

Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC<sup>2</sup> (ATHLET/CD/COCOSYS)



Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC<sup>2</sup> (ATHLET / CD / COCOSYS)

Claus Spengler Siegfried Arndt Sara Beck Dandy Eschricht Dimitar Iliev Holger Nowack

März 2021

#### Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen RS1561 durchgeführt.

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

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

**Deskriptoren** AC<sup>2</sup>, COCOSYS, Containment, Iod- und Aerosolverhalten, Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI), Sicherheitsbehälter, Thermohydraulik

## Kurzfassung

In diesem Vorhaben sind die Entwicklungsarbeiten am GRS-Rechencode COCOSYS fortgesetzt worden. Dabei wurden in allen drei COCOSYS-Modulen (Iod- und Spaltprodukte, Thermohydraulik, Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten) wesentliche Modellverbesserungen erzielt. Zudem wurde die Kopplung mit ATHLET/ATHLET-CD vertieft, um die Wechsel- und Rückwirkungen zwischen Kühlkreislauf und Containment bei Stör- und Unfallabläufen noch detaillierter berücksichtigen zu können. Seit kurzem werden die Einzelcodes COCOSYS und ATHLET bzw. ATHLET-CD im GRS-Programmpaket AC<sup>2</sup> zusammengefasst.

Die Schwerpunkte der Arbeiten lagen auf den folgenden Themenkomplexen:

- Kopplung mit ATHLET/ATHLET-CD: Bei der Konsolidierung der Kopplung wurde insbesondere eine geeignete Kopplungsmethode spezifiziert und nachfolgend umgesetzt. Weiterhin wurden technische Voraussetzungen geschaffen, um neue Programmversionen im Rahmen des Programmpaketes AC<sup>2</sup> an andere Nutzer weitergeben zu können.
- Aerosol- und Spaltprodukte: Mit Abschluss des Vorhabens wurden die meisten Modelle in die neue Struktur des NewAFP-Moduls überführt. Damit kann auch der Einsatz des AFP-Modells weiter minimiert werden. Der im Vorhaben erreichte Entwicklungsstand erlaubt nun eine Weitergabe von NewAFP als 
  ß-Version an interessierte Organisationen.
- Thermohydraulik: Aufgrund der Entwicklungsarbeiten können nun Effekte bei Gegenstrombedingungen für Gase in engen Strömungsverbindungen berücksichtigt werden. Weiterhin wurden Modellkorrekturen für das Fluten von Raumbereichen im Containment vorgenommen. Durch Anpassungen des numerischen Lösungsverfahrens für die Simulation von Wasserfilmen auf heißen Strukturen werden bereits für viele Randbedingungen zufriedenstellende Ergebnisse erzielt.
- Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten: Das CCI-Modul zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung wurde unter Berücksichtigung neuer experimenteller Daten sowie Rückflüsse aus Anwendungsrechnungen aktualisiert. Darüber hinaus steht nun ein generisches Core-Catcher-Modell zur Verfügung, um diesbezügliche Phänomene bei Anlagen der Generation III+ zu analysieren. Mit der im Vorhaben berechneten Ergebnismatrix zu Dryout-

Wärmestromdichten wurden Voraussetzungen geschaffen, um mit COCOSYS die Kühlbarkeit einer Schüttbettkonfiguration bewerten zu können. Weiterhin ist ein Diagnoseverfahren für die Fließfähigkeit einer kompakten Schmelze entwickelt worden.

Neben diesen fachlichen Schwerpunkten hat die GRS ihre internationalen Aktivitäten (Teilnahme an Konferenzen, Mitwirkung in Fachgremien) mit fachlich engem Bezug zum Vorhaben fortgesetzt und den Umstieg auf ein modernes Versionskontrollsystem (GitLab) vorgenommen. Zudem wurden kontinuierlich Qualitätssicherungsarbeiten wie z. B. die Auswertung von Informationsrückflüssen der Anwender der Rechencodes durchgeführt.

## Abstract

Within the framework of this research project, GRS continued its development of models for the simulation code COCOSYS. Thereby, essential model improvements were achieved in all three COCOSYS modules (iodine and fission products, thermal hydraulics, ex-vessel core melt behaviour). Furthermore, the coupling of COCOSYS with the codes ATHLET/ATHLET-CD was enhanced to allow a more detailed consideration of interactions and feedback between cooling circuit and containment. The single codes ATHLET, ATHLET-CD and COCOSYS are now integrated under the umbrella of the GRS code package AC<sup>2</sup>. The focus of the work was on the following topics:

- Coupling with ATHLET/ATHLET-CD: For the consolidation of the coupling, a new, sustainable technical coupling method was specified and implemented. Moreover, the technical basis for the future code transfer of COCOSYS as part of the code package AC<sup>2</sup> to users was established.
- Aerosols and fission products: With completion of this project, most of the available models were transferred into the new structure of NewAFP. This condition helps to reduce the future usage of the AFP module. The state of progress of NewAFP achieved allows the transfer of a ß-version to organisations that are interested.
- Thermal hydraulics: The effects of counter-current gas flow conditions in narrow flow junctions can now be considered. Furthermore, several corrections of the model for the simulation of compartment flooding with water were realised. The adjustment of the numerical solution procedure for the simulation of water films on hot containment structures provides satisfying results for a broad range of conditions.
- Ex-vessel core melt behaviour: Distinct feedback from new experimental data and user experiences related to MCCI were evaluated to update the CCI module of COCOSYS. Furthermore, a versatile core catcher model was developed for COCOSYS with the main objective to include core melt retention and cooling in a generic core catcher in thermal-hydraulic containment simulations with a view to application to generation III+ plants. A comprehensive data basis of simulation results for the dryout heat flux in ex-vessel debris bed scenarios was generated with the goal to provide a basis to allow assessing debris bed coolability with COCOSYS. Moreover, a diagnosis method for the

efficiency of corium spreading in the containment was implemented into COCOSYS, based on approved analytical self-similar solutions.

Beside these topical focuses, GRS has continued its international activities (contributions to conferences, participation in technical committees) with close relation to the project goals. All steps necessary to comply with the standards of quality assurance for code development projects at GRS were taken, including the switch to the state-of-the-art code version control system GitLab and the continuous evaluation of feedback from code users.

## Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	111
1	Einleitung	.1
2	Konsolidierung der Integration von COCOSYS in AC <sup>2</sup>	.7
2.1	Konsolidierung der Kopplung(en) innerhalb von AC <sup>2</sup>	. 8
2.1.1	Arbeiten an den Release-Versionen COCOSYS V2.4v5 und AC <sup>2</sup> 2019	. 8
2.1.2	Vereinheitlichung des Übersetzungssystems	. 9
2.1.3	Kopplung und Datenkommunikation zwischen COCOSYS und	
	ATHLET	10
2.2	Erweiterung des Kopplungsumfangs	16
2.2.1	Wärmeaustausch zwischen Reaktorkühlkreislauf und Containment	16
2.2.2	Ablagerung von Spaltprodukten auf Komponenten des Kühlkreislaufs	34
2.2.3	Rückeinspeisung von Spaltprodukten in den Kühlkreislauf	37
2.2.4	Vereinheitlichen von Benutzerschnittstellen	38
2.2.5	Recording von Randbedingungen	40
2.2.6	Sonstige Codekopplungen (CoPool)	40
2.3	Homogenisierung von Stoffdaten	41
3	Modellentwicklung zu Aerosolen und Spaltprodukten	43
3.1	Weiterentwicklung von NewAFP und aktueller Stand	43
3.2	Verbesserung von Einzelmodellen	49
3.2.1	Radiolytische Iodchemie	49
3.2.2	Sprühmodell für gasförmige Spezies	50
3.2.3	Verhalten von Aerosolen und chemischen Komponenten im Sumpf	51
3.2.4	Simulation von Aerosolabwaschvorgängen an Strukturen	52
3.2.5	Pool-Scrubbing und nasse Resuspension	53
3.2.6	Filtermodell – Aufheizung und Temperaturen im Filter	58

4	Modellentwicklung zu thermohydraulischen Modellen	67
4.1	Einsatz des Wasserfilm-Modells bei der Containment-Außenkühlung	67
4.1.1	Hintergrund	67
4.1.2	Anwendung des bei KIT entwickelten Rivulet-Modells für die	
	Containment-Außenkühlung	68
4.1.3	Verbesserungen im CO1-Modell bei Simulation eines Wasserfilms	75
4.2	Gegenströmung von Gasen in engen Verbindungen	79
4.3	Rückwirkungen von Strukturausdehnungen auf die Thermohydraulik	86
4.3.1	Hintergrund	86
4.3.2	Durchgeführte Arbeiten	86
4.4	Zonenfluten	91
4.4.1	Charakteristische Längen	91
4.4.2	Wärmeaustausch-Modelle	91
4.4.3	Allgemeine Fehlerkorrekturen und Erweiterungen	92
5	Modellentwicklung für das Ex-Vessel-Verhalten von	05
	Altualiziarung zur Schmelze Deten Weshaelwirkung (MCCI)	95
5.1	Aktualisierung zur Schmeize-Beton-wechselwirkung (MCCI)	95
5.1.1	Ruckflusse aus validierung und internationalem vvissensstand	96
5.1.2	Durchgerunrte verbesserungen am Modellstand	98
5.2	Modellentwicklung zur Berucksichtigung der Phanomene nach	00
501	Einschätzung des Einflusses mehrdimensionaler Effekte	99
5.2.1	Enschatzung des Einnusses merindimensionaler Einekte	00
5.2.2	Ersteilung einer Datenmatrix für die Dryout-Leistungsdichte in 2D	02
5.2.3	Sensitivitat der Parameter auf die Dryout-Leistungsdichte	00
5.3	Implementierung eines Core-Catcher-Modells	08
5.3.1	Vereinfachende Annahmen 1	10
5.3.2		11
5.3.3	Beispielanwendung auf einen Core-Catcher im WWER-1200	16
5.3.4	Schlussfolgerungen 1	22
5.4	Verbesserungen des Modellstands zur Schmelzeausbreitung 1	23
5.4.1	Schnelle Diagnosemöglichkeit zur Effizienz der Ausbreitung 1	23
5.4.2	Weitere Arbeiten an LAVA 1	31

6	Querschnittsaktivitäten	135
6.1	Internationales	135
6.2	Benutzerunterstützung / Rückflüsse aus der Anwendung	139
6.3	Codepflege	140
6.3.1	Änderung des Versionskontrollsystems	140
6.3.2	Herausgabe neuer COCOSYS-Versionen	141
6.3.3	Verbesserung von Codestrukturen	141
6.4	Qualitätssicherung und Dokumentation	142
6.4.1	QS-Plan für COCOSYS	142
6.4.2	Kontinuierliche Qualitätssicherung der Codeentwicklung	142
6.4.3	Automatisierung des Regressionstestens	143
7	Zusammenfassung	145
	Literaturverzeichnis	155
	Abbildungsverzeichnis	165
	Tabellenverzeichnis	169

## 1 Einleitung

Die GRS entwickelt eigene Analysemethoden für die Beantwortung aktueller Fragestellungen der Reaktorsicherheitsforschung zum Verhalten von Kernkraftwerken (KKW) bei Betrieb, anomalem Betrieb sowie Stör- und Unfällen. Dabei verfolgt die GRS die Zielsetzung, mit den bereitgestellten Methoden ihre Aussagefähigkeit zu einem breiten Spektrum von Fragestellungen für KKW-Technologien der Generationen II, III, III+ bis hin zu zukünftigen Anlagen der Generation IV und kleinen modularen Reaktoren (SMR) im Inund Ausland sicherzustellen und zu erweitern.

