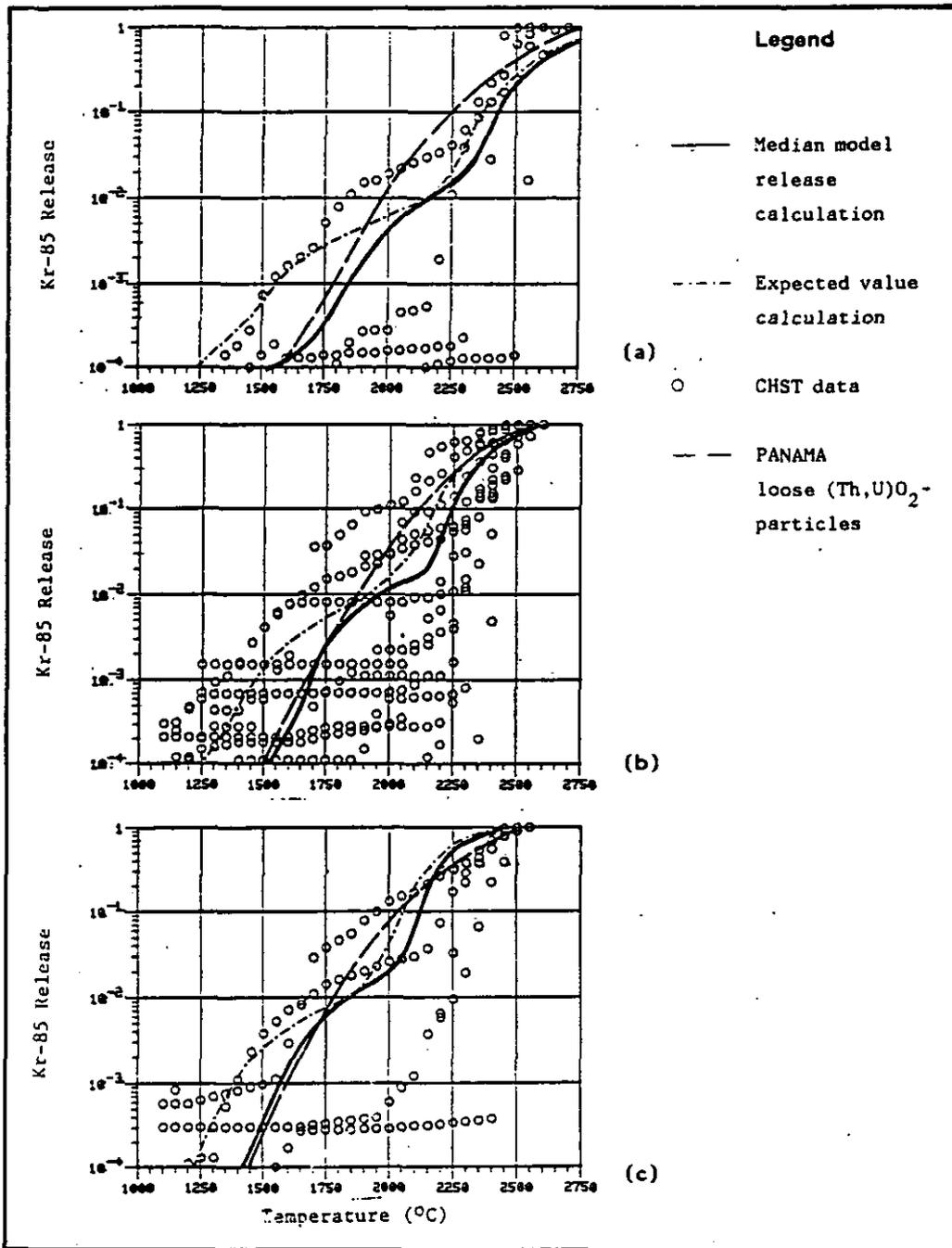


Abb. 3.17: Vergleich von Messungen der Kr-85-Freisetzung mit den Rechnungen des GA- und des PANAMA-Modells, Temperaturrampen von (a): 175 °C/h, (b): 47 °C/h, (c): 17.5 °C/h

Die Abbildungen enthalten (siehe auch Legenden) die verfügbaren Meßwerte aus verschiedenen amerikanischen (in der Regel Chargen von 10 - 20 Partikeln) und deutschen (u.a. auch Brennelementkugeln aus dem AVR) Experimenten. Gemessen (und gerechnet) ist jeweils die Freisetzung von Kr-85 gegen die Glühzeit (in logarithmischer Darstellung!).

Die Abbildungen 3.14 - 3.16 enthalten zum Vergleich 2 Kurven aus Rechnungen mit dem PANAMA-Modell. Sie beziehen sich hier auf $(\text{Th,U})\text{O}_2$ -Partikeln und beschreiben jeweils in der oberen Kurve den Defektanteil loser Partikeln (thermische Zersetzung entsprechend der Gleichung (14a)), wie er auch in allen GA-Experimenten untersucht worden ist. Die jeweils untere Kurve repräsentiert denselben Fall unter Anwendung der Gleichung (14b) für die thermische Zersetzung entsprechend Partikeln, die in einem Kugelbrennelement eingebettet sind. Einige KFA-Meßergebnisse an Brennelementkugeln sind in der Abb. 3.14 für den 1600 °C-Fall eingetragen. Die niedrigen Meßwerte in den deutschen Experimenten (offene Symbole) lassen auf eine bessere SiC-Qualität und/oder eine gut rückhaltende äußere Pyrokohlenstoffschicht schließen.

Abb. 3.17 zeigt am Beispiel von Temperaturrampen die Kr-85-Freisetzung über der Glühzeit für die drei Aufheizgeschwindigkeiten 175 °C/h, 47 °C/h und 17.5 °C/h entsprechend einer Aufheizung von 1100 °C bis 2500 °C innerhalb von 8 h, 30 h bzw. 80 h. Eingetragen sind die mit dem GA- bzw. dem PANAMA-Modell gerechneten Kurven sowie der "Sternenhimmel" aus CHST-Meßpunkten.

Die Kurven aus den Rechnungen mit dem GA-Modell weisen einige charakteristische Formen auf, die in den PANAMA-Modellkurven so nicht zu finden sind. Das Niveau zu Beginn des Untersuchungszeitraums wird durch das Druckkessel-Modell beschrieben. Ein zweites flacheres Niveau in der Kurve wird bestimmt durch die SiC-Qualität, d.h. durch die infolge des Herstellungsprozesses defekt werdende SiC-Schicht. Der anschließende Anstieg ist bedingt durch das Versagen der SiC-Schicht aufgrund von Korrosion und anschließender Diffusion des Kryptons durch die noch intakte oLTI-Schicht der Partikeln.

3.2.2 BESTRAHLUNGSEXPERIMENT R2-K13

Das Bestrahlungsexperiment R2-K13, das zwischen April 1980 und September 1982 im Reaktor R2 in Studsvik (Schweden) durchgeführt wurde, enthielt insgesamt 4 Kapseln. In der obersten und untersten (Kapseln 1 und 4) waren jeweils 1 Brennelementkugel mit deutschem Brennstoff, in den beiden mittleren (Kapseln 2 und 3) jeweils Blocksegmente mit amerikanischem Brennstoff eingesetzt. Partikeleigenschaften sowie die Randbedingungen während der Bestrahlung sind der folgenden Tabelle 3.3 zu entnehmen.

3.2.2.1 Ausheizung mit Temperaturrampe

Mit den amerikanischen Brennstoffproben wurden in der KFA von Schenk (KFA-IRW) Experimente zur Simulation von Coreaufheizstörfällen durchgeführt (/9/). Die Proben aus Blocksegmenten bzw. Chargen mit ungebundenen Partikeln enthielten UCO TRISO-Abbrand- sowie ThO_2 TRISO-Brutpartikeln entsprechend dem amerikanischen LEU/Th Referenz-Brennstoff, und wurden in einer 30 h-Rampe von 1100°C auf 2500°C hochgeheizt. Die Nachrechnungen mit PANAMA erfolgte am Beispiel der Brutpartikelsorte "6252-12 COMP" (siehe Tabelle 3.3). Ihre geometrischen Daten lauten: Kerndurchmesser $460\ \mu\text{m}$, Dicke Puffer $53\ \mu\text{m}$, iLTI $33\ \mu\text{m}$, SiC $38\ \mu\text{m}$ und oLTI $44\ \mu\text{m}$.

In Abb. 3.18 ist die gerechnete und gemessene (nach /11/) Kr-85-Freisetzung aus den Partikeln der Kapseln 2 und 3 als Funktion der Glühtemperatur dargestellt. Die Rechenkurven bilden den oberen und unteren Rand der unterlegten Fläche. Das Niveau der Kurve bzgl. 1200°C Bestrahlungstemperatur aus der Rechnung liegt bereits am Anfang bei über 1 Prozent, was auf die "ungünstigen" Bestrahlungsbedingungen, insbesondere Temperatur und Fluenz, zurückzuführen ist. Z.B. ist der Weibull-Parameter als ein Maß für die Schwächung der Festigkeit im SiC

Tabelle 3.3: Randbedingungen aus dem Bestrahlungsexperiment R2-K13
(nach /12/, /13/)

R2-K13	Kapsel 1	Kapsel 2	Kapsel 3	Kapsel 4
Partikelsorte	Kugel- brennelement mit EO 1674	Abbr.partikel 6157-11-010 6157-11-020 Brutpartikel 6252-12 COMP 6252-12T-04A 6252-12T-04B2	wie 2	wie 1
Bestrahlungs- temperatur [°C]	1200	1200	1000	1000
Bestrahlungszeit [VLT]	517	523	wie 2	wie 1
Fluenz [$10^{25} \text{ m}^{-2} \text{ EDN}$]	5.5	4.8	4.5	4.4
Schwermetall- abbrand [FIMA]	0.103	Abbr.partikel 0.259 Brutpartikel 0.074	Abbr.partikel 0.254 Brutpartikel 0.069	0.094
		6252-12 COMP	6252-12 COMP	
Partikelkern \emptyset [μm]	500	460	wie 2	wie 1
SiC-Zugfestigkeit [MPa]	722	674	wie 2	wie 1
Weibull-Parameter	7	5.43	wie 2	wie 1
Glühtemperatur [°C]	1600	1100 → 2500	wie 2	wie 1
Glühzeit [h]	1000	30	wie 2	wie 1
Thermische	$\alpha = 0.0001$	$\alpha = 0.693$	wie 2	wie 1
Zersetzung (ϕ_2)	$\beta = 4.$	$\beta = 0.88$	wie 2	wie 1

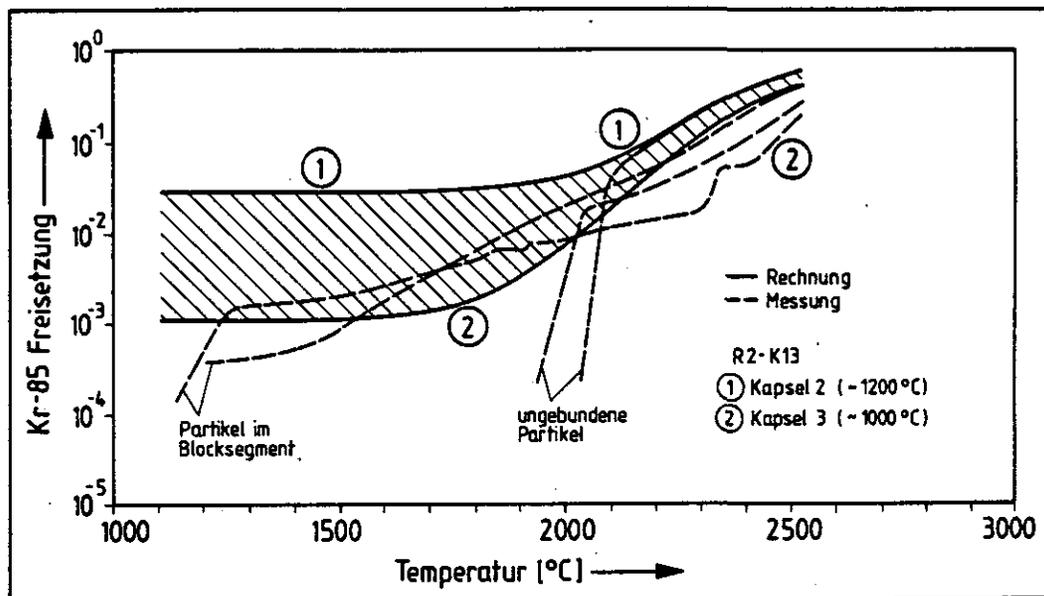


Abb. 3.18: R2-K13: Vergleich der Messungen der Kr-85-Freisetzung aus den Temperaturrampentests mit den Rechnungen des PANAMA-Modells (Kapseln 2 und 3)

nach der Bestrahlung (rechnerisch) schon auf seinen Minimalwert von 2 abgesunken. Auch die Rechenkurve bzgl. 1000 °C Bestrahlungstemperatur startet auf einem hohen Niveau von 10^{-3} . Der Weibull-Parameter liegt hier dicht oberhalb seines Minimalwertes.