Das Vorhaben führt das vom BMWi geförderte Vorhaben RS1532 zur Entwicklung des GRS-Codes COCOSYS /SPE 17/ mit Verbesserungen von Einzelmodellen und Integration von COCOSYS in das Programmsystem AC<sup>2</sup> /WEY 19/, /GRS 20/, /WAN 20a/ fort. Mit AC<sup>2</sup> werden Analysen zu Stör- oder Unfallabläufen in KKW auf Basis der nachfolgend genannten, ursprünglich als eigenständige Codes (mit weitgehend mechanistischen Modellen) entwickelten Programme gekoppelt ausgeführt:

- ATHLET (Analysis of Thermal-Hydraulics of Leaks and Transients) f
  ür die Simulation der Thermohydraulik in K
  ühlsystemen (basierend auf Rohrleitungen und Wasserbeh
  ältern).
- ATHLET-CD (Core Degradation) für die Phänomene bzw. für den Verlauf der Kernzerstörung im Reaktorkern bis hin zum Versagen des Reaktordruckbehälters (RDB) und dem nachfolgenden Schmelzeaustrag ins Containment.
- COCOSYS (Containment Code System) als detailliertes Analysewerkzeug f
  ür die Vorg
  änge und Zust
  ände in der Atmosph
  äre des Containments und zur Simulation von m
  öglichen Spaltprodukt
  freisetzungen und -freisetzungspfaden an die Umgebung.

Eine wichtige Aufgabe von COCOSYS in AC<sup>2</sup> ist es, die komplexe Wechselwirkung von Vorgängen und Phänomenen innerhalb des Containments möglichst realistisch zu beschreiben. Ein Beispiel ist die Rückwirkung thermohydraulischer Zustände auf das Aerosolverhalten oder auf die Iodchemie.

Die in diesem Vorhaben zu AC<sup>2</sup> durchgeführten Arbeiten umfassen einerseits die Weiterentwicklung und Aktualisierung einzelner Modelle in COCOSYS basierend auf dem aktuellen Wissensstand zu Vorgängen und Phänomenen im Containment sowie andererseits die Ausgestaltung der Kopplung zwischen den Modulen COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD in AC<sup>2</sup>. In der Umsetzung der Kopplung mussten Anforderungen der drei einzelnen Module, der internen Anbindung zwischen ATHLET und ATHLET-CD und des Datenaustausches der COCOSYS-Module untereinander sowie die Zielsetzungen der zukünftigen Anwendung von AC<sup>2</sup> berücksichtigt werden.

Dieses Vorhaben ist das erste Projekt der GRS, welches sich explizit mit der Zusammenführung von ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS zu dem Codesystem AC<sup>2</sup> befasst. Mit den Arbeiten in diesem Vorhaben rückt jetzt die Wechselwirkung zwischen Phänomenen im Containment und Phänomenen im RDB/Primärkreis stärker in den Fokus der Arbeiten.

Übergeordnete Zielsetzung ist, mit dem Codesystem AC<sup>2</sup> ein vereinheitlichtes, ausgewogenes und zuverlässiges Simulationswerkzeug für die komplexe Kopplung von Vorgängen im Containment und von Vorgängen im Reaktordruckbehälter/Primärkreis bereitzustellen, mit welchem die relevanten Vorgänge und Phänomene bei Stör- und Unfällen in KKW heutiger und zukünftiger Generationen möglichst realistisch beschrieben werden. Beispiele für solche Vorgänge sind die Freisetzung von Aerosolen und Spaltprodukten ins Containment bei Lecks im Primärkreis, der Schmelze- und Spaltproduktaustrag beim RDB-Versagen sowie das Zusammenspiel einzelner Stränge eines passiven Systems bzw. verschiedener passiver Systeme zur Beherrschung von Störund Unfällen in fortschrittlichen sowie innovativen Reaktoren. Dazu wurden sowohl Modellerweiterungen als auch Arbeiten an den Schnittstellen der Codes durchgeführt.

Die übergeordnete Zielsetzung wurde in folgende Einzelziele aufgegliedert und in fünf zugehörigen technisch/wissenschaftlichen Arbeitspaketen (AP1 – AP5) sowie einem Punkt zum Projektmanagement (AP6) bearbeitet:

- (AP1) Konsolidierung der Integration von COCOSYS in AC<sup>2</sup>
- (AP2) Verbesserungen zur Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens
- (AP3) Verbesserungen zur Simulation thermohydraulischer Modelle
- (AP4) Verbesserungen von Modellen für das Ex-Vessel-Verhalten von Kernschmelze
- (AP5) Querschnittsaktivitäten
- (AP6) Projektmanagement und Projektcontrolling

Entsprechend der Einzelziele wurde in diesem Vorhaben die gekoppelte Anwendung von ATHLET und COCOSYS als eine Standardanwendung von AC<sup>2</sup> für Nutzer etabliert, und es wurden Verbesserungen und Ergänzungen von einzelnen Modellen in COCOSYS für Containmentphänomene durchgeführt. Nachfolgend werden die durchgeführten Arbeiten und Einzelzielsetzungen erläutert:

#### AP1 Konsolidierung der Integration von COCOSYS in AC<sup>2</sup>

Gekoppelte Anwendungen von ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS waren bereits in der Vergangenheit Gegenstand von Arbeiten der GRS. Diese stellten aber bisher eher den Sonderfall des Einsatzbereiches beider Codes dar, nicht den Standard. In diesem Projekt wurde die Standardisierung des gekoppelten Einsatzes für ein breites Spektrum an Anwendungsfällen erzielt. Dies wurde durch eine stärkere Verzahnung und Abstimmung der Entwicklungsaktivitäten in allen drei Modulen von AC<sup>2</sup> (ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS) und (durch gezielte Änderungen) eine entsprechende Homogenisierung in der Softwarestruktur erreicht. Die Softwarestruktur der Programmteile wurde dabei im Hinblick auf die geänderte Ausrichtung der Entwicklungsstrategie angepasst. Dabei rückten insbesondere die Schnittstellen und die Aspekte der Kopplung in den Mittelpunkt. Die separate Anwendbarkeit der drei Codes wurde – aufgrund der zahlreichen bei den internen und externen Nutzern vorhandenen, langjährig qualifizierten und intensiv genutzten Datensätzen – aber weiterhin erhalten.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 2 beschrieben.

#### AP2 Verhalten von Aerosolen und Spaltprodukten

Simulationen zur Ermittlung des Quellterms werden von einer Vielzahl von komplexen Vorgängen beeinflusst. In vorangegangenen Vorhaben (RS1508 und RS1532) wurde eine Umstrukturierung des Modells AFP (**A**erosols and **F**ission **P**roducts) in COCOSYS für die Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens eingeführt. Hierbei zeigte sich, dass die zunächst als Umstrukturierung angedachte Weiterentwicklung den gestellten Anforderungen nicht gerecht werden konnte, sodass eine vollständige Neuprogrammierung des Moduls erforderlich wurde. Aufgrund dieses Sachverhaltes wurde das neue Modul NewAFP genannt. In diesem Vorhaben wurde die Überführung der Modelle aus AFP auf eine zentrale, konsistente Bilanzierung von Aerosolen und Spaltprodukten in NewAFP weitergeführt. Außerdem war die Beschreibung von Geometrien zwischen den Aerosol-, Iod-, und Spaltproduktmodellen von AFP und dem THY-Modul nicht konsistent

und die Größen für die berücksichtigten Flächen mussten im Datensatz redundant angegeben werden, was mit NewAFP gelöst worden ist. Mit den durchgeführten Arbeiten werden nun Spaltprodukte aus anderen Modellen in AC<sup>2</sup>, z. B. aus der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (d. h. aus dem Modul CCI) oder aus ATHLET-CD, in der gekoppelten Simulation mit den genannten Modulen korrekt nach NewAFP übertragen. Die GRS-Rechenkette AC<sup>2</sup> wird aktuell im Hinblick auf die Errechnung des Nuklidinventars von Reaktorkernen auf die Nutzung des von GRS und PSI gemeinsam entwickelten Rechencodes VENTINA umgestellt. Dies hat Auswirkungen auf die Modelle in NewAFP bzgl. des Isotopenverhaltens. Es ist geplant, die dazu nötigen Arbeiten in einem nachfolgenden Vorhaben durchzuführen.

NewAFP wird mit dem für 2021 in Vorbereitung befindlichen Release von AC<sup>2</sup> als Teil von COCOSYS an Anwender herausgegeben, und es sind bereits erste Analysen mit NewAFP von internen und externen Anwendern (z. B. Framatome) durchgeführt worden.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 3 beschrieben.

#### AP3 Thermohydraulische Modelle

Hier wurde der Modellstand für einzelne thermohydraulische Phänomene verbessert. Dies betrifft die Berücksichtigung von Gegenstrombedingungen für Gase in engen Strömungsverbindungen und die Simulation von Konvektionsströmungen in mit Wasser gefluteten Raumbereichen. Für die zukünftige Berücksichtigung der Rückwirkung von Strukturausdehnungen auf die Thermohydraulik in COCOSYS (z. B. als Folge der Verformung von Blechen unter Druckbelastungen) wurden Grundlagen gelegt.

In vielen fortschrittlichen Reaktorkonzepten ist im Design eine passive Wärmeabfuhr über die Außenwand des Containments vorgesehen. Beispiele sind der AP1000 von Westinghouse oder die auf dieser Technik basierende chinesische Designerweiterung des DWR mit größerer Leistung. Im Vorhaben wurden Untersuchungen zur Beschreibung der Kühlung einer heißen Wand mit den Möglichkeiten in COCOSYS zur Simulation von Wasserfilmen durchgeführt.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 4 beschrieben.

#### AP4 Modelle für das Ex-Vessel-Verhalten von Kernschmelze

Mit dem CCI-Modul von COCOSYS (zur Simulation des Schmelze-Verhaltens im Containment) existiert ein Modell zur Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in einer Reaktorgrube und es steht der Code LAVA bereit, um die Ausbreitung der Schmelze unter Einfluss von Gravitations- und Reibungskräften zu simulieren. Die Modelle haben einen guten Validierungsstand, sind aber für idealisierte Geometrien konzipiert bzw. an Versuchen mit idealisierten Randbedingungen/Geometrien überprüft. In diesem Vorhaben wurden einzelne Verbesserungen der Anwendbarkeit aller Modelle für das Schmelze-Verhalten (Schmelze-Beton-Wechselwirkung, Schmelzeausbreitung) auf reale Anlagen durchgeführt.

Core-Catcher-Konzepte zur Rückhaltung der Kernschmelze im Containment sind ein Design-Merkmal von einigen fortschrittlichen Reaktoranlagen. In COCOSYS wurde ein verallgemeinertes Modell zur Berücksichtigung der Rückhaltung von Schmelze in einem Core-Catcher integriert.

COCOSYS wird um Modelle erweitert, um zukünftig Unfallabläufe zu untersuchen, bei denen Kernschmelze aus dem RDB in größere Wasserpools im Containment eingetragen wird und dort als Folge einer Fragmentierung eine Partikelschüttung bildet. Dazu wurden mit dem Spezialcode COCOMO von IKE Stuttgart Rechnungen zur Kühlbarkeit von möglichen Ex-Vessel-Schüttbettkonfigurationen durchgeführt und zur Erstellung eines Diagnosemodells zur Schüttbettkühlbarkeit in COCOSYS ausgewertet.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 5 beschrieben.

#### AP5 Querschnittsaktivitäten

Zum einen wurde in diesem Arbeitspaket die Einbindung von GRS-Arbeiten in internationale Aktivitäten fortgesetzt. Zum anderen wurden mit entsprechendem Aufwand bei der Qualitätssicherung die Qualitätsstandards der GRS gewahrt und dazu Nutzerrückflüsse gezielt und zeitnah ausgewertet.

Die durchgeführten Arbeiten sind in Kapitel 6 beschrieben.

## 2 Konsolidierung der Integration von COCOSYS in AC<sup>2</sup>

Die Rechenprogramme COCOSYS, ATHLET und ATHLET-CD werden bereits langjährig von der GRS entwickelt. Der gekoppelte Einsatz der Codes ist bisher nicht die Standardanwendung und wurde im Rahmen dieses Arbeitspakets unter dem Dach des neuen Programmpaketes AC<sup>2</sup> für verschiedene Anwendungsbereiche etabliert.

AC <sup>2</sup> 2019.1				_		>
tilities Documentation	Help					
eneral						
Working Directory	C:/GRS-programs/AC2	2-2019.1/samples/AC2/s8	•	Browse	Explorer	
ATHLET / ATHLET-CD						
Select Executable	Own	• Default 64-Bit	O Default 64-Bit	OMP		
Executable	C:/GRS-programs/AC2	2-2019.1/bin/athlet.Release.ifc	ort/athlet_32.Release.ifort.exe		Browse	
Input Data	s8orest-athcd.r0.inp				Browse	
Output ID	_ath.r0	Auto		Auto		
Restart File					Browse	
Additional Parameters						
Numerical Toolkit						
Select Executable		Default 64-Bit	v64/coconus ovo		Browse	
Executable	C:/GRS-programs/AC2	2-2019.1/bin/cocosys.Release.	.xo4/cocosys.exe		Brawse	
Output ID	_coc.r0	Auto		Auto	browse	
Restart File					Browse	
Additional Parameters						
Start						
Log _coc.r0 _ath.r0						
Controls						
	Stop		Abort and clos	se tab		
HON: TV( 18) T= 3.30000000000 HON:XQVMCI( 1018) T = 3.3000000000	DT: NO LIMIT. +02 H0= 9.69369D-0 DT: NO LIMIT. 0E+02(S) H = 5.000 FEBE :	1 DT= 9.69369D-01 IZS 0000000E+00(S) # = NFKT = 66	3= 242 LM= 38 LF 69 #P = 143 DGL: Cavity (	K= 4 CPU=	e	*

# Abb. 2.1 Durchführung einer gekoppelten Rechnung von ATHLET-CD und COCOSYS mithilfe der graphischen Benutzeroberfläche von AC<sup>2</sup>

Abb. 2.1 zeigt anhand eines Beispiels, wie mit der graphischen Benutzeroberfläche von AC<sup>2</sup> durch Auswahl der beteiligten Codes (in Checkboxen: ATHLET / ATHELT-CD und

COCOSYS) bei zuvor korrekt präparierten Eingabedateien entsprechend der beiden Eingabezeilen *Input Data* die gekoppelte Rechnung als eine der möglichen Standardvarianten des Einsatzes von AC<sup>2</sup> angesteuert wird. Dies stellt u. a. eine der erreichten Verbesserungen in der Nutzerschnittstelle dar, mit denen die Durchführung von gekoppelten Rechnungen für einen vergrößerten Nutzerkreis ermöglicht werden. Dafür war eine Reihe von vorwiegend programmtechnischen Arbeiten nötig, die nachfolgend beschrieben werden, um AC<sup>2</sup> als ein ausgewogenes und benutzerfreundliches Werkzeug zu gestalten.

### 2.1 Konsolidierung der Kopplung(en) innerhalb von AC<sup>2</sup>

Die Ausgestaltung der Kopplung der Rechenprogramme ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS in AC<sup>2</sup> unterliegt vielfältigen technisch-wissenschaftlichen und IT-seitigen Aspekten. In diesem Arbeitspunkt wurden verschiedene Einzelarbeiten durchgeführt, um ein geeignetes Kopplungsverfahren unter Beachtung der jeweiligen Aspekte bereitzustellen.

### 2.1.1 Arbeiten an den Release-Versionen COCOSYS V2.4v5 und AC<sup>2</sup> 2019

In die COCOSYS-Version V2.4v5 sind zunächst einmal verschiedene Fehlerkorrekturen der bisherigen Version V2.4v4 eingeflossen. Diese Version ist außerdem mit ATHLET-CD 3.1A, Patch 4, gekoppelt worden. Hierzu wurde die Weiterentwicklung von ATHLET-CD 3.1A in Richtung Patch 4 eng begleitet. Probleme konnten dadurch frühzeitig erkannt und behoben werden.

Ferner ist in der Version V2.4v5 die Software-Technik für den internen Datenaustausch zwischen den COCOSYS-Modulen auf die Nutzung der modernen MPI-Bibliothek zur Interprozesskommunikation umgestellt (analog wie für COCOSYS 3.0.x), d. h. die MPI-Bibliothek wird jetzt auch von COCOSYS V2.4v5 verwendet.

Für COCOSYS V2.4v5 wurde zudem ein Installationsprogramm erstellt, das die Installation der Software beim Anwender wesentlich vereinfacht. Das Installationsprogramm richtet auch alle notwendigen Zusatzbibliotheken (Intel-Fortran- und Microsoft-C/C++-Laufzeitbibliotheken, Microsoft MPI) auf dem Rechner des Anwenders ein. Somit sind die früher vom Anwender manuell auszuführenden Einzelschritte der Installation automatisiert und mögliche Fehler minimiert worden. Das Installationsprogramm ist auf Windows-7- und Windows-10-Systemen erfolgreich getestet worden. Nachdem die COCOSYS-Version V2.4v5 erfolgreich in dem parallelen Vorhaben RS1544 im Regressionstesten überprüft wurde, ist diese im August 2018 für Anwender freigegeben worden.

Die stetige Weiterentwicklung der Kopplung zwischen ATHLET und COCOSYS erlaubt es nicht ohne Weiteres, ältere ATHLET-Versionen mit einer aktuellen COCOSYS-Version zu verwenden. Analog gilt dies für die Kopplung von ATHLET und ATHLET-CD. Eine Unterstützung jeweils älterer Versionen wäre zwar möglich, würde jedoch die Weiterentwicklung eher behindern, da immer auf eine Kompatibilität der Kopplung zu älteren Versionen geachtet werden müsste. Darum wird eine solche Verwendung nicht unterstützt. Stattdessen werden die Codes ATHLET und ATHLET-CD für den Primärkreis und COCOSYS für das Containment seit 2019 unter dem Namen AC<sup>2</sup> als ein Paket herausgegeben. In enger Abstimmung mit den Entwicklern von ATHLET und ATHLET-CD ist ein gemeinsames Installationspaket entwickelt worden. Die erste Version von AC<sup>2</sup> 2019 ist Mitte 2019 nach erfolgreichem Regressionstest freigegeben worden. Das Paket enthält mit COCOSYS 3.0.0 eine COCOSYS-Version mit vielen Änderungen und neuen Funktionen gegenüber V2.4v5. Dementsprechend wurde die Dokumentation in den Benutzerhandbüchern erweitert bzw. angepasst. Die Freigabe des ersten Updates dieser Version, AC<sup>2</sup> 2019.1, mit Fehlerkorrekturen in allen Komponenten, erfolgte im Juni 2020.

#### 2.1.2 Vereinheitlichung des Übersetzungssystems

Der Vorgang zur Erstellung eines ausführbaren Codes basierend auf dem Quellcode wird im Folgenden mit "übersetzen" bezeichnet. Die Übersetzung des Gesamtpakets AC<sup>2</sup> wurde einheitlich auf die Verwendung des Softwarewerkzeugs CMake umgestellt. CMake erlaubt eine compiler- und betriebssystemunabhängige Definition der für eine Softwarekomponente benötigten Quellcodedateien. Auch Abhängigkeiten zu in Bibliotheken gesammelten Funktionen lassen sich flexibel definieren und einbinden. CMake generiert aus den vorliegenden Definitionen Eingabedateien für die den eigentlichen Übersetzungsprozess durchführende Software. Unter Windows ist dies Microsoft Visual Studio und unter Linux GNU-Make, wobei jeweils der Intel-Fortran-Compiler oder der GNU-Fortran-Compiler verwendet werden kann. Der Einsatz von CMake hat den Vorteil, dass für Windows und Linux nur noch ein Satz von CMake-Definitionsdateien gepflegt werden muss. CMake generiert daraus Projektdateien für Visual Studio, sodass die Entwickler wie gehabt unter Windows in Visual Studio entwickeln und debuggen können.

Vereinfacht wird der CMake-Prozess durch die Verwendung der freien Software CMakelt (https://gitlab.com/nordfox/cmakeit). Diese erledigt betriebssystem- und compilerabhängige Grundaufgaben und erlaubt zum Beispiel auch eine compilerunabhängige Definition von Compilerparametern. Für AC<sup>2</sup>, das aus verschiedenen Komponenten besteht, bietet CMakelt die Funktion, Software aus anderen Softwarearchiven in der gewünschten Version einzubinden. Für die Entwicklung von Erweiterungen, zum Beispiel mit ATHLET, bietet das den Vorteil, dass unkompliziert ein Entwicklungszweig von ATHLET eingebunden werden kann, um gemeinsam an der Kopplung der Programme zu arbeiten. Anders als händisch gepflegte, statische Visual-Studio-Projektdateien für die einzelnen Projekte kann CMake bei der Erstellung der Projektdateien flexibel auf die vorhandene Entwicklungsumgebung reagieren, indem es Umgebungsvariablen abfragt und Wenn-Dann-Bedingungen ermöglicht.

Das Übersetzen von COCOSYS basierte unter Linux schon seit einigen Jahren auf CMake, sodass ein funktionsfähiger Satz an CMake-Dateien in den einzelnen Teilen von COCOSYS bereits vorhanden war. Da dieses bisher nur unter Linux eingesetzt worden war, mussten zunächst einige linuxspezifische Aktionen verallgemeinert werden. In die Haupt-CMake-Datei von COCOSYS wurde CMakelt integriert, wodurch sich zum Beispiel Vereinfachungen bei den Compilerparametern (siehe oben) und der Einbindung der MPI-Bibliothek für die Interprozesskommunikation (wird von CMakelt geprüft und bereitgestellt) ergaben. Ferner wurden ATHLET und ATHLET-CD neu eingebunden, wodurch sich auch hier durch die Verwendung von CMake Vereinfachungen ergeben, da diese nun ebenfalls CMake verwenden und einfach als cmake-interne Bauziele bereitgestellt werden. Dadurch kann die manuelle Durchführung der Schritte des Buildsystems von ATHLET und ATHLET-CD im COCOSYS-CMake komplett entfallen. Für das Entwickeln unter Windows wurde ein Skript zur einfachen Generierung der Visual-Studio-Dateien hinzugefügt. Dieses erlaubt es auch, das Übersetzen einer gewünschten Konfiguration durchzuführen. Das erleichtert das Zusammenspiel mit dem automatischen Übersetzen im Testsystem. Unter Linux war diese Funktionalität, umgesetzt mit GNU-Make, bereits vorhanden.