Die gestrichelten Kurven entsprechen dem Verlauf der Meßpunkte. Es handelt sich hierbei um eine Messung an den Partikeln im Blocksegment und an den ungebundenen Partikeln jeweils für beide Kapseln 2 und 3. Die Übereinstimmung der Messungen an den Partikeln im Blocksegment mit den Rechenergebnissen ist ziemlich gut, sieht man einmal von dem Anfangsniveau bzgl. der hohen Bestrahlungstemperatur von 1200 °C (Kapsel 2) ab. Die Messungen an den ungebundenen Partikeln gelangen zwar erst bei Temperaturen um 2000 °C oberhalb der Nachweisgrenze, passen sich dann aber rasch an den Verlauf der übrigen Kurven an.

3.2.2.2 Ausheizung mit konstanter Glühtemperatur

Die in Kapsel 1 des Bestrahlungsexperimentes R2-K13 befindliche Brennelementkugel wurde inzwischen von Schenk (KFA-IRW) einer 1000 h langen Glühung bei 1600 °C unterzogen.

Abb. 3.19 zeigt die gemessene Kr-85-Freisetzung aus diesem Langzeitversuch als Funktion der Glühzeit (nach /14/). Danach liegen die Meßwerte erst nach 480 h oberhalb von 10^{-5} , d.h. in dem hier dargestellten Bereich. Am Ende der 1000 h Glühung beträgt der freigesetzte Anteil an Krypton-85 $3.5 * 10^{-4}$. Bei einer Gesamtpartikelzahl in dem Brennelement von rund 20000 entspricht dies etwa 8 bis 16 defekten Partikeln.

In der Abbildung sind ebenfalls die mit PANAMA gerechneten Gasfreisetzungskurven für beide Brennelementkugeln aus den Kapseln 1 und 4 (Randbedingungen entsprechend Tabelle 3.3) eingezeichnet. Auch hier wird wiederum das hohe Freisetzungsniveau am Anfang infolge der extremen Bestrahlungsbedingungen erkennbar. Dagegen konnte im Experiment kein bestrahlungsbedingt defektes Partikel nachgewiesen werden. Die vorhergesagte Gasfreisetzung nach 1000 h Glühung bei 1600 °C liegt bei rund 20 Prozent und damit um etwa 3 Größenordnungen über dem Meßpunkt aus diesem Glühexperiment. Selbst die untere Kurve entsprechend dem Brennelement bei 1000 °C Bestrahlungstemperatur liegt sehr deutlich über der Meßkurve.

Es ist ersichtlich, daß die von PANAMA vorausgerechnete Abnahme der SiC-Zugfestigkeit und die erwartete SiC-Korrosion bei der R2-K13/1 Glühung nicht auftrat. R2-K13 Nachuntersuchungsergebnisse und weitere Glühexperimente müssen abgewartet werden, bevor die hier vorliegende Diskrepanz verstanden ist.

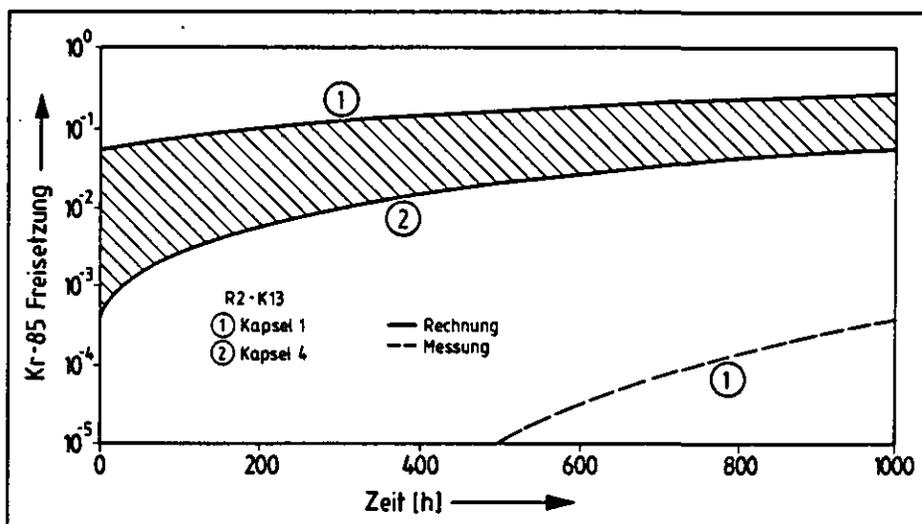


Abb. 3.19: R2-K13: Vergleich der Messungen der Kr-85-Freisetzung aus dem isothermen Glühtest mit den Rechnungen des PANAMA-Modells (Kapsel 1)

3.3 PARTIKELBRUCH UNTER HTR-STÖRFALLBEDINGUNGEN

In diesem Abschnitt werden einige Anwendungsbeispiele mit dem oben beschriebenen Partikelbruchmodell gezeigt, wie sie sich unter realistischen Störfallbedingungen bei einem HTR kleiner Leistung (Beispiel: HTR-Modul mit $200 \text{ MW}_{\text{th}}$) und großer Leistung (Beispiel: HTR-500 mit $1250 \text{ MW}_{\text{th}}$) darstellen.

Für beide Reaktoren sind als Konzept für die Referenzpartikel $500 \mu\text{m}$ UO_2 -LTI-TRISO-Partikel vorgesehen. Die augenblickliche Referenzpartikelsorte trägt die Bezeichnung EUO 2308. Für diese sind jedoch noch keine Daten bzgl. des Siliziumcarbids vorhanden, so daß den folgenden

Rechnungen die Partikelsorte EO 1607³ zugrunde gelegt ist, die sich für das HEU-Referenzpartikelkonzept qualifiziert hat.

In der Tabelle 3.4 sind die den Rechnungen zugrunde gelegten Randbedingungen sowie einige Parameter nach Ende der Bestrahlung für die beiden Reaktorkonzepte HTR-Modul und HTR-500 gegenübergestellt.

3.3.1 HTR-MODUL

Der HTR-Modul wird mit einer Mehrfachdurchlauf (MEDUL)- Beschickungsweise betrieben, bei der die Brennelementkugeln in der Regel 15 Mal das Reaktorcore durchlaufen, bis sie den Zielabbrand erreicht haben. Die Temperaturen der Kugelschüttung im Normalbetrieb steigen in axialer Richtung von oben nach unten stetig an mit hier angenommenen Werten von 320 °C an der Schüttungsoberfläche bis 850 °C am Coreaustritt (siehe Tabelle 3.4) Innerhalb seiner Lebensdauer durchwandert also ein Brennelement 15 Mal diesen Temperaturzyklus. Der sich als Funktion von Bestrahlungstemperatur und -zeit im Partikelkern aufbauende CO-Druck entspricht am Ende der Bestrahlungszeit vom 1020 d einer mittleren Bestrahlungstemperatur von 776 °C

Die maximale Störfalltemperatur im Falle des "Reaktors unter Druck" und im Druckentlastungsfall, die auch in der Trendanalyse zum HTR-Modul /15/ untersucht wurden, sind in der Abb. 3.20 dargestellt. Dabei werden im druckentlasteten Reaktor im Maximum ca. 1500 °C über einen sehr kurzen

³ Die Partikelsorte EO 1607 besitzt zwar einen (Th,U)O₂-Kern, von ihr werden jedoch nur die Werte für σ_{oo} und m_{oo} entliehen; ansonsten werden in den PANAMA-Rechnungen alle Beziehungen bzgl. UO₂ angewendet.

Tabelle 3.4: Randbedingungen zu PANAMA-Rechnungen für HTR-Modul und HTR-500

	HTR-Modul	HTR-500
Art des Partikelkerns	UO ₂	UO ₂
Abbrand [FIMA]	0.08	0.08
Fluenz [$10^{25} \text{ m}^{-2} \text{ EDN}$]	1.4	1.4
Bestrahlungsdauer [VLT]	15 * 68	1 * 700
Bestrahlungstemperatur [$^{\circ}\text{C}$]	variabel	variabel
	wobei jeweils	wobei
	0 d - 320 $^{\circ}\text{C}$	0 d - 400 $^{\circ}\text{C}$
	17 d - 560 $^{\circ}\text{C}$	200 d - 800 $^{\circ}\text{C}$
	34 d - 750 $^{\circ}\text{C}$	500 d - 850 $^{\circ}\text{C}$
	51 d - 820 $^{\circ}\text{C}$	700 d - 850 $^{\circ}\text{C}$
	68 d - 850 $^{\circ}\text{C}$	
Untersuchungszeitraum [h]	200	200
Störfalltemperatur [$^{\circ}\text{C}$]	variabel	variabel
	(Abb. 3.20)	(Abb. 3.22)
Zugfestigkeit [MPa]		
vor/nach Bestrahlung	834/756	834/754
Weibull-Parameter		
vor/nach Bestrahlung	8.02/6.93	8.02/6.91
O-Atome/Spaltung bei $t=0$	0.00511	0.00316
mittlere		
Bestrahlungstemperatur [$^{\circ}\text{C}$]	776	792

Zeitraum erreicht. In dem Fall "Reaktor unter Druck" werden sogar maximal nur 1100 $^{\circ}\text{C}$ erreicht. Der im letzteren Fall errechnete zeitliche Verlauf des Partikelbruchanteils bleibt auch nach 200 h noch unterhalb von 10^{-10} , so daß er hier nicht dargestellt ist. Aber auch im Druckentlastungsstörfall ist der Anteil defekter Partikeln (durchgezogene Linie in Abb. 3.21) auf unterhalb von 10^{-6} begrenzt.

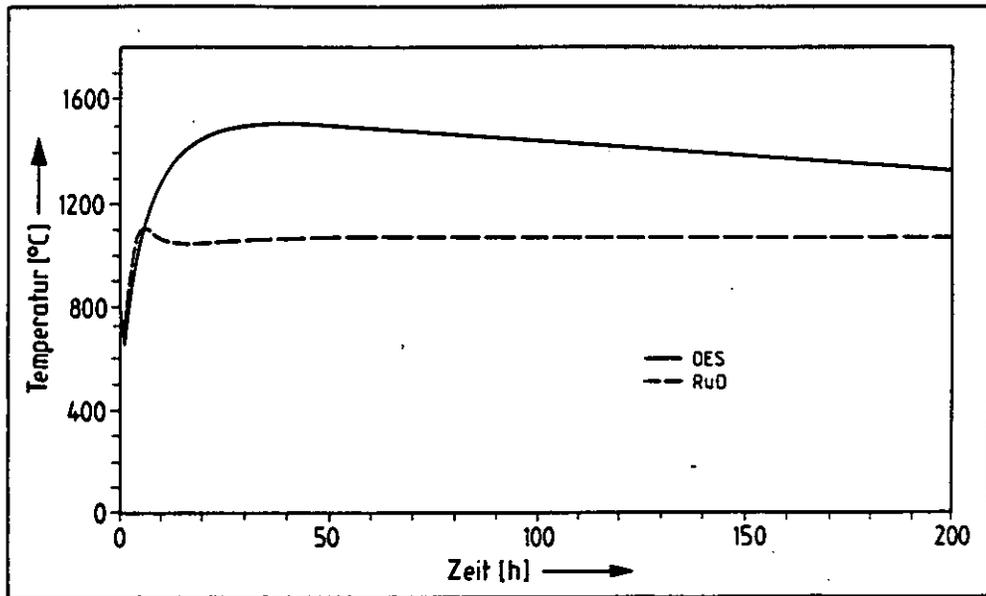


Abb. 3.20: Temperaturrandbedingungen beim HTR-Modul

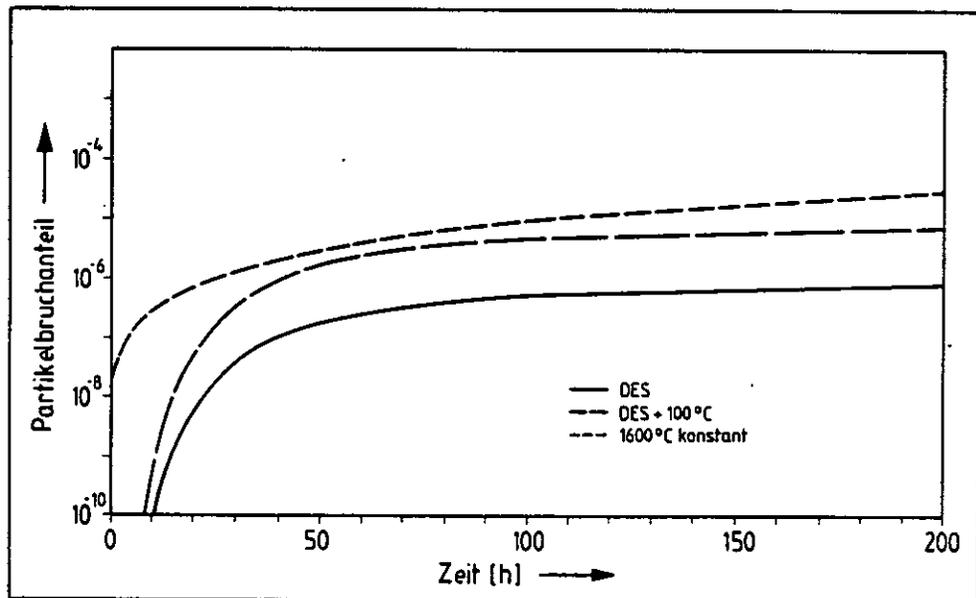


Abb. 3.21: Zeitlicher Verlauf des Anteils defekter Partikel im HTR-Modul

Zum Vergleich sind in der Abbildung zwei weitere Rechenbeispiele dargestellt, in der mittleren Kurve für den Fall einer um 100° angehobenen Störfalltemperatur und in der oberen Kurve für den Fall einer konstanten Störfalltemperatur von 1600°C . Selbst bei dieser extremen Randbedingung entspricht der Partikelbruchanteil nach 200 h weniger als 1 defekten Partikel pro Brennelement und liegt etwa 1 Größenordnung unter dem Zielwert für den bestrahlungsbedingten Partikelbruch von $2 \cdot 10^{-4}$.