# 2.1.3 Kopplung und Datenkommunikation zwischen COCOSYS und ATHLET

Der Systemcode ATHLET ist mit umfangreichen Softwareschnittstellen ausgestattet, diese erlauben es:

- zur Laufzeit Codes aus vorkompilierten Bibliotheken (Plugins) zu laden und auszuführen
- anderen Codes die einzelnen Phasen des ATHLET-Programmablaufs schrittweise abzuarbeiten, Zeitschritte einzeln auszuführen und auch zu wiederholen
- eigene Prozeduren an bestimmten Stellen des ATHLET-Codes einzuhaken, die dann dort ausgeführt werden

## 2.1.3.1 Technische Umsetzung: Arbeiten an der Kopplung via Plugin-Konzept

#### Ausgangslage

Die in ATHLET zur Laufzeit geladenen Bibliotheken (Plugins) können im Eingabedatensatz aktiviert oder deaktiviert werden und unter bestimmten Voraussetzungen auch von Anwendern erzeugt werden. Neben der Kopplung zu COCOSYS mit dem COCOSYS-Plugin, ist auch ATHLET-CD als Core-Degradation-Plugin an ATHLET angebunden /SCH 18/. Bei Aktivierung eines Plugins führt ATHLET in seiner Anfangsphase eine bestimmte Prozedur des Plugins aus; in dieser kann das Plugin weitere seiner Unterprogramme in den ATHLET-Ablauf einhaken. Für die Steuerung von außen ist die gesamte Funktionalität des ATHLET-Codes in einer einzigen Bibliothek vorhanden (*athlet.dll*), deren Unterprogramme aus unterschiedlichen Programmiersprachen heraus aufgerufen werden können. Der Austausch von Daten zwischen den Plugins und ATHLET sowie dem steuernden Programm und ATHLET erfolgt mit Hilfe der Bibliothek Libfde (<u>https://github.com/zorkator/libfde</u>). Mit dieser können Daten und Prozeduren in einer hierarchischen Struktur abgelegt und wieder ausgelesen werden.

Bereits im Vorgängervorhaben /SPE 17/ war die Umstellung der Kopplung von ATHLET und COCOSYS mit dem Plugin-Konzept durchgeführt worden. Als Ergebnis dieser Umstellung wird der Quellcode für die Kopplung (d. h. der Quellcode für den Datenaustausch zwischen ATHLET und COCOSYS und der entsprechenden Verarbeitung der Daten) als eigenständige Bibliothek übersetzt und dahingehend ergänzt, um von ATHLET als Plugin geladen werden zu können. Zuvor mussten auf der Basis der im ATHLET-Softwarearchiv verfügbaren ATHLET-Version weitere separate Softwareprojekte für Kopplungen von ATHLET/ATHLET-CD mit COCOSYS erstellt und bei Änderungen immer wieder angepasst werden. Dabei wurden Platzhalterroutinen in ATHLET durch Routinen ersetzt, die die Kopplungsarbeiten übernehmen. Mit dem Plugin entfällt das stete manuelle Anpassen der Kopplungsprojekte. Auf Variablen und Unterprogramme von ATHLET, die bisher während der Übersetzung referenziert worden sind, wird nun zur Laufzeit über die Bibliothek Libfde zugegriffen.

#### Durchgeführte Arbeiten

Die hier durchgeführten Arbeiten am COCOSYS-Plugin umfassten Fehlerkorrekturen und zielten auf den Erhalt der Funktionsfähigkeit bei Änderungen und Umstrukturierungen in ATHLET, die besonders im Jahr 2018 vor der Veröffentlichung von AC<sup>2</sup> 2019 recht umfangreich ausfielen, ab. Die plugin-basierte Kopplung wurde in Tests von Entwicklern und Anwendern umfangreich verifiziert und ist Teil der Versionen von AC<sup>2</sup> 2019. Sie kann für Vergleichsrechnungen mit dem ATHLET-Treiber verwendet werden, für den im Projektzeitraum hauptsächlich Weiterentwicklungen gemacht worden sind.

## 2.1.3.2 Technische Umsetzung: Arbeiten zur zukünftigen Kopplung via Treiber-Konzept

#### Ausgangslage

Im Rahmen des Verbundprojekts EASY /BUC 18/ war ein ATHLET-Treiber entwickelt worden, der – im Gegensatz zum Plugin – den ATHLET-Lauf phasen- bzw. zeitschrittweise steuert. Der Treiber ist in der Skriptsprache Python geschrieben. So können vom Anwender Python-Methoden für die Ventilsteuerung entwickelt und verwendet werden, ohne ATHLET neu zu übersetzen. Der Python-Treiber bedient sich hauptsächlich aus Unterprogrammen, die von der ATHLET-Bibliothek und der neu entwickelten ATHLETCD\_DRV-Bibliothek bereitgestellt werden. Unter anderem implementiert der Python-Treiber eine Zeitschrittschleife für die Rechnung, in der für jeden Zeitschritt das entsprechende Unterprogramm der ATHLET-Bibliothek aufgerufen wird. Vor und nach dem Zeitschritt können Daten von ATHLET abgefragt oder an ATHLET zurückgegeben werden, die dann in der weiteren Rechnung verwendet werden. Alle für die Kopplung mit COCOSYS notwendigen Unterprogramme werden in der vorkompilierten Bibliothek ATHLETCD\_DRV bereitgestellt, und vom Python-Treiber an den entsprechenden Stellen in der ATHLET-Bibliothek eingehakt. Dadurch mussten die Aufgaben der Kopplung, wie die Abfrage der ATHLET-Ergebnisse für COCOSYS, Verarbeitung der Eingabedaten, Bereitstellung der COCOSYS-Daten und Kommunikation, nicht in Python implementiert werden, sondern es kann hier auf Bibliotheken zurückgegriffen werden, die von allen

COCOSYS-Modulen verwendet werden. In Python implementiert sind somit nur rein administrative Aufgaben.

Generell ist die Bibliothek ATHLETCD\_DRV konzeptionell eng verwandt mit einem ATHLET-Plugin, im Sinne des Einhakens von Prozeduren in den ATHLET-Lauf. Durch die Steuerung des ATHLET-Codes von außen eröffnen sich jedoch weitere Möglichkeiten. So lässt sich die EXT-Schnittstelle verwenden (siehe Abschnitt 2.2.4.2), und Zeitschritte können wiederholt werden (von ATHLET und von COCOSYS THY), was eine iterative Kopplung der beiden Programme zulässt. Ferner sind moderne Entwicklungskonzepte von COCOSYS konsequent umgesetzt. So lassen sich Daten in dynamischen Strukturen ablegen, verarbeiten und zwischen COCOSYS-Modulen austauschen. Auf diesen Strukturen lassen sich typische Operationen wie die Integration verschiedener Massen- und Energieströme mit einer Methode durchführen, für das COCOSYS-Plugin existieren hier noch jeweils einzelne Code-Blöcke zur Integration der verschiedenen, als Raten anfallenden Daten. Daher soll der ATHLETCD\_DRV das COCOSYS-Plugin ersetzen.

#### Durchgeführte Arbeiten

In diesem Vorhaben wurden dazu die nötigen Arbeiten durchgeführt: Der Stand der Arbeiten des EASY-Projekts wurde in diesem Vorhaben zunächst im COCOSYS-Projektarchiv entsprechend berücksichtigt und integriert. Dazu dient das speziell entwickelte COCOSYS-Modul ATHLETCD\_DRV, welches – als klassisches COCOSYS-Modul – als ausführbare Datei ausgelegt ist und, ähnlich wie der Python-Treiber, nun auch die ATHLETCD\_DRV-Bibliothek verwendet. Dazu war es nötig, die speziell für den Python-Treiber geschaffenen Kommunikationsstellen zu verallgemeinern, sodass sowohl der Python-Treiber zur Steuerung von ATHLET wie auch das Modul verwendet werden kann. Verschiedene, im EASY-Projekt nicht verwendete Schnittstellenteile wurden geprüft, falls notwendig korrigiert oder neu hinzugefügt. Letzteres betrifft zum Beispiel den Übertrag von Spaltprodukten und den Austrag von Schmelze aus ATHLET-CD im Falle eines Kernversagens. Um die Funktionsfähigkeit der verschiedenen Treiberarten und Parameter kontinuierlich sicherzustellen, wurden einfache Tests erstellt. Dabei trat unter anderem ein Problem auf, das beispielhaft im folgenden Abschnitt detaillierter dargelegt werden soll.

#### Untersuchung und Korrektur des Massentransfers

Bei der Weiterentwicklung des COCOSYS-Moduls ATHLETCD\_DRV, welches die Rolle der Steuerung von ATHLET im Falle gekoppelter Anwendungen zwischen COCOSYS und ATHLET übernimmt, sind einfache Datensätze entwickelt worden, mit denen sich einzelne Elemente der Kopplung von ATHLET und COCOSYS untersuchen lassen. Diese sind in der Regel Teil der vom Continuous-Integration-System standardmäßig durchgeführten Testrechnungen, da sie aufgrund ihrer Einfachheit nur wenige Sekunden dauern. Eines dieser Szenarien testet die DISCHARGE-Schnittstelle von ATHLET. Diese wurde in gekoppelten Rechnungen bisher für die Abbildung der Sicherheitsventile des Primärkreises eingesetzt, für welche nur ein gerichteter Massentransfer vom Primärkreis ins Containment erlaubt wurde, eine Rückströmung war jedoch grundsätzlich möglich. Die hier durchgeführte Untersuchung dient dazu, in AC<sup>2</sup> die Funktionsfähigkeit der Simulation von möglichen Rückströmungen vom Containment (COCOSYS) in den Primärkreis (ATHLET) in der aktuellen Entwicklerversion wie auch für zukünftige Versionen sicherzustellen.



Abb. 2.2 Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der von COCOSYS empfangenen Masse (Stand von 2018)

Das einfache Szenario besteht auf der Seite des Primärkreises (ATHLET) aus einem einzelnen Behältervolumen mit einem angeschlossenen Rohr, das ins Containment mündet. Das Containment wird in ATHLET, wie bisher üblich, durch ein zeitabhängiges Volumen abgebildet, in welches der Zustand der einzigen COCOSYS-Zone gespiegelt wird. Als Medium wird Luft eingesetzt, die im Primärkreis anfänglich einen Druck von 1 bar hat, und während der ersten 5 Sekunden auf 4 bar erhöht wird. Dieser Druck wird dem Primärkreis als Randbedingung aufgeprägt. Hingegen liegt im Containment ein Druck von anfänglich 1 bar vor. Bei Öffnung des DISCHARGE-Ventils bei einer Zeit von 6 Sekunden ist das Druckverhältnis überkritisch im Sinne der Schallgeschwindigkeit.

Sowohl COCOSYS als auch ATHLET bilanzieren die Menge der aus- bzw. eingetragenen Massen. Diese stehen dann als Ausgabegrößen zur Verfügung (siehe Abb. 2.2). In dieser Abbildung lässt sich der Ablauf der Rechnung nachverfolgen. Nach Öffnung des Ventils (nach 6 s) strömt die Luft ins Containment. Wegen des überkritischen Druckverhältnisses ist der Massenstrom nach kurzer Zeit nahezu konstant und reagiert nicht auf den zunehmenden Druck im Containment (7 s bis 11 s). Aufgrund dieser Eigenschaft des DISCHARGE-Modells von ATHLET steigt der Druck im Containment auch über den des Primärkreises und es kommt zu einer Umkehr der Strömungsrichtung. Auch diese Phase der Rückströmung dauert zu lange, bis nun der Druck im Primärkreis über dem des Containments liegt. Es kommt wiederum zu einer Umkehr der Strömungsrichtung. In der folgenden Zeit bleibt es bei diesem Verhalten mit steten Wechseln der Strömungsrichtung. Dieses Verhalten, welches in Simulationen realer Szenarien bislang nicht beobachtet wurde, ist unerwünscht und könnte potenziell zu fehlerhaften Rechnungen führen.

Der Öffnungsgrad des Ventils wird immer durch ein GCSM-Signal gesteuert. Hierbei wird das Ventil bei Überschreiten einer vorgegebenen Druckdifferenz zwischen Primärkreis und Containment geöffnet und bei Unterschreiten einer kleineren Druckdifferenz wieder geschlossen. Wobei beim Schließen der Druck im Primärkreis immer noch höher als der des Containments ist. Um die Rückströmung zu simulieren, wird das Ventil im hier gerechneten Fall dauerhaft offengelassen.

Die in Abb. 2.2 sichtbare Differenz der bilanzierten Massen bedeutet, dass beim Massenübertrag Masse verloren geht. Unabhängig vom Auftreten dieses Verhaltens in realen Rechnungen, sollte die Kopplung in jedem Fall die Massen- und Energieerhaltung bewahren. Das hier gezeigte Szenario stellt also aufgrund der abrupten Richtungswechsel der Strömung einen Extremtest dar. Es stellte sich heraus, dass der Fehler sowohl beim Einsatz in der früheren als auch in der neuen Kopplungstechnik mittels des ATHLET-Treibers auftritt und seine Ursache in einer unterschiedlichen Behandlung von positiven und negativen externen Massenströmen im Thermohydraulik-Modul hat. Nach Korrektur des Fehlers ist in AC<sup>2</sup> die Massenerhaltung zwischen ATHLET und COCOSYS sichergestellt (siehe Abb. 2.3).



Abb. 2.3Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der<br/>von COCOSYS empfangenen Masse, aktueller Stand

#### 2.2 Erweiterung des Kopplungsumfangs

Neben der in Abschnitt 2.1 beschriebenen Zielsetzung, eine zukunftsfähige Software-Technik zur Anbindung der Einzelcodes in AC<sup>2</sup> zu etablieren, sind in diesem Arbeitspunkt einzelne Arbeiten zur Erweiterung des Umfangs der Kopplung durchgeführt worden. Diese erweitern das Anwendungsspektrum für viele relevante Situationen.

#### 2.2.1 Wärmeaustausch zwischen Reaktorkühlkreislauf und Containment

#### 2.2.1.1 Wärmeübertrag vom unteren Plenum

#### Ausgangslage

ATHLET-CD berechnet die Vorgänge im RDB während einer Kernzerstörung. Im Fall eines simulierten Störfalls mit Schmelzen des Kerninventars, wird die Schmelze zu einem bestimmten Zeitpunkt in das untere Plenum verlagert. Hier übernimmt das Modul AIDA von ATHLET-CD Berechnungen zur Interaktion der Schmelze mit der Wand des Reaktorkerns. Darunter sind zum Beispiel der Wärmeaustausch zwischen Schmelze und Wand bzw. zwischen Wand und Umgebung zu verstehen sowie strukturmechanische Berechnungen zu einem möglichen Versagen der Reaktorwand. Diese Wand ist jedoch nicht als ATHLET-Struktur abgebildet. Dadurch konnten die bisher implementierten Kopplungsmethoden für den Wärmetransport zu COCOSYS nicht angewendet werden, und die von der RDB-Wand abgegebene Wärmeenergie wurde in der COCOSYS-Simulation für die unteren Räume der Reaktoranlage nicht berücksichtigt.

#### Durchgeführte Arbeiten

In Zusammenarbeit mit den Entwicklern von ATHLET-CD wurde daher eine geeignete Kopplungsmethode für diesen Punkt erarbeitet.

Von ATHLET-CD wird der im Modul AIDA bestimmte Wärmestrom an die Umgebung mittels der Funktionalität eines GCSM-Signals zur Verfügung gestellt. GCSM-Signale werden auf Basis der Simulationssprache GCSM (General Control Simulation Module), die als Grundmodul in ATHLET verfügbar ist, erzeugt. GCSM dient zur flexiblen Nachbildung vom Reaktorschutzsystem sowie von Reaktorregelungs- und Hilfssystemen. GCSM-Signale können an das COCOSYS-Thermohydraulikmodul THY als Prozesssignal übertragen werden. Das THY-Modul kann solche Prozesssignale bereits auf verschiedene Weisen verarbeiten. Dazu wurde eine geeignete Erweiterung vorgenommen, die es erlaubt, dass für den vorliegenden Fall der vom GCSM-Signal übermittelte Wärmestrom von der RDB-Wand auch als Wärmeeinspeisung in eine COCOSYS-Zone verwendet werden kann. Da sich gleichzeitig die Temperatur der COCOSYS-Zone als Umgebungstemperatur für die Berechnung des Wärmestroms in AIDA heranziehen lässt, ist so die Rückkopplung mit der Umgebung gegeben.

Erste Versionen dieser Weiterentwicklung wurden Beta-Testern verfügbar gemacht und kleinere Fehler behoben. So wurde zum Beispiel zwischenzeitlich die Umgebungstemperatur vom AIDA-Modul nicht unter allen Umständen aktualisiert. Dies ist korrigiert worden. Inzwischen ist diese Kopplungsmethode bereits in den Release-Versionen ab AC<sup>2</sup> 2019 enthalten und damit für Anwender verfügbar. Ein Datensatz, der in den täglich ausgeführten Testrechnungen enthalten ist, wurde um diesen Wärmeübertrag von AIDA zu COCOSYS erweitert. Eine ausführliche Beschreibung mit den notwendigen Eingabedaten im Datensatz wurde dem Benutzerhandbuch hinzugefügt.

#### 2.2.1.2 Wärmeübergangsmodelle in der Strukturkopplung

#### Ausgangslage

ATHLET arbeitet zur Auswertung der Wärmeleitung in Strukturen intern mit Datenstrukturen, die HCO (Heat Conduction Object) genannt werden und zur Berechnung des Wärmeübertrags zwischen fluid-führenden Objekten (TFO, Thermo-Fluiddynamic Object) herangezogen werden. Auf Seiten des Fluids wird ein Wärmeübergangskoeffizient für den Wärmeübertrag vom Fluid zur Wand berechnet, in dem HCO selbst wird nur Wärmeleitung berechnet, wobei der Wärmestrom zwischen Fluid und HCO aus dem Wärmeübergangskoeffizienten und der Differenz der Oberflächentemperatur des HCO und der Fluidtemperatur folgt. Die HCO sind daher äquivalent zu den Wärme-Strukturen in COCOSYS. Neben weiteren Parametern in der Eingabe erlaubte ATHLET bisher die Angabe des Namens eines TFO oder eines GCSM-Signals für die Fluidtemperatur und als zweite Eingabegröße ein Stichwort für die automatische Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten oder die Angabe eines GCSM-Signals für den Wärmeübergangskoeffizienten. In der bisher umgesetzten Anbindung von HCO an COCOSYS wurden für diese beiden Eingabeparameter jeweils GCSM-Signale gesetzt, wobei der Wärmeübergangskoeffizient vom Benutzer bestimmt werden musste. Der von ATHLET berechnete Wärmestrom wurde dann an COCOSYS übertragen und in eine Zone eingespeist.

#### Durchgeführte Arbeiten

Zur Erweiterung dieses Kopplungsumfangs wurde in Zusammenarbeit mit den ATHLET-Entwicklern eine Schnittstelle in ATHLET definiert, über die angebundene Programme die notwendigen Daten für eine Seite des HCO liefern können. Hierzu generiert ATHLET intern Felder für die Fluidtemperaturen und Wärmeübergangskoeffizienten und verwendet diese in seiner Berechnung. Dies wird in der ATHLET-Eingabedatei durch Angabe des Stichworts EXTERNAL oder COCOSYS anstatt des Namens eines TFO oder GCSM-Signals aktiviert. Analog wird die Verwendung des Wärmeübergangskoeffizienten durch Angabe von HTC\_COCO eingeschaltet (siehe Abb. 2.5). Das angebundene Programm, z. B. COCOSYS, ist dafür verantwortlich, diese Felder mit entsprechenden Werten zu füllen.



Abb. 2.4 Schematischer Aufbau der Wärmekopplung eines ATHLET-HCO und einer COCOSYS-Struktur

Prinzipielles Ziel der hier vorgenommenen Erweiterungen ist die Abbildung von ATHLET-Strukturen (HCO) im Containment, sodass COCOSYS-spezifische Modelle, wie z. B. Ablagerung von Spaltprodukten, angewendet werden können. Am einfachsten umzusetzen ist dies, wenn die HCO als COCOSYS-Strukturen abgebildet sind. Dann lassen sich automatisch alle COCOSYS-Modelle anwenden. In der internen Darstellung sind diese dann normale Strukturen, jedoch wird die Wärmeleitung innerhalb dieser Strukturen nicht gelöst und die Oberflächentemperaturen werden durch Temperaturen von ATHLET ersetzt. Zusätzlich liefert ATHLET noch den Wärmestrom und erhält Fluidtemperatur und Wärmeübergangskoeffizienten von COCOSYS. Im COCOSYS-Modul THY für die Thermohydraulik wird ein ähnliches Konzept bereits bei der Darstellung von Schmelzeoberflächen eingesetzt.

Die Verarbeitung der Eingabedaten im Modul THY wurde so erweitert, dass als MODEL-Parameter die Angabe des Stichworts ATHLET, gefolgt vom Namen des assoziierten ATHLET-HCO möglich ist (siehe Abb. 2.5, links). Dem folgen die üblichen Parameter für eine COCOSYS-Struktur. Das THY-Modul erzeugt hier zunächst ganz übliche Wärme-Strukturen, markiert diese jedoch als HCO-gekoppelt und sammelt die Informationen über diese Strukturen. Diese Informationen werden dann an ATHLET übertragen, sodass hier die Eingaben geprüft werden können. Die Markierung dient im weiteren Programmverlauf dazu, die Wärmeleitungsgleichung für diese Strukturen zu deaktivieren, Daten für den Übertrag an ATHLET vorzubereiten und die Daten von ATHLET als Randbedingung zu verwenden.

C	- STRUCTURES		C	HEATCOND	1					
 Р @	StrucAth MODEL	АТН НСО		 К @	HPØ-ROHR AOLH	SBOLH	SEOLH	AORH	SBORH	SEORH
@	ATHLET ZONE R1	HPØ-ROHR HT-MODEL TAB 400	0.	· · · 	PØ-ROHR HTCDEF	0.1	1.1	COCOSYS	-1.0	-1.0
@	TYPE SIDE	HEIGHT 1.25	LENGTH 1.0	@	AIALPHA( HTCCALC	14) HTC_COC	O DUM	MY DUMM	IY	
сосо	SYS-Einga	ıbe		 ATHLE	T-Eingab	е				

#### Abb. 2.5 Eingabedaten der Struktur-HCO-Kopplung für COCOSYS und ATHLET

Die Implementierung für ATHLET erfolgt im COCOSYS-Modul ATHLETCD\_DRV. Dieses Modul ruft das Hauptprogramm von ATHLET auf und stellt zusätzliche Funktionen bereit, die an den vorgesehenen Stellen von ATHLET aufgerufen werden und alle kopplungsspezifischen Operationen durchführen. Dazu gehören unter anderem die Verarbeitung der Eingabedaten zur Kopplung, Aufarbeitung und Senden der ATHLET-Daten am Ende des Zeitschritts an COCOSYS sowie der Empfang und die Bereitstellung von Daten aus COCOSYS für den nächsten ATHLET-Zeitschritt. In der Phase des Lesens der Eingabedaten erhält dieses Modul die Informationen über HCO-gekoppelte Strukturen vom Modul THY. Diese werden mit den vorhandenen und als extern gesetzten HCO abgeglichen.