3.3.2 HTR-500

Für das Reaktorkonzept des HTR-500 ist eine OTTO-Beschickung vorgesehen, d.h. die Brennelemente erreichen nach 1 Durchlauf durch das Core, entsprechend ca. 700 Volllasttagen (VLT), ihren vollen Zielabbrand. Ein wesentliches Merkmal beim OTTO-Zyklus ist das Leistungsdichtemaximum nach etwa $1/3$ Corehöhe (entsprechend ≈ 200 VLT). Demzufolge ist der Anstieg der Brennelementtemperaturen in axialer Richtung im oberen Drittel der Kugelschüttung sehr stark; sie steigt anschließend nur noch langsam an bzw. bleibt dann annähernd konstant. Als Maximaltemperatur ist hier ebenfalls 850°C angenommen worden.

Das relativ lang anhaltende hohe Temperaturniveau führt zu einer hohen mittleren Bestrahlungstemperatur, die im Falle der hier vorgegebenen Temperatur-Zeit-Geschichte (siehe Tabelle 3.4) 792°C beträgt. Die im Vergleich zum HTR-Modul etwas höhere Bestrahlungstemperatur sorgt für eine nur geringfügig stärkere Schwächung der Zugfestigkeit der TRISO-Partikel im "end-of-Life"-Zustand. Allerdings liegt wegen der kleineren Bestrahlungsdauer auch die Zahl der Sauerstoffatome pro Spaltung deutlich niedriger als beim HTR-Modul.

Die Vorhersage des Partikelbruchs als Funktion der Störfallzeit unter den oben genannten Randbedingungen ist für die drei in der Trendanalyse zum

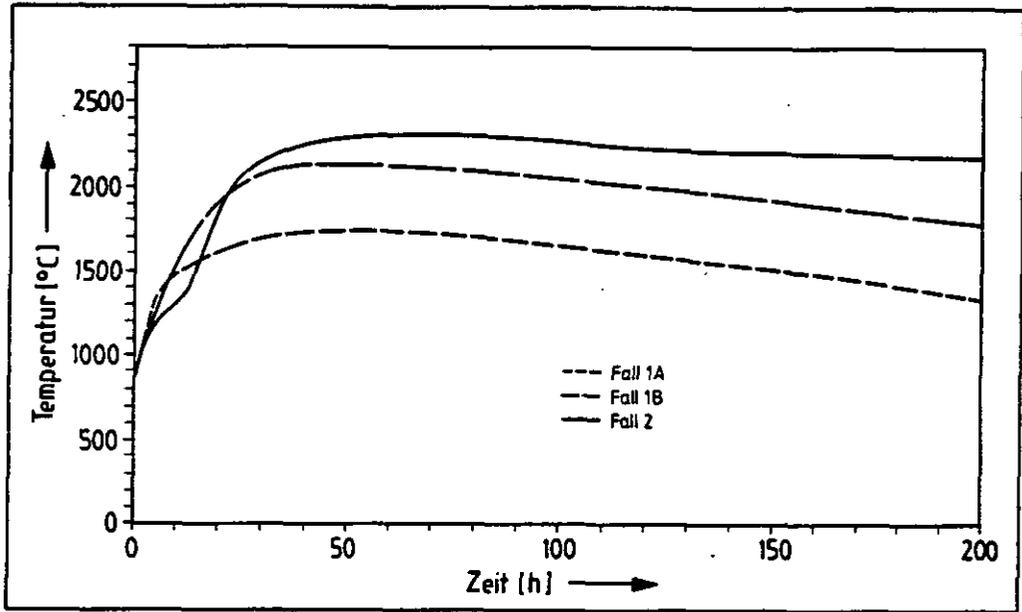


Abb. 3.22: Temperaturrandbedingungen beim HTR-500

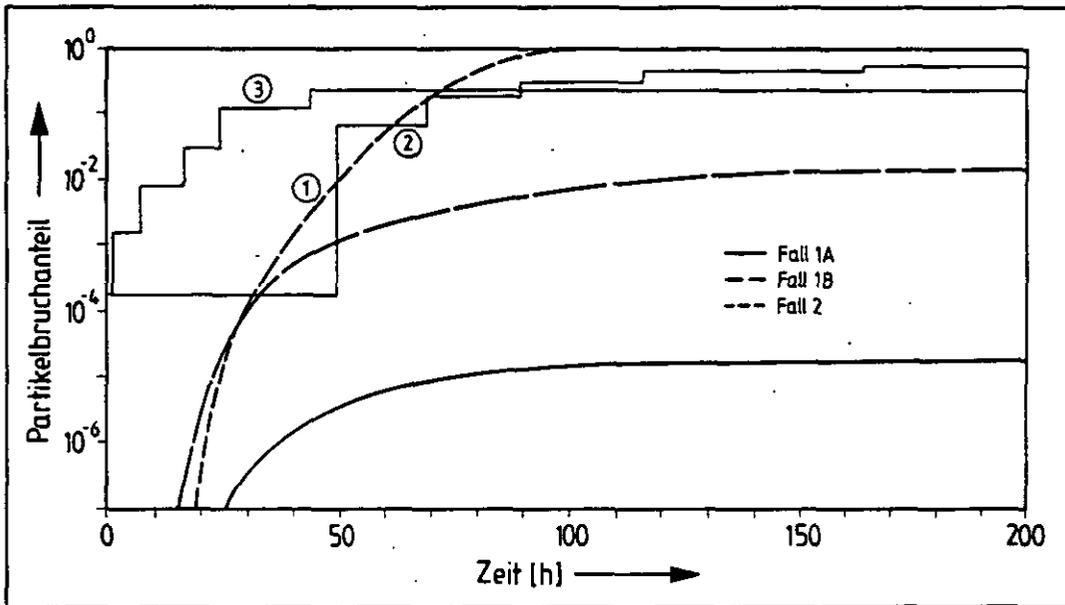


Abb. 3.23: Zeitlicher Verlauf des Anteils defekter Partikel im HTR-500

HTR-500 /16/ ausführlich behandelten Störfallsequenzen (Fälle 1A, 1B, 2) durchgeführt worden. Zugrunde gelegt ist dabei der zeitliche Temperaturverlauf im jeweiligen unterstellten Störfall an der maximal belasteten Stelle in der Kugelschüttung (siehe Abb. 3.22). Die Rechenergebnisse sind in der Abb. 3.23 dargestellt.

Die drei in dicken Linien gezeichneten Kurven entsprechen dem vorhergesagten Partikelbruchanteil in den oben genannten Störfällen. In dem Fall 1A (durchgezogene dicke Linie), welcher der passiven Nachwärmeabfuhr im Reaktor unter Druck entspricht und bei dem maximal rund 1750 °C für eine kurze Zeit erreicht werden, bleibt der störfallbedingte Partikelbruch unterhalb des Zielwertes für den bestrahlungsbedingten Partikelbruch. Im Fall 1B (lang gestrichelte dicke Kurve) werden im Maximum etwa 2150 °C erreicht; hier gelangt der Defektanteil in der Folge ab ca. 100 h in den Prozentbereich und stabilisiert sich dort in etwa. Schließlich kann man im Fall der passiven NWA im druckentlasteten Reaktor (Fall 2, kurz gestrichelte dicke Linie) bereits rund 100 h nach Störfallbeginn von dem Bruch sämtlicher Partikeln an der heißesten Stelle im Core ausgehen. In diesem Beispiel gewinnt der Beitrag zum Partikelversagen infolge thermischer Zersetzung ab etwa 40 h an Bedeutung ($> 10^{-4}$), während er ab ca. 55 h den entsprechenden Beitrag aufgrund des Druckkessel-Modells übersteigt und weiterhin rasch ansteigt. Der Fall 2 ist im Anhang C als Beispiel für einen PANAMA-Output vorgestellt.

Die Abb. 3.23 enthält für den Fall 2 zum Vergleich weitere Kurven (durchgezogene dünne Linien), hier dargestellt als Treppenfunktionen, wie sie aus programmtechnischen Gründen im FRESCO-Computercode angewendet werden. Beide entstammen ebenfalls Modellen nach Goodin. Kurve 2 entspricht einer Funktion für den Anteil defekter Partikeln, die sowohl von der Temperatur als auch von der Zeit sowie weiteren 15 empirisch bestimmten Parametern abhängt und in /17/ beschrieben ist. Dieses frühere Goodin'sche Modell enthält zwar ebenfalls wie PANAMA Beiträge zum Partikelversagen durch SiC-Korrosion und durch thermische Zersetzung, zeigt jedoch insbesondere bei langen Zeiten mit hohem Temperaturniveau einen gegenüber PANAMA zu geringen Defektanteil an. Die Kurve 3 schließlich beruht auf

einem noch älteren Modell von Goodin, welches den Anteil des Partikelbruchs lediglich durch eine allein von der Temperatur abhängige Exponentialfunktion beschreibt /18/. In diesem Modell, das auch in der Trendanalyse zum HTR-500 angewendet worden ist, wird somit der größte Anteil defekter Partikeln mit dem Erreichen der maximalen Brennelementtemperatur erzielt und gibt damit das Versagen bei langem Untersuchungszeitraum nur unzureichend wieder.

4.0 ZUSAMMENFASSUNG

Der Computercode PANAMA und die zugrunde liegenden Modellannahmen werden vorgestellt. Die Modelle basieren auf unabhängigen Messungen der Eigenschaften von TRISO-Partikeln mit einer SiC-Zwischenschicht. Wesentliche Merkmale sind die Berechnung des internen Gasdrucks, der Zugfestigkeit der Beschichtung sowie deren Abnahme bei Bestrahlung und deren Schwächung infolge der Wechselwirkung mit Spaltprodukten bei Störfällen. Bei hohen Temperaturen wird das Partikelversagen bestimmt durch thermische Zersetzung der SiC-Schicht. Eine gute Übereinstimmung erhält man für den Temperaturbereich zwischen 1600 und 2500 °C, wenn PANAMA auf das weite Spektrum bisher vorliegender Störfallsimulationsexperimente mit Kugelbrennelementen angewendet wird. Bei niedrigeren Temperaturen scheint PANAMA sehr konservativ zu sein. Vorhersagen des Partikelbruchs im Druckentlastungsstörfall mit den höchsten Temperaturen im 200 MW_{th} HTR-Modul bleiben unterhalb des Niveaus bei Normalbetriebsbedingungen. Dieselbe Aussage erhält man für den HTR-500 MW_e für die Störfallsequenz "Reaktor unter Druck". Dagegen muß im Fall des druckentlasteten Reaktors nach etwa 100 h mit dem Versagen sämtlicher Partikel (an der ungünstigsten Stelle) gerechnet werden.

Die jüngsten Ausheizexperimente bei konstant 1600 °C und Rampen bis 2500 °C mit Kugelbrennelementen, welche neue TRISO-Partikeln enthielten, zeigten extrem niedrige Freisetzungswerte für Krypton-85 und Cäsium-137. Diese stimmen nicht überein mit dem Datenmaterial, das zwischen 1975 und 1983 gewonnen worden ist, und sie können auch nicht mit dem PANAMA-Code reproduziert werden. Weitere experimentelle Untersuchungen sind daher notwendig, um die ggfs. erforderlichen Veränderungen des Modells in das Rechenprogramm zu übernehmen.