Im Allgemeinen wird ein ATHLET-HCO entsprechend der Aufteilung in Kontrollvolumina des angrenzenden TFO in kleinere Unter-HCO aufgeteilt. Jedes dieser Unter-HCO liefert einen eigenen Wärmestrom, eine eigene Oberflächentemperatur und kann einen eigenen Wärmeübergangskoeffizienten und eine eigene Fluidtemperatur bekommen. Im einfachsten Fall (ein ATHLET-HCO entspricht einer COCOSYS-Struktur) wird die Oberflächentemperatur für die COCOSYS-Struktur aus den flächenanteilig gemittelten Oberflächentemperaturen der Unter-HCO bestimmt, die Wärmeströme der Unter-HCO werden addiert. Allen Unter-HCO wird von COCOSYS derselbe Wärmeübergangskoeffizient und dieselbe Fluidtemperatur zugeordnet. Sollte die Größe des HCO oder die numerische Genauigkeit anderes erfordern, kann der COCOSYS-Struktur in der Eingabe auch nur eine Teilmenge von Unter-HCO zugeordnet werden. Die Mittelungsoperationen einer Struktur laufen dann jeweils nur über die zugeordneten Unter-HCO. Entsprechend müssen dann eine oder mehrere weitere COCOSYS-Strukturen erzeugt werden, um das gesamte HCO in COCOSYS abzubilden. Diese können dann auch verschiedenen COCOSYS-Zonen zugeordnet werden, sodass kaum Einschränkungen bei der Nodalisierung einzuhalten sind.

Zur Kontrolle der Implementierungsarbeiten sind einfache gekoppelte Datensätze für ATHLET und COCOSYS erstellt worden, die die neue Art der Kopplung einsetzen. Diese sind bewusst so aufgebaut, dass eine Berechnung mit der bisherigen Kopplungsmethode vergleichbare Ergebnisse liefert. So ist eine Kontrolle der neuen Implementierung recht einfach möglich. Diese einfachen Konfigurationen bestehen in der Regel aus einem ATHLET-Teil mit einem TFO und einem HCO, und einem COCOSYS-Teil mit einer Zone und einer Struktur, wobei die Struktur mit dem ATHLET-HCO gekoppelt ist.



Abb. 2.6 Vergleich des Wärmestroms zweier Rechnungen derselben Konfiguration mit HCO-Struktur-Kopplung im ATHLETCD\_DRV (DrvStruc) und ATHLET-COCOSYS-PLUGIN mit HCO-Zonen-Kopplung (PlgnZone)

Das Ergebnis einer solchen Rechnung ist in Abb. 2.6 dargestellt. Verglichen wird hier der zeitliche Verlauf des in die COCOSYS-Zone eingetragenen Wärmestroms. Die Eingabedaten mit Geometrie und numerischen Parametern sind identisch bis auf den Kopplungsteil für ATHLET. Im ersten Fall (DrvStruc\_LEFT\_StrucAth) kommt die neu implementierte HCO-Struktur-Kopplung des ATHLETCD\_DRV zum Einsatz, im zweiten Fall (PlgnZone\_R1\_AQ) wird die bestehende HCO-Zonen-Kopplung mit dem COCOSYS-Plugin verwendet. Es sind nur sehr kleine Unterschiede sichtbar, die sich primär aus einer unterschiedlichen Handhabung der Randbedingungen für ATHLET in der Kopplung ergeben. Dies belegt die Korrektheit des Datenübertrags. Analoge Datensätze existieren auch für die COCOSYS-seitigen Wärmeübergangsmodelle für erzwungene Konvektion (forced convection, FOC) und freie Konvektion (free convection, FRC), die ebenfalls bei dieser neuen Art der Kopplung bereits eingesetzt werden können. Aufgrund der sehr kurzen Laufzeiten sind alle diese Datensätze Teil der Standardtests, die bei jeder Änderung am Programmcode vom Continuous-Integration-System durchgeführt werden.

### 2.2.1.3 Wärmeübergangskorrelation für heiße Strukturen



### Ausgangslage

Abb. 2.7 Notkondensator im KERENA (Rohrbündel im Flutbecken)

Mit den Entwicklungen von neuen und innovativen, aktiven sowie passiven Not- und Nachkühlsystemen (Abb. 2.7, Abb. 2.8) ist es wichtig, zukünftig auch die Phänomene beim Betrieb von Wärmetauschern in solchen Systemen genau abzubilden. Nur so können Sicherheitsanalysen für die Wechselwirkung zwischen diesen neuen Systemen und anderen sicherheitsrelevanten Systemen durchgeführt werden.



Abb. 2.8 RDB-Außenkühlung bei KERENA /ARE 03/

Der Wärmetauscher in passiven Notkühlsystemen stellt eine Schnittstelle zwischen dem Reaktorkühlkreislauf und dem Containment dar. Der Wärmeaustausch wird durch physikalische Vorgänge an beiden Seiten der Schnittstelle bestimmt. Innerhalb des Reaktorkühlkreislaufs strömt Wasserdampf, Wasser oder ein Gemisch aus Wasser und Wasserdampf (Abb. 2.7). Die Kondensation von Dampf an der heißen Seite des Wärmetauschers (d. h. im Reaktorkühlkreislauf) ist dabei von besonderer Bedeutung. Auf der gekühlten Seite sind die Flächen des Wärmetauschers in großen Wasserpools des Containments angeordnet. In solchen Pools erfolgt die Wärmeabfuhr mittels freier Konvektion. Unter bestimmten Bedingungen kann die Oberflächentemperatur eines Wärmetauschers sehr schnell ansteigen und hohe Werte erreichen. Das Wasser an der Oberfläche der Wärmetauscher kann lokal Siedebedingungen erreichen, während das Fluid im Bulk im unterkühlten Zustand vorliegt. Dampfblasen entstehen somit an der Wandoberfläche und kondensieren beim Eintritt in die Kernströmung. Im Unterschied dazu befindet sich beim gesättigten Blasensieden die Flüssigkeit im Bulk auf Sättigungstemperatur. Die Korrelationen für freie- und erzwungene Konvektion unterschätzen den Wärmeübergangskoeffizient beim Sieden (Abb. 2.9).

Die verschiedenen Regimes für den Wärmeaustausch an heißen Strukturen in einer quasi-ruhenden Flüssigkeit (Behältersieden), wobei diese im Siedezustand oder auch unterkühlt sein kann, können anhand der Nukiyama-Kurve (Abb. 2.9) beschrieben werden. Dabei hängt der Verlauf dieser Kurve in den interessierenden Bereichen der Blasen- und Filmverdampfung von mehreren Parametern ab: Art der Flüssigkeit, Druck, Unterkühlung, Geometrie des Behälters und der Heizfläche, Oberflächenbeschaffenheit der Heizfläche sowie dessen Material sowie von Verunreinigungen. Folgende Regimes können unterschieden werden:

- Bei kleiner positiver Differenz zwischen der Temperatur an der Strukturoberfläche und der Siedetemperatur des Wassers erfolgt die Wärmeabfuhr noch durch freie Konvektion.
- Wenn der Temperaturunterschied größer ist als eine kritische Temperaturdifferenz  $\Delta T_{ONB}$  (von engl.: ONB Onset of Nucleate Boiling) bilden sich kleine Wasserdampfblasen und der Wärmeübergang in diesem Regime (Blasensieden, Nucleate Boiling) ist erhöht. Beim unterkühlten Blasensieden liegt die Wandtemperatur über der Sättigungstemperatur der Flüssigkeit, während das Fluid im Bulk im unterkühlten Zustand vorliegt; die Fluidtemperatur in der wandnahen Grenzschicht zeigt einen entsprechend steil abfallenden Verlauf. Dampfblasen entstehen somit an der Wandoberfläche und kondensieren beim Eintritt in die Kernströmung. Im Unterschied dazu befindet sich beim gesättigten Blasensieden die Flüssigkeit im Bulk auf Sättigungstemperatur, sodass die an der Wand entstehenden Dampfblasen beim Eintritt in die Kernströmung nicht mehr kondensieren.  $\Delta T_{ONB}$  beträgt für Wasser ca. 5 °C und hängt von mehreren Parametern ab.
- Bei größeren Temperaturdifferenzen als einem kritischen Wert  $\Delta T_{DNB}$  (von engl.: DNB – Departure from Nucleate Boiling) bildet sich ein teilweise stabiler Wasserdampffilm auf der Struktur aus und behindert den Wärmeaustausch. Für Wasser beträgt  $\Delta T_{DNB}$  ca. 30 °C und hängt von der Strukturgeometrie sowie von der Strukturrauheit ab.
- Wenn die Temperaturdifferenz noch größer wird, bildet sich auf der ganzen Oberfläche der Struktur ein stabiler Wasserdampffilm.



Abb. 2.9 Allgemeine Siedekurve nach Nukiyama für den Zusammenhang zwischen Wärmestromdichte an der Heizfläche und dem Temperaturunterschied zwischen Heizfläche T<sub>w</sub> und Siedetemperatur des Wassers T<sub>s</sub> bei atmosphärischem Druck /THE 11/

Die Rohsenow-Korrelation /ROH 52/ beschreibt den Wärmeaustausch beim Blasensieden und ist eine allgemeingültige Korrelation für das Behältersieden.

Vom Behältersieden wird der Begriff des Strömungssiedens abgegrenzt, welcher die Verdampfung eines Fluids bei erzwungener Konvektion, beispielsweise in einer durchströmten Rohrleitung, beschreibt. Solche Bedingungen sind speziell für den Kühlkreislauf relevant. In ATHLET ist daher entsprechend eine umfassende Palette von Wärmeübergangskorrelationen für die Kühlung und Aufheizung eines Fluids in Kontakt mit Strukturen vorhanden /AUS 19/. Im Fall des Blasensiedens wird die Chen-Korrelation /CHE 66/ für gesättigtes Blasensieden bzw. die modifizierte Chen-Korrelation /COL 72/ für unterkühltes Blasensieden angewendet. Beide Modelle gehen von der Vorstellung aus, dass sich der Wärmestrom aus je einem Anteil für Blasenbildung und für konvektive Wärmeübertragung zusammensetzt. Wie in /WAL 02/ diskutiert, entspricht im Fall des gesättigten Blasensiedens die treibende Temperaturdifferenz für Blasensieden und konvektive Wärmeübertragung der Differenz zwischen der Wand- und der Sättigungstemperatur. Folglich ergibt sich der Gesamtwärmeübergangskoeffizient durch Addition der einzelnen Wärmeübergangskoeffizienten. Im Fall des unterkühlten Siedens hingegen ergibt sich die treibende Temperaturdifferenz für die konvektive Wärmeübertragung als Differenz zwischen der Wandund Fluidtemperatur. der Die treibende
Temperaturdifferenz für die Verdampfung ist analog zum gesättigten Sieden wiederum die Differenz zwischen der Wand- und der Sättigungstemperatur.

### Modellbeschreibung

Da in COCOSYS keine Information über lokale konvektive Strömungsgeschwindigkeiten vorliegt, wurde als erster Ansatz für die Berücksichtigung des Behältersiedens die Rohsenow-Korrelation ausgewählt und als Modelloption bei der Auswahl von Wärmeübergangsmodellen in COCOSYS eingebaut. Für die hier relevanten Geometrien gib es große Unsicherheiten für die Abschätzung der kritischen Temperaturdifferenz  $\Delta T_{DNB}$ , da entsprechende Untersuchungen in der Literatur nicht verfügbar sind.