5.0 LITERATURVERZEICHNIS

- /1/ H. Nabielek, D. G. Martin
Some Studies of the Failure of Irradiated TRISO-Coated Fuel
Particles during their Anneal at High Temperatures
J. Nucl. Mat., 120(1984), 345-348
- /2/ H. J. Allelein et.al.
The Behaviour of HTR Fuel Under Irradiation
Int. Conf. Structural Mechanics in Reactor Techn. 7,
Chicago, August 1983
- /3/ B. F. Myers, N. L. Baldmin, W. E. Bell
Fission Gas Release from Fuel Particles and Fuel Rods
Nucl. Technology, 35(1977), 501-508
- /4/ G. W. Horsley et al.
Influence of Irradiation Temperature, Burnup and Fuel Composition on
Gas Pressure (Xe, Kr, CO, CO₂) in Coated Particle Fuels
J. Amer. Cer. Soc., 59(1976), 1-4
- /5/ A. Strigl, G. Peschta, E. Proksch
CO-Messungen an Mischoxidteilchen
Seibersdorf Report No. A0503, CH-328/84, 1984
- /6/ E. Proksch, A. Strigl, H. Nabielek
Production of Carbon Monoxide During Burnup of UO₂ Kerneled HTR Fuel
Particles
J. Nucl. Mat., 107(1982), 280-285
- /7/ F. Montgomery
Fission Product SiC Reaction in HTGR Fuel
GA-905837, 1981

- /8/ R. Benz
Kinetics of Decomposition of CVD SiC in Modified TRISO-Coated Fuel
Particles at Temperatures of 1600 to 2200 °C
KFA, Technische Notiz IRW-TN-124/82, Oktober 1982
- /9/ D. T. Goodin, H. Nabielek, W. Schenk
Accident Condition Testing of U.S. and FRG HTGR Fuels
JÜL-Spez in Vorbereitung
- /10/ H. Nabielek, W. Schenk, K. Verfondern
1600 °C Ausheizexperiment am AVR 15 Brennelement 70/26 der Type GO2
mit (Th,U)O₂ LTI TRISO Partikeln
KFA, Technische Notiz HBK-TN-06/84, Juni 1984
- /11/ O. M. Stansfield, D. T. Goodin, D. L. Hanson, R. F. Turner
Advances in HTGR Fuel Performance
BNES Conference on Nuclear Fuel Performance, März 1985
in Vorbereitung
- /12/ S. Leininger
Spaltproduktfreisetzung von Versuch R2-K13
HRB, PNP-5125-BF-GHRA 000868, Juli 1984
- /13/ W. Kühnlein et al.
R2-K13: Relative Spaltproduktfreisetzung und Inventar und Abbrand
von losen Partikeln
KFA, Technische Notiz IRW-TN-50/84, Mai 1984
- /14/ KFA-HBK
KFA, Quartalsbericht II/84
- /15/ KFA-ISF
Zum Störfallverhalten des HTR-Modul, Trendanalyse
KFA, JÜL-Spez-260, Juni 1984

- /16/ KFA-ISF
Zum Störfallverhalten des HTR-500, Trendanalyse
KFA, JÜL-Spez-220, September 1983
- /17/ D. T. Goodin
Accident Condition Performance of High-Temperature Gas-Cooled
Reactor Fuels
GA-A16508, Oktober 1983
- /18/ D. T. Goodin
A Single Model for the Performance of HEU/LEU Fissile and ThO₂
Fertile Fuel Under Hypothetical Accident Conditions
GA-A16291, Mai 1981
- /19/ KFA-HBK
Projektbericht 1983
Interner Bericht, KFA-HBK-IB-1/84

6.0 VERZEICHNIS DER HÄUFIG VERWENDETEN SYMBOLE

d_{akt}	aktuelle Dicke der SiC-Schicht [m]
d_o	Anfangsdicke der SiC-Schicht [m]
F_b	Schwermetallabbrand [FIMA]
F_d	Relativanteil der Spaltgasfreisetzung
F_f	fission yield der stabilen Spaltgase
FKOR	Faktor zur Verringerung der SiC-Schichtdicke
k	"Zerfallskonstante" der SiC-Schicht [s^{-1}]
m	Weibull-Parameter
m_o	Weibull-Parameter bei Ende der Bestrahlung
m_{oo}	Weibull-Parameter vor der Bestrahlung
N	Verhältnis Thorium/Uran-235
OPF	Anzahl der Sauerstoffatome pro Spaltung
p	Spaltgasdruck im Partikel [Pa]
r	mittlerer Radius der SiC-Schicht [m]
R	Gaskonstante [$J/(Mol \cdot K)$]
t_B	Zeit [s]
t	Bestrahlungszeit [s]
T	Temperatur [$^{\circ}C$]
T_B	Bestrahlungstemperatur [$^{\circ}C$]
T_m	mittlere Temperatur innerhalb der Zeitschrittweite [$^{\circ}C$]
V_f	Leervolumen im Puffer [m^3]
V_k	Kernvolumen [m^3]
V_m	molares Volumen im Partikelkern [m^3/Mol]

ζ	"Aktionsintegral" bzw. "Benz-Parameter"
$\dot{\eta}$	SiC-Korngrenzen-Korrosionsrate [s^{-1}]
\dot{v}	SiC-Volumen-Korrosionsrate [m/s]
σ_o	SiC-Zugfestigkeit bei Ende der Bestrahlung [Pa]
σ_{oo}	SiC-Zugfestigkeit vor der Bestrahlung [Pa]
σ_t	in der SiC-Schicht induzierte Spannung [Pa]
ϕ_1	Partikelbruchanteil (Druckkessel-Modell)
ϕ_2	Partikelbruchanteil (thermische Zersetzung)
ϕ_{gesamt}	Gesamtpartikelbruchanteil
$\dot{\phi}_1$	Partikelbruchrate $\Delta\phi_1/\Delta t$ [s^{-1}]
$\dot{\phi}_2$	Partikelbruchrate $\Delta\phi_2/\Delta t$ [s^{-1}]
$\dot{\phi}_{gesamt}$	Partikelbruchrate $\Delta\phi_{gesamt}/\Delta t$ [s^{-1}]

7.0 DANKSAGUNG

Unser herzlicher Dank gilt *Frau S. Begemann* für die zahlreichen, mit großer Sorgfalt angefertigten Zeichnungen.

A.0 INPUT-BESCHREIBUNG

I N P U T

P A N A M A

Karte 1: Integer-Konstanten

Einlesebedingung: immer
Format: 14 i 5
Anzahl: 3

Spalten Variable Bedeutung

1 - 5	LSCP	Art des Partikelkerns 1 = (Th,U)O ₂ -Kern 2 = UO ₂ -Kern
6 - 10	IFKOKO	Berücksichtigung von Korngrenzenkorrosion 0 = nein 1 = ja
11 - 15	IOUT	Ausdrucken von Ergebnissen 0: wie 1 1: t, T, ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ , log ϕ 2: t, T, log ϕ_1 , log ϕ_2 , ϕ , log ϕ 3: t, T, log ϕ_1 , log ϕ_2 , ϕ , log ϕ 4: t, T, log ϕ_1 , log ϕ_2 , F _d , log F _d 5: t, log t, log ϕ_1 , log ϕ_2 , ϕ , log ϕ 6: t, T, F _k , F _d , OPF, p, m 7: t, T, ζ , log ζ , ϕ_2 , log ϕ_2 mit t in [h] und T in [°C]

Karte 2:**Geometrie des TRISO-Partikels**

Einlesebedingung: immer
Format: 6 E 10.3
Anzahl: 5

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10	RRI1(1)	Außenradius der oLTI-Schicht (= Außenradius des Partikels)
11 - 20	RRI1(2)	Außenradius der SiC-Schicht
21 - 30	RRI1(3)	Außenradius der iLTI-Schicht
31 - 40	RRI1(4)	Außenradius der Puffer-Schicht
41 - 50	RRI1(5)	Außenradius des Partikelkerns

Angaben jeweils in [m]

Karte 3:**Real-Konstanten**

Einlesebedingung: immer
Format: 6 E 10.3
Anzahl: 6

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10 SIGMU	SiC-Zugfestigkeit vor der Bestrahlung [Pa]
11 - 20 WMU	Weibull-Parameter
21 - 30 FIMA	Abbrand [FIMA]
31 - 40 FF	relative Gasfreisetzung
41 - 50 GA	Fluenz [$10^{25} \text{ m}^{-2} \text{ EDN}$]
51 - 60 VTU	Gewichtsverhältnis Thorium / Uran-235 im Partikelkern VTU wird nur benötigt bei Partikeln mit (Th,U)O ₂ -Kern (LSCP = 1 auf Karte 1)

Karte 4: Real-Konstanten

Einlesebedingung: immer
Format: 6 E 10.3
Anzahl: 2

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10 ALPHA Vorfaktor beim Aktionsintegral ζ

11 - 20 BETA Exponent beim Aktionsintegral ζ

zur Berechnung von ϕ_2

$$\phi_2 = 1 - e^{-\text{ALPHA} * \zeta^{\text{BETA}}}$$

Karte 5:**Bestrahlungstemperaturen**

Einlesebedingung: immer
Format: 3 E 10.3, I 10
Anzahl: 4

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10 TBB	konstante Bestrahlungstemperatur [$^{\circ}$ C] Bei TBB = -1. wird im Anschluß an diese Karte die Eingabe der Bestrahlungstemperatur-Zeit- Geschichte verlangt
11 - 20 ZBEND	Bestrahlungsdauer [d]
21 - 30 DZEITB	Zeitintervalllänge der Bestrahlungszeit [d] wird benutzt zur Berechnung der mittleren Bestrahlungstemperatur und des CO-Drucks in Partikeln mit UO ₂ -Kern
31 - 40 NPMAX	z.Zt. ohne Bedeutung

Karte 6: Bestrahlungstemperaturen

Einlesebedingung: TBB = -1. (Karte 5)
Format: 6 E 10.3
Anzahl: 2

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10	ZTBS(ITZ)	Bestrahlungszeitpunkt [d]
11 - 20	TTBS(ITZ)	Bestrahlungstemperatur [$^{\circ}$ C] zum Zeitpunkt TTBS(ITZ)

Bemerkung:

Es sind maximal 100 solcher Karten möglich. Sie werden mit Hilfe des Zählers ITZ durchnummeriert.

Diese Eingabe wird abgeschlossen durch eine Leerkarte!

Karte 7:**Störfalltemperaturen**

Einlesebedingung: immer
Format: 3 E 10.3, I 10
Anzahl: 4

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10 TGG	konstante Störfall- bzw. Glüh­temperatur[°C] Bei TGG = -1. wird im Anschluß an diese Karte die Eingabe der Störfalltemperatur-Zeit- Geschichte verlangt
11 - 20 ZEND	Untersuchungszeitraum [h]
21 - 30 DZEIT	Zeitintervalllänge [h]
31 - 40 NPMAX	Anzahl der Zeitschritte, nach der jeweils ein Ausdruck von Ergebnissen erfolgt

Karte 8: Störfalltemperaturen

Einlesebedingung: TGG = -1. (Karte 7)

Format: 6 E 10.3

Anzahl: 2

Spalten Variable Bedeutung

1 - 10 ZTG(ITZ) Störfallzeitpunkt [h]

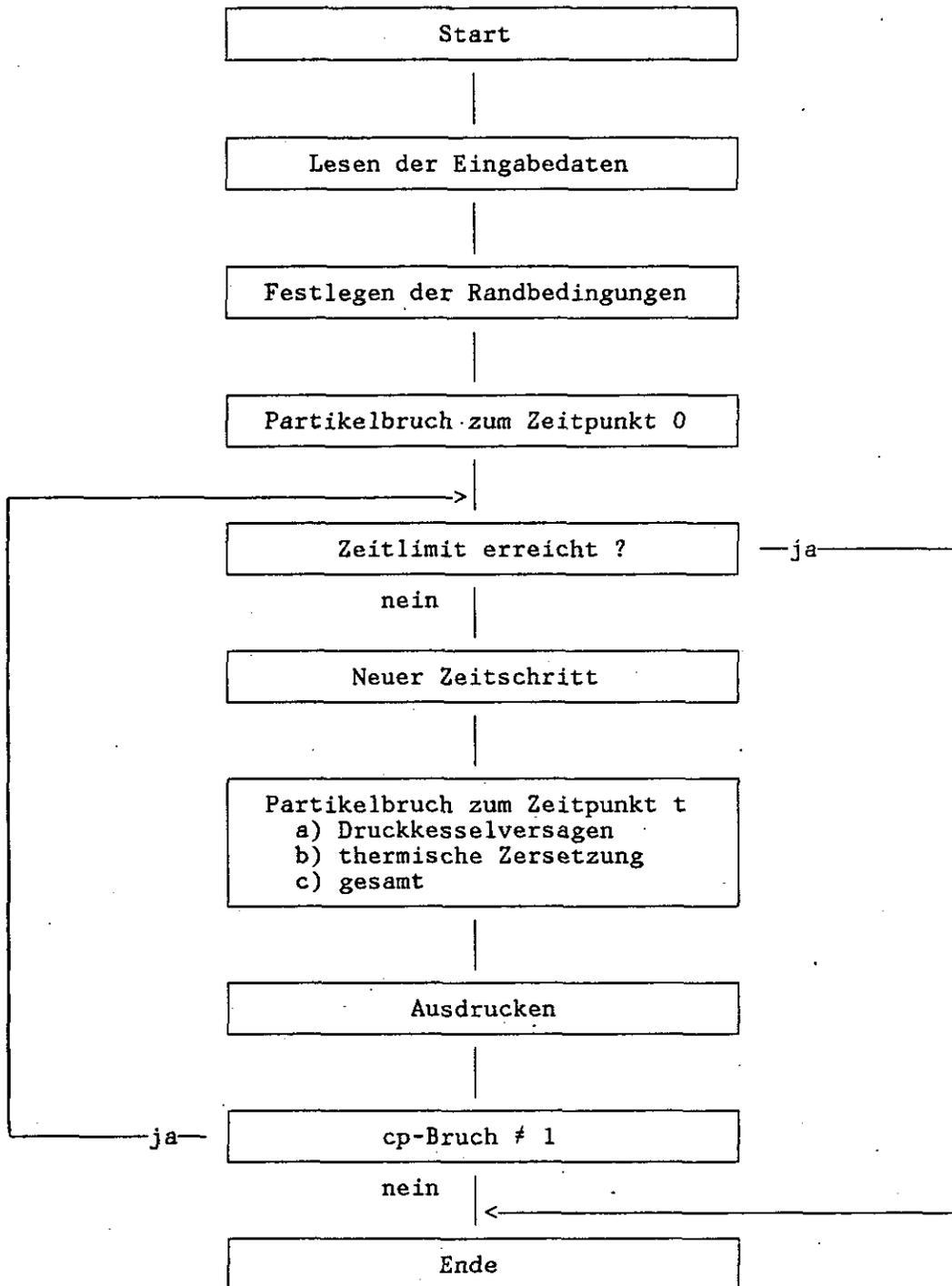
11 - 20 TTG(ITZ) Störfall- bzw. Glühtemperatur [$^{\circ}$ C]
zum Zeitpunkt ZTG(ITZ)

Bemerkung:

Es sind maximal 100 solcher Karten möglich. Sie werden mit Hilfe des Zählers ITZ durchnummeriert.

Diese Eingabe wird abgeschlossen durch eine Leerkarte!

B.0 PANAMA - PROGRAMMSHEMA UND -LISTING



```

C*****
C-----
C*****          P A N A M A          *****
C-----
C*****          PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER          *****
C***** BRUCHANTEILS FUER TRISO-PARTIKEL NACH NABIELEK UND MARTIN *****
C-----
C*****
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL * 4 ZEIH,ZLOG,DPL,DPLOG,PL1,PLOG1,DPL1,DPLOG1,FDPL1,FDPLOG
REAL * 4 BENZ4,BENZ4L,PL2,PLOG2,DPL2,DPLOG2,PLG,PLOGG
COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
COMMON /REAL3/  ALPHA,BETA
COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
COMMON /TGLUEH/ ZTG(100),TTG(100),TGG,ITZM
COMMON /TBESTR/ ZTBS(100),TTBS(100),TBB,ITBZM
DATA R      /8.3143      /

C
C-----
C***** LESEN DER EINGABEDATEN
C-----
      CALL DLESEN

C
C-----
C***** FESTLEGEN DER RANDBEDINGUNGEN
C-----
      CALL RAND (OPF)

C
RTBS   = R * TBS
PBRALT = 0.
PHI    = 0.
PHI1   = 0.
PHI2   = 0.
PHIA   = 0.
PHI2A  = 0.
TAUA   = 0.
ALZ    = 0.
FKOR   = 1.
BENZP  = 0.
FTHZ   = 0.

C
C-----
C***** HERSTELLUNGSBEDINGTER PARTIKELBRUCH
C-----
      PHIO = 0.

C
C-----
C***** PARTIKELBRUCH ZUM ZEITPUNKT 0
C-----
      ZEIT = 0.
      ZLOG = 0.
      DZ   = 0.
      TG   = TBS
      FD   = GASFR (FIMA,TBS,TBS,ZBS,DZ,TAUA)
      CALL BRUCH (PHI1,ZEIT,DZ,FD,OPF,RTBS,ALZ,FKOR,P)
      ZEIT2 = 3600. * 1.D-50
      DPBR1 = 0.
      DPBR2 = 0.

```

```

DPBR = 0.
BENZP = 1.D-50
FKOALT = FKOR
FDALT = FD
GO TO 910

```

```

C
C-----
C***** PARTIKELBRUCH ZUM ZEITPUNKT ZEIT2
C-----

```

```

999 CONTINUE
IF (ZEIT .GT. ZS) GO TO 1000
NP = NPMAX
IF (ZEIT .GT. 1.8D+06) NP = 10 * NPMAX
IF (ZEIT .GT. 3.6D+06) NP = 50 * NPMAX
DO 900 N=1,NP
NAKT = N
ZEIT2 = ZEIT
ZEIT1 = ZEIT2
ZEIT2 = ZEIT2 + DZEIT
TG1 = TEMP (ZEIT1,ZTG,TTG,TGG,ITZM)
TG2 = TEMP (ZEIT2,ZTG,TTG,TGG,ITZM)
TG = 0.5 * (TG1 + TG2)
RT = R * TG

```

```

C
C-----
C***** PARTIKELBRUCH INFOLGE DRUCKKESSEL UND SIC-KORROSION
C-----

```

```

CALL PBPHI1 (PHI1,DPBR1,ZEIT1,ZEIT2,TG,
             FKOALT,FKOR,OPF,FDALT,FD,ALZ,TAUA)
DPBR1 = DPBR1 / DZEIT

```

```

C
C-----
C***** PARTIKELBRUCH INFOLGE THERMISCHER ZERSETZUNG DES SIC.
C-----

```

```

PHI2 = 0.
CALL PBPHI2 (PHI2,BENZP,RT,ZEIT2)
DPBR2 = (PHI2 - PHI2A) / DZEIT
PHI2A = PHI2

```

```

C
C-----
C***** GESAMTPARTIKELBRUCH
C-----
PHI = 1. - (1.-PHI0)*(1.-PHI1)*(1.-PHI2)
DPBR = (PHI - PHIA) / DZEIT
PHIA = PHI

```

```

C
ZEIT = ZEIT + DZEIT
FKOALT = FKOR
FDALT = FD

```

```

900 CONTINUE

```

```

C
910 CONTINUE

```

```

C-----
C***** AUSDRUCKEN
C-----

```

```

ZEIH = ZEIT2 / 3600.
ZLOG = ALOG10(ZEIH)
T4 = TG - 273.
PL1 = PHI1
IF (PL1 .LE. 0.) PL1 = 1.E-50

```

```

PLOG1 = ALOG10(PL1)
DPL1 = DPBR1
IF (DPL1 .LE. 0.) DPL1 = 1.E-50
DPLOG1 = ALOG10(DPL1)
FDPL1 = PHI * FD
IF (FDPL1 .LE. 0.) FDPL1 = 1.E-50
FDPLOG = ALOG10(FDPL1)
PL2 = PHI2
IF (PL2 .LE. 0.) PL2 = 1.E-50
PLOG2 = ALOG10(PL2)
DPL2 = DPBR2
IF (DPL2 .LE. 0.) DPL2 = 1.E-50
DPLOG2 = ALOG10(DPL2)
PLG = PHI
IF (PLG .LE. 0.) PLG = 1.E-50
PLOGG = ALOG10(PLG)
DPL = DPBR
IF (DPL .LE. 0.) DPL = 1.E-50
DPLOG = ALOG10(DPL)
BENZ4 = BENZP
BENZ4L = ALOG10(BENZ4)
C
IF (IOUT .EQ. 1)
WRITE (6,991) ZEIH,T4,PL1,PL2,PLG,PLOGG
IF (IOUT .EQ. 2)
WRITE (6,992) ZEIH,T4,PLOG1,PLOG2,PLG,PLOGG
IF (IOUT .EQ. 3)
WRITE (6,992) ZEIH,T4,DPLOG1,DPLOG2,DPL,DPLOG
IF (IOUT .EQ. 4)
WRITE (6,992) ZEIH,T4,PLOG1,PLOG2,FDPL1,FDPLOG
IF (IOUT .EQ. 5)
WRITE (6,995) ZEIH,ZLOG,PLOG1,PLOG2,PLG,PLOGG
991 FORMAT (2(2X,F10.2),3(1X,E12.5),1X,F10.5)
992 FORMAT (2(2X,F10.2),2(2X,F10.5),1X,E12.5,1X,F10.5)
995 FORMAT (2X,F10.2,3(2X,F10.5),1X,E12.5,1X,F10.5)
C
C***** ABRUCH DER RECHNUNG, WENN PHI = 1.
DSPLG = 1. - PLG
IF (DABS(DSPLG) .LT. 1.D-05) GO TO 1000
GO TO 999
1000 CONTINUE
STOP
END
C
C
C

```

```

SUBROUTINE BRUCH (PBR,ZEIT,DZEIT,FD,OPF,RT,ALZ,FKOR,P)
C-----
C***** PARTIKELBRUCH ZU EINEM BESTIMMTEN ZEITPUNKT
C***** P : INTERNER SPALTGASDRUCK PA
C***** WM : WEIBULL-PARAMTER NACH GLUEHUNG
C***** EXX: VERHAELTNIS VON SIGMA(T) ZU SIGMA(0)
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
      COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
      DATA ELN2 /0.693147181/
C
      P      = (FF*FD + OPF) * AKON1 * RT
      WM     = WMO
      IF (IFKOKO .EQ. 0) GO TO 10
      AL     = 0.565 * DEXP(-187.4E+03/RT)
      ALZ    = ALZ - AL * DZEIT
      WM     = WMO * (0.44 + 0.56 * DEXP(ALZ))
10      EXX  = P * AKON2 * FKOR
      EEX    = ELN2 * EXX**WM
      IF (EEX .GT. 150.) EEX = 150.
      PBR    = 1. - DEXP(-EEX)
      RETURN
      END
C
C
C
      REAL FUNCTION CORRO*8 (RT)
C-----
C***** GKOR: KORROSIONSRATE NACH MONTGOMERY M/S
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
      COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
C
      D      = 5.87D-07
      Q      = 179.5D+03
      GKOR   = D * DEXP(-Q/RT)
      CORRO  = GKOR * DZEIT / DO
      RETURN
      END
C
C
C
      REAL FUNCTION CORRT*8 (RT)
C-----
C***** THERMISCHE ZERSETZUNGSGESCHWINDIGKEIT NACH BENZ M/S
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
C
      D      = 375. / DO
      Q      = 556.D+03
      CORRT  = D * DEXP(-Q/RT)
      RETURN
      END
C
C
C

```

SUBROUTINE DLESEN

```

C-----
C***** LESEN DER EINGABEDATEN
C-----
C***** RRI1 : RADIEN DER CP-SCHICHTEN VON AUSSEN NACH INNEN M
C*****          (FUER TRISO 5 WERTE + 0.)
C***** LSCP : 1 = (TH,U)O2 / 2 = UO2
C***** IFKOKO: 0/1 = MIT SIC-KORNGRENZENKORROSION
C***** SIGMU: SIC-ZUGFESTIGKEIT (MEDIANWERT) UNBESTRAHLT PA
C***** WMU : WEIBULL-PARAMETER UNBESTRAHLT
C***** FIMA : SCHWERMETALLABBRAND
C***** FF : SPALTPRODUKTAUSBEUTE DER STABILEN SPALTGASE
C***** GA : FLUENZ 10**21 CM**(-2) EDN
C***** VTU : VERHAELTNIS THORIUM/URAN-235
C***** TBS : BESTRAHLUNGSTEMPERATUR GRD C
C***** ZBEND : BESTRAHLUNGSZEIT D
C***** TGG : GLUEHTEMPERATUR ( = -1. BEI TRANSIENTEN) GRD C
C*****          (ZTG,TTG GLUEHZEIT, -TEMPERATUR)
C***** ZEND : ENDZEIT H
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /INT1/ LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
      COMMON /REAL2/ RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
      COMMON /REAL3/ ALPHA,BETA
      COMMON /REAL4/ ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
      COMMON /TGLUEH/ ZTG(100),TTG(100),TGG,ITZM
      COMMON /TBESTR/ ZTBS(100),TTBS(100),TBB,ITBZM
      DIMENSION RRI1(6),RR1(6)
      DATA PI43 /4.188790207/

C
C
      READ (5,100) LSCP,IFKOKO,IOUT
100  FORMAT (14I5)
      IF (LSCP .EQ. 1) WRITE (6,1010)
1010 FORMAT (1H1,9X,41HBRUCHMODELL NACH NABIELEK UND MARTIN FUER,
           24H (TH,U)O2-TRISO-PARTIKEL/10X,65(1H=))
      IF (LSCP .EQ. 2) WRITE (6,1020)
1020 FORMAT (1H1,9X,41HBRUCHMODELL NACH NABIELEK UND MARTIN FUER,
           19H UO2-TRISO-PARTIKEL/10X,60(1H=))
      IF (IOUT .EQ. 0) IOUT = 1

C
      READ (5,110) (RRI1(I),I=1,5)
110  FORMAT (6E10.3)
      RRI1(6) = 0.
      DO 10 I=1,6
10   RR1(I) = RRI1(I) * 1.D+06
      WRITE (6,1030) (RR1(I),I=1,6)
1030 FORMAT (///10X,18HPARTIKELGEOMETRIE:/10X,18(1H-)//
           10X,6F12.2,15H IN MIKROMETER)
      N41 = 5
      ISIC = 2

C
      IF (IFKOKO .EQ. 0) WRITE (6,1040)
1040 FORMAT (//10X,42HOHNE BERUECKSICHTIGUNG DER SIC-KORNGRENZEN,
           10H-KORROSION/10X,4(1H-))
      IF (IFKOKO .EQ. 1) WRITE (6,1050)
1050 FORMAT (//10X,42HMIT BERUECKSICHTIGUNG DER SIC-KORNGRENZEN,
           10H-KORROSION/10X,4(1H-))

C