Die Rohsenow-Korrelation hat die folgende Form:

$$q = \left(\frac{\bar{c}_p \Delta T}{h_{fg} Pr^n C_{sf}}\right)^3 \bar{\eta} h_{fg} \sqrt{\frac{g(\rho_1 - \rho_v)}{\sigma}}$$
(2.1)

Die Prandtl-Kennzahl lautet:

$$\Pr = \frac{\overline{\eta}\overline{c}_p}{\overline{\lambda}}$$
(2.2)

Die folgenden Bezeichnungen wurden verwendet:

- q Wärmestromdichte  $\left[\frac{W}{m^2}\right]$
- $\overline{c}_{p}$  spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit  $\left[\frac{J}{kaK}\right]$
- $\Delta T$  Temperaturdifferenz (Übertemperatur) [K]
- $h_{fg}$  Verdampfungsenthalpie  $\left[\frac{J}{kg}\right]$
- Pr Prandtl-Kennzahl
- *n* experimentelle Konstante
- Csf Struktur-Oberfläche-Flüssigkeit-Faktor
- $\bar{\eta}$  dynamische Viskosität der Flüssigkeit  $\left[\frac{kg}{m_s}\right]$
- g Erdbeschleunigung  $\left[\frac{m}{s^2}\right]$

- $\rho_1$  Flüssigkeitsdichte  $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
- $\rho_v$  Dampfdichte  $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
- $\sigma$  Oberflächenspannung zwischen Flüssigkeit und Dampf  $\left[\frac{N}{m}\right]$
- $\bar{\lambda}$  Wärmeleitfähigkeit der Flüssigkeit  $\left[\frac{W}{m\kappa}\right]$

Für Wasser ist die experimentelle Konstante n = 1. Die Stoffwerte  $\bar{c}_p$ ,  $\bar{\eta}$  und  $\bar{\lambda}$  werden jeweils bei mittlerer Temperatur zwischen Heizfläche und Bulk ermittelt.

Der Struktur-Oberfläche-Flüssigkeit-Faktor ist ein Eingabeparameter. In vielen Sicherheitssystemen wie dem Core-Catcher, der RDB-Außenkühlung oder in passiven Wärmeabführsystemen kommt sehr heißer Stahl in Kontakt mit Wasser. Deswegen wurde der Wert für polierten Stahl und Wasser  $C_{sf} = 0.0132$  als Standartwert genommen.

### Verifikation

Um die Implementierung der Rohsenow-Korrelation zu verifizieren und die numerische Stabilität dieses Modells zu untersuchen, werden zwei Geometrien A und B untersucht. Für jede Geometrie wurden zwei Simulationen durchgeführt – eine Simulation unter Verwendung der neuentwickelten Rohsenow-Korrelation ,CO1+ROH<sup>4</sup>, und eine nur mit dem Konvektionsmodell ,CO1<sup>4</sup>. Die Beispiel-Geometrien sind in Abb. 2.10 und Abb. 2.11 dargestellt. In beiden Beispielen befindet sich ein kubischer Behälter mit der Kantenlänge 10 m in einem sehr großen kubischen Umgebungs-Raum mit einer Kantenlänge von 1.000 m (Abb. 2.12). Am Anfang des Versuchs steht Wasser auf dem Boden des Behälters. In beiden Fällen wurde Energie in den mittleren Teil des Bodens eigespeist, um die Beheizung der Struktur und damit des Wassers zu simulieren. Die Atmosphäre am Anfang des Versuchs ist Luft mit einer Luftfeuchtigkeit von 45 %. Alles hat zu Beginn der Rechnung eine Temperatur von 25 °C.



Abb. 2.10 Beispiel-Geometrie für die Untersuchung des Siedens: Geometrie A mit Lüftung



Abb. 2.11 Beispiel-Geometrie für die Untersuchung des Siedens: Geometrie B ohne Lüftung

Die zwei Beispiele A und B unterscheiden sich hauptsächlich durch die Verbindung zum Umgebungsraum. Im Beispiel A, das in Abb. 2.10 dargestellt ist, erlauben zwei Öffnungen die Entlüftung des inneren Raums. So steigt der Druck in diesem Fall im Behälter nicht. Im Beispiel B, wo der Raum nicht entlüftet ist (Abb. 2.11), steigt aufgrund der Verdampfung von Wasser der Druck. Der Behälter der Beispielgeometrie wird in 8 COCOSYS-Zonen unterteilt (Abb. 2.12). Der Umgebungsraum wurde in zwei Zonen unterteilt.



Abb. 2.12 Nodalisierung der Beispiel-Geometrie in COCOSYS

Die Energieeinspeisung im mittleren Teil des Bodens ist in Abb. 2.13 dargestellt. Diese Energie entspricht der Größenordnung einer typischen Nachzerfallswärmeleistung in einem Leistungsreaktor in einem Zeitraum bis zu 3 h nach SCRAM.

Die Abnahme der Wassermasse in einer der unteren Zonen in den Beispielen A und B ist in Abb. 2.14 und Abb. 2.15 gezeichnet. Die beiden Fälle wurden bis 10.000 Sekunden simuliert.



Abb. 2.13 Energieeinspeisung in die Boden-Platte



Abb. 2.14 Durchschnittliche Wassermasse in den unteren Zonen in Beispiel A



Abb. 2.15 Durchschnittliche Wassermasse in den unteren Zonen in Beispiel B

Das Modell CO1 unterschätzt den Wärmeaustausch beim Sieden. Deswegen verdampft das Wasser langsamer als mit dem genaueren Modell 'ROH'.

Der Zeitverlauf von atmosphärischem Druck und Wassertemperatur in den Beispielen A und B ist in Abb. 2.16Abb. 2.17 bis Abb. 2.19 dargestellt. Im Beispiel B steigt der Druck wie erwartet. Für konstanten Druck zeigt Abb. 2.16 numerische Instabilitäten beim Leersieden.

Für die Simulation von Siedevorgängen in COCOSYS-Pools wurde in ersten detaillierteren Untersuchungen im Rahmen von RS1579 noch weiterer Verbesserungsbedarf aufgezeigt. Modellverbesserungen zum Sieden in COCOSYS sind Gegenstand eines geplanten dedizierten Vorhabens.



Abb. 2.16 Atmosphärischer Druck in Geometrie A



Abb. 2.17 Atmosphärischer Druck in Geometrie B



Abb. 2.18 Wassertemperatur in den unteren Zonen der Geometrie A



Abb. 2.19 Wassertemperatur in den unteren Zonen der Geometrie B

#### Fazit

Die Palette von verfügbaren Wärmeübergangsmodellen in COCOSYS wurde um die Rohsenow-Korrelation zum Blasensieden erweitert. Das neue Modell wurde in vereinfachten Testrechnungen mit einer horizontalen beheizten Platte überprüft.

Dieser Testfall entspricht den Gegebenheiten beim sogenannten Behältersieden, bei dem keine extern aufgeprägte Wassergeschwindigkeit vorliegt und das Wasser von unten beheizt wird. Diese Korrelation ist damit streng genommen nur auf heiße horizontale Strukturen unter Wasser anwendbar, ist für andere Geometrien aber vermutlich eine bessere Näherung als CO1 (d. h. freie Konvektion). Anlagenszenarien beinhalten auch heiße vertikale Strukturen unter Wasser, z. B. bei der Außenkühlung von Containment oder RDB. In einem separaten Vorhaben *Verbesserungen der Simulation von Siedevorgängen in AC<sup>2</sup> bei lokalem Eintrag von Wärme in Wasserpools* werden weitergehende Arbeiten zu diesem Punkt durchgeführt.

Aufgrund des untersuchten Testbeispiels erweist sich die Implementation der Rohsenow-Korrelation als robust und erlaubt Simulationen auch bei höheren Drücken und Temperaturen, soweit die relevanten Stoffwerte in COCOSYS zur Verfügung stehen. Die Rohsenow-Korrelation ist imstande, den effizienten Wärmeübergang beim Blasensieden in großen Wasserpools abzubilden, im Unterschied zu den Modellen für freie und erzwungene Konvektion. Mit der noch ausstehenden Verfügbarmachung dieses COCOSYS-Wärmeübergangsmodells für die Kopplung mit ATHLET beim Wärmedurchgang durch Strukturen kann zukünftig auch das Sieden in Wasserpools an Strukturen des Kühlkreislaufes realistisch simuliert werden. Weitere Verbesserungen zur Simulation des Siedens in COCOSYS sind in einem neuen Vorhaben hierzu geplant.

## 2.2.2 Ablagerung von Spaltprodukten auf Komponenten des Kühlkreislaufs

## Ausgangslage

Zusätzlich zur Thermodynamik spielt auch die Ablagerung von radioaktiven (New)AFP-Spezies eine Rolle bei der Kopplung der verschiedenen AC<sup>2</sup>-Module. In diesem Arbeitspunkt soll die Simulation der Ablagerung von Aerosolen auf Strukturen des Kühlkreislaufs ermöglicht werden.

#### Durchgeführte Arbeiten

Im Rahmen der Neuentwicklung von NewAFP (vgl. Abschnitt 3.1) sind Datenstrukturen und Methoden entsprechend angelegt worden, sodass jetzt alle Strukturen im THY-Teil auch als potenzielle Flächen für Ablagerungen von Aerosolen, chemischen Verbindungen und auch Spaltprodukten verwendet werden. Dadurch werden auch die mit ATHLET gekoppelten Strukturen automatisch für Ablagerungen auf der Spaltproduktseite berücksichtigt. Genau wie bei dem Modell für Filterstrukturen (Abschnitt 3.2.6) liefert (New)AFP die Wärmequellen aus der Nachzerfallsleistung, die auf den Strukturen freigesetzt werden, an das THY-Modul. In THY wird die freigesetzte Energie aufgeteilt nach kurz- ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) und langreichweitiger ( $\gamma$ ) Strahlung auf die Gas- und Wasserphase und die in der Zone vorhandenen Strukturen. Sowohl in AFP als auch in NewAFP war eine Ergänzung der Einleseroutinen für Strukturen notwendig, da bei den mit ATHLET gekoppelten Strukturen nur eine Seite in COCOSYS angegeben wird.



Abb. 2.20 Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der von COCOSYS empfangenen Masse (Stand von 2018)

Für NewAFP gibt es die Anforderung, dass der Oberflächentyp (Stahl, Farbe, Beton etc.) für die chemischen Reaktionen zusammen mit anderen Materialdaten vorgegeben werden muss. Diese Angabe muss daher nun auch für ATHLET-Strukturen direkt unter der Strukturdefinition mit dem Item ---- SURFACE\_TYPE angeführt werden. Für beide Codes AFP und NewAFP ist aufbauend auf den Arbeiten in Abschnitt 2.2.1.2 ein

Testdatensatz in die Jenkins-Testprozedur eingepflegt worden. Dazu wird Aerosol eingespeist wie in Abschnitt 3.2.6 und dabei die Nachzerfallsleistung mit der Option DECAY\_FANP als Tabellenwerte vorgegeben. Die Abb. 2.21 zeigt, dass die Nachzerfallsleistung korrekt auf die drei im Testdatensatz definierten Strukturen verteilt wird und an das THY-Modul gesendet wird. Dargestellt ist das Feld HDCHEA, dass die in die Strukturoberfläche eingetragene Nachzerfallsleistung angibt.