```

```

READ (5,110) SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU
IF (VTU .EQ. 0.) VTU = 10.
C
READ (5,110) ALPHA,BETA
WRITE (6,1060) ALPHA,BETA
1060 FORMAT (//10X,44HBERECHNUNG DES ANTEILS DEFEKTER PARTIKEL AUS,
           28H THERMISCHER ZERSETZUNG PHI2/
           10X,27HMIT DEN KONSTANTEN ALPHA =,E12.5/
           30X, 7HBETA =,E12.5)
C
CALL DTLES (ZTBS,TTBS,ZBEND,TBB,DZEITB,NPMAX,ITBZM)
ZBS = ZBEND * 24. * 3600.
DZEITB = DZEITB * 24. * 3600.
DO 20 I=1,ITBZM
20 ZTBS(I) = ZTBS(I) * 24. * 3600.
C
CALL DTLES (ZTG, TTG, ZEND, TGG,DZEIT, NPMAX,ITZM)
ZS = ZEND * 3600.
DZEIT = DZEIT * 3600.
DO 30 I=1,ITZM
30 ZTG(I) = ZTG(I) * 3600.
C
-----
C***** IFGASF: SCHALTER, WENN 100 GASFREISETZUNG ERREICHT
C***** DO : DICKE DER SIC-SCHICHT M
C***** RO : MITTLERER RADIUS DER SIC-SCHICHT M
C***** VK : KERNVOLUMEN M**3
C***** VF : LEERVOLUMEN (=50 PUFFERVOLUMEN)
C***** VM : MOLARES VOLUMEN DES SCHWERMETALLS IM CP-KERN M**3/MOL
C-----
IFGASF = 0
DO = RRI1(ISIC) - RRI1(ISIC+1)
DOM = DO * 1.D+06
RA3 = RRI1(ISIC) * RRI1(ISIC) * RRI1(ISIC)
RI3 = RRI1(ISIC+1) * RRI1(ISIC+1) * RRI1(ISIC+1)
RO = ((RA3 + RI3) * 0.5)**0.333333333
ROM = RO * 1.D+06
WRITE (6,201) RRI1(ISIC+1),RRI1(ISIC),DOM,ROM
201 FORMAT (///10X,12HSIC-SCHICHT:/10X,12(1H-)//
          10X,20HINNEN- AUSSEN RADIUS:,2F12.2,12H MIKROMETER/
          10X,13HSCHICHTDICKE:,19X,F12.2,12H MIKROMETER/
          10X,17HMITTLERER RADIUS:,15X,F12.2,12H MIKROMETER)
C
VK = PI43 * (RRI1(N41))**3
VF = (PI43*(RRI1(N41-1))**3 - VK) * 0.5
C***** (TH,U)O2-PARTIKELKERN
IF (LSCP .EQ. 1) VM = 2.5190471D-05
C***** UO2-PARTIKELKERN
IF (LSCP .EQ. 2) VM = 2.4379551D-05
AKON1 = FIMA * VK / (VF * VM)
RETURN
END
C
C
C

```

```

SUBROUTINE DTLES (ZZ,TT,Z,T,DZ,NPMAX,ITM)
C-----
C***** LESEN DER TEMPERATURGESCHICHTE (BESTRAHLUNG UND GLUEHUNG)
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION ZZ(100),TT(100)
C
      READ (5,100) T,Z,DZ,NPMAX
100    FORMAT (3E10.3,I10)
      IF (T .NE. -1.) GO TO 300
      ITZ = 0
999    ITZ = ITZ + 1
      IF (ITZ .GT. 100) GO TO 200
      READ (5,110) ZZ(ITZ),TT(ITZ)
110    FORMAT (6E10.3)
      IF (ZZ(ITZ).GT.0. .OR. TT(ITZ).GT.0.) GO TO 999
      ITM = ITZ - 1
      GO TO 300
200    WRITE (6,210)
210    FORMAT (15H ***** ACHTUNG:/33H ***** ZUWENIG SPEICHERPLATZ FUER,
              42H TEMPERATURFELD - DIMENSIONIERUNG ERHOEHEN)
300    CONTINUE
      RETURN
      END
C
C
C
      REAL FUNCTION GASFR*8 (FIMA,TBS,TG,ZBS,DTZ,TAUA)
C-----
C***** BESTIMMUNG DER SPALTGASFREISETZUNG (RELATIV)
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /INT1/ LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
      DATA ZEHN /2.302585093/
C
      IF (LSCP .NE. 1) GO TO 250
C***** (TH,U)O2-PARTIKELKERN
      DS = - 5.94 + 3.24 / (1. + 0.11/FIMA)
      DS1 = DS - 5460. / TBS
      DS2 = DS - 5460. / TG
      GO TO 260
C***** UO2-PARTIKELKERN
250    CONTINUE
      DS1 = - 2.30 - 8116. / TBS
      DS2 = - 2.30 - 8116. / TG
C
260    DS1 = DEXP(DS1*ZEHN)
      DS2 = DEXP(DS2*ZEHN)
      TAU1 = DS1 * ZBS
      TAU2 = TAU1 + DS2 * DTZ
      TAU3 = TAU1 + TAU2
      FDA = TAUGK (TAU3)
      FDS = TAUGK (TAU3)
      GASF = FDS + TAU2/TAU1 * (FDS - FDA)
      IF (GASF .LE. 1.) GO TO 300
      WRITE (6,291)
291    FORMAT (41H ***** SPALTGASFREISETZUNG BETRAEGT 100 )
      GASF = 1.
      IFGASF = 1
300    GASFR = GASF

```

```

RETURN
END
C
C
C
SUBROUTINE PBPHI1 (PHI1,DPBR1,ZEIT1,ZEIT2,TG,
                  FKOALT,FKOR,OPF,FDALT,FD,ALZ,TAUA)
C-----
C***** PARTIKELBRUCH INFOLGE DRUCKKESSEL UND SIC-KORROSION
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      REAL * 4 ALZ4,P4,EXX4,EEX4
      COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
      COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
      COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
      DATA R      /8.3143      /
C
      DZEIT = ZEIT2 - ZEIT1
      RT    = R * TG
C-----
C***** FKOR: SIC-SCHICHT-VERDUENNUNG DURCH VOLUMENKORROSION
C-----
      DFKOR = CORRO (RT)
      FKOR  = FKOR + DFKOR
C
C-----
C***** OPF: SAUERSTOFFATOME PRO SPALTUNG
C-----
      OPF    = SAUERG (TG)
C
C-----
C***** FD : SPALTGASFREISETZUNG (RELATIVANTEIL)
C-----
      IF (IFGASF .NE. 1) GO TO 710
      FD      = 1.
      GO TO 720
710  FD      = GASFR (FIMA,TBS,TG,ZBS,DZEIT,TAUA)
C
720  CONTINUE
C-----
C***** PHI1:  PARTIKELBRUCHANTEIL
C-----
      ZEITD = 0.
      CALL BRUCH (PBR1,ZEIT1,ZEITD,FDALT,OPF,RT,ALZ,FKOALT,P)
      CALL BRUCH (PBR2,ZEIT2,DZEIT,FD,OPF,RT,ALZ,FKOR,P)
      DPBR1 = PBR2 - PBR1
      IF (DPBR1 .GE. 0.) GO TO 800
      WRITE (6,801) ZEIT2,TG,PHI1,DPBR1
801  FORMAT (39H ***** PARTIKELBRUCHANTEIL WIRD KLEINER/
           28H ***** ZEIT,TEMP,PHI1,DPBR1:,4E12.5)
      GO TO 810
800  PHI1    = PHI1 + DPBR1
810  CONTINUE
      IF (IOUT .NE. 6) GO TO 900
      IF (NAKT .NE. NP) GO TO 900
      ZEITH  = ZEIT2 / 3600.
      P4     = P * 1.E-06
      T4     = TG - 273.

```

```

      WRITE (6,820) ZEITH,T4,FKOR,FD,OPF,P4,WM
820  FORMAT (2(2X,F10.2),5(2X,F10.5))
900  CONTINUE
      RETURN
      END

C
C
C
      SUBROUTINE PBPHI2 (PHI2,BENZP,RT,ZEIT2)
C-----
C***** PARTIKELBRUCH INFOLGE THERMISCHER ZERSETZUNG DES SIC
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      REAL*4  BENZ4,BENZ4L,PL2,PLOG2
      COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NP,NMAX,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL3/  ALPHA,BETA
      COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
      DATA ZEHN /2.302585093/

C
      FTHZ  = CORRT (RT)
      BENZP = BENZP + FTHZ * DZEIT
C***** EX  = ALPHA * BENZP**BETA
      ALEX  = DLOG10(ALPHA) + BETA * DLOG10(BENZP)
      IF (ALEX .LT. -50.) ALEX = -50.
      EX    = DEXP(ALEX*ZEHN)
      PHI2  = EX
      IF (EX .LT. 1.D-05) GO TO 10
      PHI2  = 1. - DEXP(-EX)

C
10  CONTINUE
      IF (IOUT .NE. 7) GO TO 200
      IF (NAKT .NE. NP) GO TO 200
      ZEITH = ZEIT2 / 3600.
      T4    = RT / 8.3143 - 273.
      BENZ4 = BENZP
      BENZ4L = ALOG10(BENZ4)
      PL2    = PHI2
      IF (PL2 .LE. 0.) PL2 = 1.E-50
      PLOG2  = ALOG10(PL2)
      WRITE (6,100) ZEITH,T4,BENZ4,BENZ4L,PL2,PLOG2
100  FORMAT (2(2X,F10.2),2(1X,E12.5,2X,F10.5))
200  CONTINUE
      RETURN
      END

C
C
C

```

```

SUBROUTINE RAND (OPF)
C-----
C***** FESTLEGEN DER RANDBEDINGUNGEN
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NP,NMAX,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
      COMMON /REAL2/  RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
      COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
      DATA ZEHN /2.302585093/

C
C-----
C***** BERECHNUNG VON OPF AUS DER BESTRAHLUNGSVORGESCHICHTE
C***** SOWIE DER MITTLEREN BESTRAHLUNGSTEMPERATUR TBS
C-----
      OPF = 0.
      CALL SAUERB (OPF)

C
C-----
C***** WMO : WEIBULL-PARAMETER NACH BESTRAHLUNG VOR GLUEHUNG
C***** SIGM : SIC-ZUGFESTIGKEIT (MEDIANWERT) PA
C-----
      GEX = 0.065E+04 / TBS
      GAM = 0.394 + GEX
      GAM = DEXP(GAM*ZEHN)
      WMA = 2.
      WMB = WMU * (1. - GA/GAM)
      WMO = DMAX1(WMA,WMB)
      GAS = 0.556 + GEX
      GAS = DEXP(GAS*ZEHN)
      SIGMA = 196.D+06
      SIGMB = SIGMU * (1. - GA/GAS)
      SIGM = DMAX1(SIGMA,SIGMB)
      AKON2 = 0.5 * RO / DO / SIGM

C
      SI1 = SIGMU * 1.D-06
      SI2 = SIGM * 1.D-06
      TB = TBS - 273.
      FIM = FIMA * 100.
      WRITE (6,100) ZBEND,TB,GA,VTU,FIM,SI1,SI2,WMU,WMO
100  FORMAT (///10X,'RANDBEDINGUNGEN:' /10X,16(1H-)//
       10X,25HBESTRAHLUNGSZEIT:      ,F12.2,2H D/
       10X,25HBESTRAHLUNGSTEMPERATUR: ,F12.2,6H GRD C/
       10X,25HFLUENZ:                ,F12.2,17H 10**25 M**-2 EDN/
       10X,25HVERHAELTNIS TH/U-235   ,F12.2,/
       10X,25HSCHWERMETALLABBRAND:    ,F12.2,7H FIMA/
       10X,25HSIC-ZUGFESTIGKEIT      ,F12.2,
       24H MPA VOR BESTRAHLUNG UND,F12.2,21H MPA NACH BESTRAHLUNG,
       13H VOR GLUEHUNG/
       10X,25HWEIBULL-PARAMETER:      ,F12.2,
       24H VOR BESTRAHLUNG UND,F12.2,21H NACH BESTRAHLUNG,
       13H VOR GLUEHUNG)

C
      IF (IOUT .EQ. 1) WRITE (6,210)
210  FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),6X,4HPHI1,9X,
           4HPHI2,8X,6HPHIGES,7X,5HPGLOG/4X,73(1H=))
      IF (IOUT .EQ. 2) WRITE (6,220)
220  FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),6X,5HP1LOG,7X,
           5HP2LOG,6X,6HPHIGES,7X,5HPGLOG/4X,71(1H=))

```

```

230 IF (IOUT .EQ. 3) WRITE (6,230)
    FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),5X,6HDP1LOG,6X,
           6HDP2LOG,6X,6HDPHI-G,6X,6HDPGLOG/4X,71(1H=))
    IF (IOUT .EQ. 4) WRITE (6,240)
240 FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),6X,5HP1LOG,7X,
           5HP2LOG,6X,5HGASFR,7X,7HGASFR-L/4X,71(1H=))
    IF (IOUT .EQ. 5) WRITE (6,250)
250 FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),3X,8HZEIT-LOG,6X,5HP1LOG,6X,
           5HP2LOG,7X,6HPHIGES,7X,5HPGLOG/4X,70(1H=))
    IF (IOUT .EQ. 6) WRITE (6,260)
260 FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),6X,6HFKORRO,6X,
           6HGASF-F,4X,8HCO-DRUCK,3X,10HDRUCK(MPA),
           5X,6HWEIB-P/4X,83(1H=))
    IF (IOUT .EQ. 7) WRITE (6,270)
270 FORMAT (1H1,5X,7HZEIT(H),4X,7HTEMP(C),5X,7HAKT-INT,5X,
           5HAILOG,6X,4HPHI2,5X,5HP2LOG/4X,70(1H=))

RETURN
END

```

C
C
C

SUBROUTINE SAUERB (OPF)

C-----
C***** BESTIMMUNG DES CO-DRUCKS AUS BESTRAHLUNGSVORGESCHICHTE
C-----

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
COMMON /INT1/ LSCP,IFKOKO,IOUT,NPMAX,NP,NAKT,IFGASF
COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
COMMON /REAL2/ RO,DO,AKON1,AKON2,WMO,WM
COMMON /REAL4/ ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
COMMON /TBESTR/ ZTBS(100),TTBS(100),TBB,ITBZM
DATA ZEHN /2.302585093/

```

C

IF (LSCP .NE. 1) GO TO 20

C-----

C***** (TH,U)O2-PARTIKELKERN

C-----

```

IF (TBB .EQ. -1.) GO TO 10
TBSM = TBB
GO TO 16

```

10 CONTINUE

C***** TBSM = MAX. BESTRAHLUNGSTEMP. BEI TRANSIENTEM VERLAUF

```

TBSM = 0.
DO 15 I=1,ITBZM
IF (TTBS(I) .GT. TBSM) TBSM = TTBS(I)

```

15 CONTINUE

C

16 CONTINUE

```

OPF = 1. - 4410./(TBSM+273.) + 0.5*DLOG10(VTU*FIMA)
OPF = DEXP(OPF*ZEHN)
GO TO 300

```

C

20 CONTINUE

C-----

C***** UO2-PARTIKELKERN

C-----

```

IF (TBB .EQ. -1.) GO TO 50
TBSM = TBB
GH = - 10.08 - 8500. / (TBSM + 273.)
GH = DEXP(GH*ZEHN)

```

```

OPF = GH * ZBS * ZBS
GO TO 300
50  ZB = 0.
OPF = 0.
IFEND = 0
999 CONTINUE
DZB = DZEITB
ZEIT1 = ZB
ZEIT2 = ZB + DZB
IF (ZEIT2 .LE. ZBS) GO TO 60
ZEIT2 = ZBS
DZB = ZEIT2 - ZEIT1
IFEND = 1
IF (DZB .LE. 0.) GO TO 100
60  ZEITM = (ZEIT1 + ZEIT2) * 0.5
TB = TEMP (ZEITM,ZTBS,TTBS,TBB,ITBZM)
GH = - 10.08 - 8500. / TB
GH = DEXP(GH*ZEHN)
OPF = OPF + 2. * GH * (ZBS-ZEITM) * DZB
IF (IFEND .EQ. 1) GO TO 100
ZB = ZB + DZB
GO TO 999
100 CONTINUE
C
C***** BESTIMMUNG DER MITTLEREN BESTRAHLUNGSTEMPERATUR TBSM AUS
C***** OPF = G(TBSM) / 2 * ZBS**2
C***** GESPEICHERT AUF TBB
-----
TBSM = OPF / ZBS / ZBS
TBSM = DLOG10(TBSM)
TBSM = - (TBSM + 10.08) / 8500.
TBSM = 1. / TBSM - 273.
300 CONTINUE
OPFM = 0.625
OPF = DMIN1(OPF,OPFM)
TBS = TBSM + 273.
WRITE (6,110) OPF,TBSM
110 FORMAT (///10X,37HZAHN DER SAUERSTOFFATOME PRO SPALTUNG,
          20H VOR GLUEHUNG: O/F =,F10.5/
          10X,43HDAS ENTSPRICHT EINER MITTLEREN BESTRAHLUNGS,
          14HTEMPERATUR VON,F10.2,7H GRD C)
RETURN
END
C
C
C

```

```

REAL FUNCTION SAUERG*8 (TG)
C-----
C***** BESTIMMUNG DES CO-DRUCKS BEI GLUEHUNG
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      COMMON /INT1/  LSCP,IFKOKO,IOUT,NP,NP,NP,NAKT,IFGASF
      COMMON /REAL1/ SIGMU,WMU,FIMA,FF,GA,VTU,TBS
      COMMON /REAL4/  ZBEND,ZBS,DZEITB,ZEND,ZS,DZEIT
      DATA ZEHN /2.302585093/

C
      IF (LSCP .NE. 1) GO TO 310
C***** (TH,U)O2-PARTIKELKERN
      OPF = 1. - 4410./TG + 0.5*DLOG10(VTU*FIMA)
      GO TO 320
310  CONTINUE
C***** UO2-PARTIKELKERN
      OPF = - 10.08 - 8500./TBS + 2. * DLOG10(ZBS)
           - 4040. * (1./TG - 1./(TBS+75.))
320  OPF = DEXP(OPF*ZEHN)
      OPFM = 0.625
      SAUERG = DMIN1(OPF,OPFM)
      RETURN
      END

```

C
C
C

```

REAL FUNCTION TAUGK*8 (TAU)
C-----
C***** BESTIMMUNG VON F(TAU) FUER ALLE TAU
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DATA PIQ /9.869604404/

C
      IF (TAU .GT. 0.) GO TO 10
      TAUGK = 0.
      GO TO 200
10   CONTINUE
      NMAX = 1000
      DSUMM = 1.D-20
      SUM = 0.
      DO 100 N=1,NMAX
      NQ = N * N
      EX = PIQ * NQ * TAU
      IF (EX .GT. 150.) GO TO 110
      DSUM = (1. - DEXP(-EX)) / (NQ * NQ * PIQ * PIQ)
      SUM = SUM + DSUM
      IF (DSUM .LT. DSUMM) GO TO 110
100  CONTINUE
      WRITE (6,101) N,TAU,DSUM,SUM
101  FORMAT (5X,32H***** GENAUIGKEIT NICHT ERREICHT/
           5X,21H***** N,TAU,DSUM,SUM:,I5,2X,3E12.5)
110  CONTINUE
      TAUGK = 1. - 6.*SUM/TAU
200  CONTINUE
      RETURN
      END

```

C
C
C

```

REAL FUNCTION TEMP*8 (ZEIT,ZZ,TT,T,ITM)
C-----
C***** BESTIMMUNG DER TEMPERATUR ZUM ZEITPUNKT ZEIT
C-----
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION ZZ(100),TT(100)
C
      IF (T .EQ. -1.) GO TO 10
      TEM = T
      GO TO 200
C
10    CONTINUE
      IF (ZEIT .LT. ZZ(ITM)) GO TO 20
      TEM = TT(ITM)
      GO TO 200
C
20    CONTINUE
      DO 110 M=1,ITM
      ZT1 = ZZ(M)
      ZT2 = ZZ(M+1)
      IF (ZEIT .GT. ZT2) GO TO 110
      T1  = TT(M)
      T2  = TT(M+1)
      TTP = (T2 - T1) / (ZT2 - ZT1)
      TEM = TTP * (ZEIT - ZT1) + T1
      GO TO 200
110   CONTINUE
C
200   CONTINUE
      TEMP = TEM + 273.
      RETURN
      END

```

Am Beispiel der Vorhersage des Partikelbruchanteils für den HTR-500 in der Störfallsequenz "2" (siehe Abschnitt 3.3 sowie die Abbildungen 3.23 und 3.24) wird im folgenden ein Listing des "INPUT" sowie des "OUTPUT" gegeben.

Der Output eines PANAMA-Rechenlaufs enthält in einem Kopfteil eine Zusammenstellung der wichtigsten Eingangsdaten und einen Ergebnisteil. Mit Hilfe des Outputschalters IOUT auf Karte 1 sind insgesamt 7 verschiedene Ergebnislisten anwählbar. Die Form der Ergebnisliste ist insbesondere geeignet für eine leichte Handhabung beim Plotten auf dem HP-Terminal. Die jeweils auszudruckenden Größen sind der Input-Beschreibung zu entnehmen, wobei die Ausdrücke der Überschrift folgende Bedeutung haben:

Weitere Informations- bzw. Fehlermeldungen werden unter bestimmten Umständen im Output angetroffen:

- ***** ACHTUNG:
 ***** ZUWENIG SPEICHERPLATZ FUER TEMPERATURFELD - DIMENSIONIERUNG ERHOEHEN
 → Hier werden beim Einlesen der Bestrahlungs- oder Störfalltemperatur - Zeit - Geschichte mehr als 100 Punktepaare vorgegeben. Daher muß die Dimensionierung der Felder erhöht werden.
- ***** SPALTGASFREISETZUNG BETRAEGT 100 PROZENT
 → Die Größe F_d hat den Wert 1. erreicht und wird nicht mehr neu berechnet.

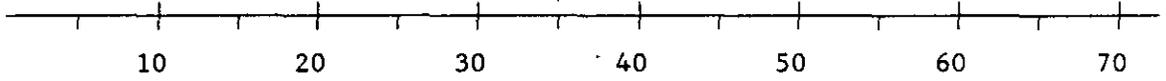
Tabelle C.1: Ausdrücke in der Überschriftenzeile der Ergebnislisten

ZEIT(H)	→	t [h]	ZEIT-LOG	→	log t
TEMP(C)	→	T [°C]			
PHI1	→	ϕ_1	P1LOG	→	log ϕ_1
PHI2	→	ϕ_2	P2LOG	→	log ϕ_2
PHIGES	→	ϕ_{gesamt}	PGLOG	→	log ϕ_{gesamt}
			DP1LOG	→	log ϕ_1
			DP2LOG	→	log ϕ_2
DPHI-G	→	ϕ_{gesamt}	DPGLOG	→	log ϕ_{gesamt}
GASFR	→	$\phi_{\text{gesamt}} * F_d$	GASFR-L	→	log ($\phi_{\text{gesamt}} * F_d$)
KORRO	→	FKOR (aus Gleichung (7))			
GASF-F	→	F_d			
CO-DRUCK	→	OPF			
DRUCK(MPA)	→	p [MPa]			
WEIB-P	→	m			
AKT-INT	→	ζ	AILOG	→	log ζ

- ***** PARTIKELBRUCHANTEIL WIRD KLEINER
 ***** ZEIT,TEMP,PHI1,DPBR1: ...
 → Dieser "negative" Beitrag zum Partikelbruch ϕ_1 wird ignoriert und die Rechnung fortgesetzt.
- ***** GENAUIGKEIT NICHT ERREICHT
 ***** N,TAU,DSUM,SUM: ...
 → Die durch eine "unendliche" Summe gebildete Funktion $f(\tau)$ vergrößert sich nach dem 1000. Summanden noch um $DSUM > 10^{-20}$. Diese Ungenauigkeit wird ignoriert und die Rechnung fortgesetzt.

Beispiel "INPUT"

(HTR-500, Störfallsequenz "2")



2	0	2				
450.E-06	415.E-06	380.E-06	340.E-06	250.E-06	0.	
834.E+06	8.02	0.08	0.31	1.4		
0.0001	4.00					
-1.	700.0	1.0		1		
0.	400.					
200.	800.					
500.	850.					
700.	850.					
0.						
-1.	200.	1.0		1		
0.	850.					
2.	1100.					
4.	1170.					
8.	1280.					
12.	1360.					
22.	2000.					
35.	2210.					
44.	2280.					
80.	2320.					
100.	2280.					
150.	2200.					
200.	2160.					
0.						

ZAHL DER SAUERSTOFFATOME PRO SPALTUNG VOR GLUEHUNG: O/F = 0.00316
 DAS ENTSPRICHT EINER MITTLEREN BESTRAHLUNGSTEMPERATUR VON 791.73

GRD C

RANDBEDINGUNGEN:

BESTRAHLUNGSZEIT: 700.00 D
 BESTRAHLUNGSTEMPERATUR: 791.73 GRD C
 FLUENZ: 1.40 10²⁵ M⁻² EDN
 VERHAELTNIS TH/U-235 10.00
 SCHWERMETALLABBRAND: 8.00 FIMA
 SIC-ZUGFESTIGKEIT 834.00 MPA VOR BESTRAHLUNG UND
 754.42 MPA NACH BESTRAHLUNG VOR GLUEHUNG
 WEIBULL-PARAMETER: 8.02 VOR BESTRAHLUNG UND

6.91 NACH BESTRAHLUNG VOR GLUEHUNG

ZEIT(H)	TEMP(C)	P1LOG	P2LOG	PHIGES	PGLOG
0.00	791.73	-12.35957	-50.00000	0.10000E-49	-50.00000
1.00	912.50	-12.35614	-49.99998	0.44041E-12	-12.35614
2.00	1037.50	-12.31065	-49.99998	0.48904E-12	-12.31065
3.00	1117.50	-12.13367	-45.11005	0.73506E-12	-12.13367
4.00	1152.50	-11.90974	-42.66226	0.12310E-11	-11.90974
5.00	1183.75	-11.66530	-40.71536	0.21612E-11	-11.66530
6.00	1211.25	-11.42193	-39.07047	0.37850E-11	-11.42193
7.00	1238.75	-11.17864	-37.55753	0.66276E-11	-11.17864
8.00	1266.25	-10.93480	-36.12465	0.11620E-10	-10.93480
9.00	1290.00	-10.70388	-34.84662	0.19775E-10	-10.70388
10.00	1310.00	-10.49213	-33.73688	0.32201E-10	-10.49213
11.00	1330.00	-10.29093	-32.71609	0.51176E-10	-10.29093
12.00	1350.00	-10.09604	-31.75092	0.80161E-10	-10.09604
13.00	1392.00	-9.83181	-30.37709	0.14730E-09	-9.83181
14.00	1456.00	-9.42029	-28.24249	0.37993E-09	-9.42029

15.00	1520.00	-8.92999	-25.91734	0.11749E-08	-8.92999
16.00	1584.00	-8.41566	-23.65971	0.38400E-08	-8.41566
17.00	1648.00	-7.90131	-21.52652	0.12551E-07	-7.90131
18.00	1712.00	-7.39612	-19.52098	0.40168E-07	-7.39612
19.00	1776.00	-6.90407	-17.63506	0.12472E-06	-6.90407
20.00	1840.00	-6.42699	-15.85900	0.37412E-06	-6.42699
21.00	1904.00	-5.96609	-14.18354	0.10812E-05	-5.96609
22.00	1968.00	-5.52111	-12.60026	0.30122E-05	-5.52111
23.00	2008.08	-5.17203	-11.38727	0.67294E-05	-5.17203
24.00	2024.23	-4.92447	-10.55179	0.11900E-04	-4.92447
25.00	2040.38	-4.72167	-9.88505	0.18982E-04	-4.72167
26.00	2056.54	-4.54392	-9.31365	0.28582E-04	-4.54391
27.00	2072.69	-4.38157	-8.80318	0.41538E-04	-4.38156
28.00	2088.85	-4.23072	-8.33486	0.58792E-04	-4.23068
29.00	2105.00	-4.08863	-7.89733	0.81553E-04	-4.08856
30.00	2121.15	-3.95228	-7.48325	0.11165E-03	-3.95215
31.00	2137.31	-3.82091	-7.08765	0.15112E-03	-3.82068
32.00	2153.46	-3.69458	-6.70701	0.20223E-03	-3.69416
33.00	2169.62	-3.57080	-6.33878	0.26912E-03	-3.57006
34.00	2185.77	-3.44859	-5.98107	0.35701E-03	-3.44732
35.00	2201.92	-3.33166	-5.63243	0.46828E-03	-3.32949
36.00	2213.89	-3.21823	-5.30548	0.60997E-03	-3.21469
37.00	2221.67	-3.11795	-5.00833	0.77196E-03	-3.11240
38.00	2229.44	-3.02298	-4.73427	0.96688E-03	-3.01463
39.00	2237.22	-2.93133	-4.47862	0.12045E-02	-2.91920
40.00	2245.00	-2.84888	-4.23797	0.14739E-02	-2.83153
41.00	2252.78	-2.76767	-4.00977	0.18050E-02	-2.74352
42.00	2260.56	-2.68620	-3.79205	0.22207E-02	-2.65350
43.00	2268.33	-2.61399	-3.58328	0.26927E-02	-2.56981
44.00	2276.11	-2.54043	-3.38223	0.32947E-02	-2.48218
45.00	2280.56	-2.47097	-3.19411	0.40183E-02	-2.39596
46.00	2281.67	-2.40229	-3.02255	0.49058E-02	-2.30929
47.00	2282.78	-2.34761	-2.86475	0.58507E-02	-2.23279
48.00	2283.89	-2.29184	-2.71855	0.70090E-02	-2.15434
49.00	2285.00	-2.23916	-2.58228	0.83669E-02	-2.07744

50.00	2286.11	-2.18912	-2.45459	0.99577E-02	-2.00184
51.00	2287.22	-2.14133	-2.33442	0.11819E-01	-1.92743
52.00	2288.33	-2.08856	-2.22087	0.14120E-01	-1.85017
53.00	2289.44	-2.05142	-2.11321	0.16520E-01	-1.78198
54.00	2290.56	-2.00878	-2.01083	0.19458E-01	-1.71090
55.00	2291.67	-1.96747	-1.91322	0.22858E-01	-1.64096
56.00	2292.78	-1.92733	-1.81993	0.26780E-01	-1.57218
57.00	2293.89	-1.88825	-1.73060	0.31289E-01	-1.50461
58.00	2295.00	-1.85011	-1.64490	0.36454E-01	-1.43826
59.00	2296.11	-1.81281	-1.56255	0.42348E-01	-1.37317
60.00	2297.22	-1.77630	-1.48332	0.49049E-01	-1.30937
61.00	2298.33	-1.72877	-1.40699	0.57117E-01	-1.24323
62.00	2299.44	-1.70538	-1.33338	0.65203E-01	-1.18573
63.00	2300.56	-1.67079	-1.26234	0.74833E-01	-1.12591
64.00	2301.67	-1.63674	-1.19373	0.85616E-01	-1.06744
65.00	2302.78	-1.60320	-1.12744	0.97645E-01	-1.01035
66.00	2303.89	-1.57012	-1.06336	0.11101E+00	-0.95465
67.00	2305.00	-1.53748	-1.00140	0.12579E+00	-0.90034
68.00	2306.11	-1.50524	-0.94150	0.14209E+00	-0.84745
69.00	2307.22	-1.47340	-0.88360	0.15996E+00	-0.79598
70.00	2308.33	-1.44192	-0.82763	0.17949E+00	-0.74596
71.00	2309.44	-1.41078	-0.77357	0.20073E+00	-0.69739
72.00	2310.56	-1.37997	-0.72138	0.22371E+00	-0.65031
73.00	2311.67	-1.34949	-0.67103	0.24847E+00	-0.60473
74.00	2312.78	-1.31930	-0.62252	0.27500E+00	-0.56067
75.00	2313.89	-1.28941	-0.57584	0.30328E+00	-0.51816
76.00	2315.00	-1.25980	-0.53098	0.33325E+00	-0.47723
77.00	2316.11	-1.23047	-0.48794	0.36483E+00	-0.43791
78.00	2317.22	-1.20141	-0.44674	0.39790E+00	-0.40023
79.00	2318.33	-1.17262	-0.40738	0.43230E+00	-0.36421
80.00	2319.44	-1.14409	-0.36988	0.46784E+00	-0.32990
81.00	2319.00	-1.11624	-0.33479	0.50373E+00	-0.29780
82.00	2317.00	-1.08944	-0.30251	0.53913E+00	-0.26830
83.00	2315.00	-1.06362	-0.27286	0.57380E+00	-0.24124
84.00	2313.00	-1.03869	-0.24567	0.60750E+00	-0.21646

85.00	2311.00	-1.01461	-0.22078	0.64001E+00	-0.19381
86.00	2309.00	-0.99132	-0.19803	0.67118E+00	-0.17316
87.00	2307.00	-0.96876	-0.17728	0.70085E+00	-0.15437
88.00	2305.00	-0.94690	-0.15840	0.72892E+00	-0.13732
89.00	2303.00	-0.92570	-0.14125	0.75530E+00	-0.12188
90.00	2301.00	-0.90512	-0.12570	0.77995E+00	-0.10793
91.00	2299.00	-0.88512	-0.11164	0.80285E+00	-0.09536
92.00	2297.00	-0.86569	-0.09896	0.82400E+00	-0.08407
93.00	2295.00	-0.84679	-0.08754	0.84343E+00	-0.07395
94.00	2293.00	-0.82840	-0.07728	0.86118E+00	-0.06490
95.00	2291.00	-0.81049	-0.06810	0.87733E+00	-0.05684
96.00	2289.00	-0.79305	-0.05989	0.89194E+00	-0.04967
97.00	2287.00	-0.77605	-0.05257	0.90509E+00	-0.04331
98.00	2285.00	-0.75949	-0.04606	0.91689E+00	-0.03768
99.00	2283.00	-0.74333	-0.04028	0.92742E+00	-0.03272
100.00	2281.00	-0.72757	-0.03516	0.93679E+00	-0.02836
101.00	2279.20	-0.71216	-0.03064	0.94510E+00	-0.02452
102.00	2277.60	-0.69706	-0.02664	0.95246E+00	-0.02115
103.00	2276.00	-0.68227	-0.02310	0.95896E+00	-0.01820
104.00	2274.40	-0.66777	-0.02000	0.96467E+00	-0.01562
105.00	2272.80	-0.65356	-0.01727	0.96966E+00	-0.01338
106.00	2271.20	-0.63963	-0.01489	0.97402E+00	-0.01143
107.00	2269.60	-0.62597	-0.01281	0.97781E+00	-0.00974
108.00	2268.00	-0.61258	-0.01100	0.98109E+00	-0.00829
109.00	2266.40	-0.59945	-0.00943	0.98393E+00	-0.00704
110.00	2264.80	-0.58657	-0.00806	0.98637E+00	-0.00596
111.00	2263.20	-0.57393	-0.00689	0.98847E+00	-0.00504
112.00	2261.60	-0.56154	-0.00587	0.99026E+00	-0.00425
113.00	2260.00	-0.54938	-0.00500	0.99179E+00	-0.00358
114.00	2258.40	-0.53745	-0.00425	0.99309E+00	-0.00301
115.00	2256.80	-0.52575	-0.00360	0.99420E+00	-0.00253
116.00	2255.20	-0.51426	-0.00305	0.99514E+00	-0.00212
117.00	2253.60	-0.50299	-0.00258	0.99593E+00	-0.00177
118.00	2252.00	-0.49193	-0.00219	0.99660E+00	-0.00148
119.00	2250.40	-0.48107	-0.00185	0.99716E+00	-0.00123

120.00	2248.80	-0.47042	-0.00156	0.99763E+00	-0.00103
121.00	2247.20	-0.45996	-0.00131	0.99803E+00	-0.00086
122.00	2245.60	-0.44969	-0.00110	0.99836E+00	-0.00071
123.00	2244.00	-0.43961	-0.00093	0.99864E+00	-0.00059
124.00	2242.40	-0.42972	-0.00078	0.99887E+00	-0.00049
125.00	2240.80	-0.42000	-0.00066	0.99906E+00	-0.00041
126.00	2239.20	-0.41046	-0.00055	0.99922E+00	-0.00034
127.00	2237.60	-0.40109	-0.00046	0.99936E+00	-0.00028
128.00	2236.00	-0.39190	-0.00039	0.99947E+00	-0.00023
129.00	2234.40	-0.38286	-0.00033	0.99956E+00	-0.00019
130.00	2232.80	-0.37399	-0.00027	0.99964E+00	-0.00016
131.00	2231.20	-0.36528	-0.00023	0.99970E+00	-0.00013
132.00	2229.60	-0.35673	-0.00019	0.99975E+00	-0.00011
133.00	2228.00	-0.34832	-0.00016	0.99980E+00	-0.00009
134.00	2226.40	-0.34007	-0.00014	0.99983E+00	-0.00007
135.00	2224.80	-0.33196	-0.00011	0.99986E+00	-0.00006
136.00	2223.20	-0.32400	-0.00010	0.99988E+00	-0.00005
137.00	2221.60	-0.31618	-0.00008	0.99990E+00	-0.00004
138.00	2220.00	-0.30849	-0.00007	0.99992E+00	-0.00003
139.00	2218.40	-0.30095	-0.00006	0.99994E+00	-0.00003
140.00	2216.80	-0.29353	-0.00005	0.99995E+00	-0.00002
141.00	2215.20	-0.28624	-0.00004	0.99996E+00	-0.00002
142.00	2213.60	-0.27908	-0.00003	0.99996E+00	-0.00002
143.00	2212.00	-0.27205	-0.00003	0.99997E+00	-0.00001
144.00	2210.40	-0.26513	-0.00002	0.99998E+00	-0.00001
145.00	2208.80	-0.25834	-0.00002	0.99998E+00	-0.00001
146.00	2207.20	-0.25167	-0.00002	0.99998E+00	-0.00001
147.00	2205.60	-0.24511	-0.00001	0.99999E+00	-0.00001
148.00	2204.00	-0.23866	-0.00001	0.99999E+00	-0.00001
149.00	2202.40	-0.23232	-0.00001	0.99999E+00	-0.00000