Abb. 2.21 Aufteilung der Nachzerfallsleistung auf Athlet-Strukturen

Dabei ist allerdings zu beachten, dass die Leistung an den Oberflächen der ATHLET-Strukturen nicht in den allgemeinen Integrationsroutinen in THY benutzt wird, da der Wärmetransfer auf der ATHLET-Seite berechnet wird. Genauso wie die Kopplung der Wärmestrahlung wird die Nachzerfallsleistung, die auf den Oberflächen der ATHLET-Strukturen anfällt, damit noch nicht berücksichtigt. Der Anteil, der auf andere Strukturen sowie die Gas- bzw. Wasservolumen aufgeteilt wird, wird hingegen korrekt berücksichtigt. Die zusätzliche Strahlungsleistung als auch die Nachzerfallsleistung muss in einem zukünftigen Schritt an ATHLET gesendet und dort berücksichtigt werden.

Weiter wird im Hinblick auf die Errechnung des Nuklidinventars von Reaktorkernen die GRS-Rechenkette zurzeit auf die Nutzung des von GRS und PSI gemeinsam entwickelten Rechencodes VENTINA umgestellt. Dies hat Auswirkungen auf die Modelle in

COCOSYS bzgl. des Isotopenverhaltens. Im Projekt RS1561 ist damit begonnen worden, die entsprechenden Schnittstellen zu NewAFP umzustellen. Das Isotopenpaket VENTINA ist bislang noch nicht in NewAFP eingebunden, weshalb die Berücksichtigung von Nachzerfallsleistungen auf den gekoppelten Strukturen derzeit, wie im oben beschriebenen Testfall, auf Tabellenwerten beruht.

## 2.2.3 Rückeinspeisung von Spaltprodukten in den Kühlkreislauf

### Ausgangslage

Die Rückeinspeisung von Spaltprodukten in den Kühlkreislauf stellt eine weitere Kopplung der Codes COCOSYS und ATHLET-CD in AC<sup>2</sup> dar. In diesem Arbeitspunkt wurden Arbeiten zur Erweiterung der Schnittstelle zwischen den Codes durchgeführt, um die Simulation einer Rückeinspeisung von Spaltprodukten aus dem Containment in den Kühlkreislauf zu ermöglichen.

### Durchgeführte Arbeiten

Dazu ist eine Prozedur erstellt worden, die den Quellvektor (d. h. den Vektor von zu übertragenden Spaltprodukten) ATHLET-seitig auf den NewAFP-Speziesbaum abbildet. Bei der ATHLET-Quelle werden chemische Verbindungen, Aerosole und Elemente, die auch Isotope berücksichtigen können, unterschieden. In dem Speziesbaum werden hingegen chemische Verbindungen in gasförmige Spezies und Aerosole eingeteilt, während Isotope unterhalb angesiedelt sind. Aufgrund der geplanten Umstellung von FIPISO auf VENTINA ist die Übertragung bisher nur für chemische Verbindungen und Aerosole geschehen. Zur Abbildung von Spaltprodukten sind konzeptionelle Arbeiten durchgeführt worden, da es notwendig ist, VENTINA sowohl in COCOSYS als auch in ATHLET in gleicher Verfahrensweise einzubinden. Wenn dies geschehen ist, wird aufgrund der einheitlichen Behandlung eine Übertragung der Isotope leichter durchführbar. Dabei ist zu beachten, dass die Kommunikation über das Data-Element-Modul zwischen NewAFP und dem ATHLETCD\_DRV (siehe Abschnitt 2.1.3 zur Kopplung und Datenkommunikation in AC<sup>2</sup>) erfolgt. Die Rückeinspeisung muss dann über die Schnittstelle Libfde (Fortran-Development-Extensions) die Daten wieder in die ATHLET-CD Felder übertragen.

Im Rahmen der Continuous-Integration-Testroutine (Kontinuierliche Integration, CI) wurde bereits die Kopplung von AFP mit ATHLET-CD anhand des s8orest-CCI-Datensatzes überprüft. Im Laufe der durchgeführten Arbeiten ist dieser Datensatz auch für NewAFP angepasst und ins CI-System eingepflegt worden. Dieses Vorgehen ist hilfreich, die Integration der Modelle auch zukünftig laufend zu überprüfen.

# 2.2.4 Vereinheitlichen von Benutzerschnittstellen

## 2.2.4.1 Graphische Benutzeroberfläche

Im Rahmen der Veröffentlichung von AC<sup>2</sup> 2019 ist für AC<sup>2</sup> eine gemeinsame graphische Oberfläche (GUI) erstellt worden. Diese erlaubt das Starten von ATHLET- (inklusive ATHLET-CD als Plugin), COCOSYS- und gekoppelten Rechnungen sowie das Verwalten mehrerer Rechnungen. Zusätzlich vorhanden sind der Zugriff auf weitere Hilfsprogramme (*Utilities*) und die Dokumentation der einzelnen Komponenten von AC<sup>2</sup>.

MC <sup>2</sup> 2019.1	- [	⊐ ×	
Utilities Documentation Help			
General ATHLET 3.2 ATHLET CD Working COCOSYS 3 ATHLET 7 ATHLET 70 COCOSYS	3.2 COCOSYS 3.0 Models and Methods COCOSYS 3.0 QA Manual COCOSYS 3.0 Regression Testing COCOSYS 3.0 User Manual	plorer	
Select Executable	Own Opefault 64-Bit		
Executable	C:/GRS-programs/AC2-2019.1/bin/cocosys.Release.x64/cocosys.exe Bri	owse	
Input Data	pwr-exam-bs-afp.inp Br	owse	
Output ID	pwr-exam-bs-afp Auto		
Restart File	Br	owse	
Additional Parameters			
Start       Log     pwr-exam-bs-afp       bc-24z-no1_coc-23       Controls			
	Wait Abort and close tab		
COCCOSYS: Program version COCCOSYS 3.0.1 (rev. 8882, 64 bit, Intel Fortran 16.0.4) 			

Abb. 2.22 Graphische Benutzeroberfläche AC<sup>2</sup> 2019.1

Der Start einer COCOSYS-Rechnung, allein oder gekoppelt mit ATHLET, erfolgt über ein Starterprogramm, das über Kommandozeilenargumente gesteuert wird. Alle notwendigen Schritte zum Starten, inklusive eventueller Umgebungsvariablen, werden automatisch gesetzt, sodass ein Starten in einem Schritt möglich ist. Um mit der GUI zusammenzuarbeiten, waren kleinere Detailarbeiten notwendig. Unter anderem erlaubt die GUI das Setzen von Parametern für ATHLET. Diese befinden sich aber auch – wie alle anderen COCOSYS-Module der Rechnung – im Eingabedatensatz für COCOSYS. Daher wurde COCOSYS so erweitert, dass diese ATHLET-Parameter nun über Kommandozeilenargumente an das Starterprogramm übergeben und berücksichtig werden. Die Angaben in der Eingabedatei werden in einem solchen Fall ignoriert.

## 2.2.4.2 Vereinfachung und Erweiterung der Kopplung mit ATHLET

Für die Modellierung von Stofftransport zwischen ATHLET und COCOSYS stand bisher auf der Seite von ATHLET nur das TDV (Time-Dependent-Volume) zur Verfügung. Dieses TDV kann anstatt eines von ATHLET berechneten Volumens verwendet werden und liefert ATHLET den Gegendruck beim Ausströmen bzw. Temperatur und Zusammensetzung beim Zuströmen. Diese Zustandsdaten müssen über GCSM-Signale bereitgestellt werden. Für die Eingabe in der Kopplung bedeutet dies, dass der Kopplungsteil angewiesen werden muss, die entsprechenden Daten von COCOSYS zu holen, und in einem zweiten Schritt müssen mit diesen Daten dann die GCSM-Signale erzeugt werden. Das muss jeweils einzeln für jede COCOSYS-Zone und für den Druck, die Temperatur, das Verhältnis von Gas und Gesamtmasse, für das Verhältnis von Wasserdampf zu nichtkondensierbaren Gasen und für jeden Anteil der Gaskomponenten gemacht werden. Dies wird schnell unübersichtlich, da für jede gekoppelte Zone bis zu 12 Definitionen zweimal gemacht werden müssen. Eine Abbildung von getrennter flüssiger Wasserphase und der Gasphase wird durch das TDV nicht unterstützt. So wird aus dem TDV flüssiges Wasser transportiert, auch wenn der Wasserspiegel eigentlich unterhalb einer Verbindung liegt.

Über die in ATHLET neu eingeführte EXT-Schnittstelle lässt sich ein reguläres ATHLET-Volumen in ein extern kontrolliertes Volumen umwandeln. Für dieses stehen dann weiterhin alle Optionen, inklusive des Wasserspiegels, in ATHLET zur Verfügung. Da für solche Volumen in ATHLET intern Felder für die Zustandsdaten bereitgestellt werden, kann die Übernahme von Daten aus COCOSYS vom ATHLETCD\_DRV komplett ohne zusätzliche Eingaben des Nutzers erfolgen. Einzig die Namen des ATHLET-Volumens und der COCOSYS-Zone sind in der Eingabe erforderlich. Der ATHLETCD\_DRV ist um die entsprechende Bereitstellung der COCOSYS-Daten erweitert worden.

### 2.2.5 Recording von Randbedingungen

Die geplante Aufgabe zur Ergänzung eines Verfahrens zum Recording von Randbedingungen in COCOSYS war mit der Zielsetzung verbunden, Variationsrechnungen von Anlagenrechnungen unter Nutzung des CCI-Moduls in COCOSYS durchführen zu können. Für diesen Fall berechnet ATHLET-CD bei Versagen des RDB den Schmelzeaustrag ins Containment. In der Regel sind die Rechenzeiten bis zum Kernversagen in Kopplung mit ATHLET bzw. ATHLET-CD lang, und im CCI-Modul ließen sich verschiedene Einstellungen bei einem Restart der Rechnung nicht nachträglich verändern. Der Anwender musste die gekoppelte Rechnung daher komplett neu durchführen, wenn er nur den Effekt anderer Modellparameter des CCI-Moduls für den Rechnungsabschnitt nach RDB-Versagen untersuchen wollte.

In Arbeiten zu AP4 mit Bezug zu diesem Arbeitspunkt wurde das Verhalten des CCI-Moduls beim Restart der Rechnung jedoch verbessert, vgl. Abschnitt 5.1.2. Sofern bis zum Restart-Zeitpunkt noch keine Schmelze ausgetreten ist, das CCI-Modul also inaktiv war, wird der Status des Moduls beim Restart der Rechnung komplett zurückgesetzt. Damit lassen sich jetzt alle Parameter verändern. Anwender können Variationsrechnungen mit geänderten CCI-Modellparametern jetzt von einem Restart-Punkt vor dem Versagen des RDB starten und müssen nicht die gesamte gekoppelte Rechnung wiederholen.

Mit den in AP4 erzielten Modellverbesserungen ist die Zielsetzung des Recordings mit Blick auf die Möglichkeit, Variationsrechnungen zur Ex-Vessel-Phase mit dem Modul CCI durchführen zu können, erreicht worden.

## 2.2.6 Sonstige Codekopplungen (CoPool)

Das Rechenprogramm CoPool wurde von Fraunhofer ITWM für die genaue Simulation vom Strömungsverhalten und Wärmeaustausch in großen Wasserpools im Containment entwickelt /KLE 17/. Die Entwicklung von CoPool fokussierte besonders auf die Simulation von typischen großen Wasservorlagen in Reaktoranlagen wie dem Sumpf im Containment eines DWR, der Kondensationskammer eines SWR und dem Steuerstabantriebsraum eines SWR. Zukünftige Änderungen in COCOSYS können die Kopplung mit CoPool beeinflussen. Um die zukünftige gekoppelte Anwendung von CoPool mit COCOSYS sicherzustellen, wurden die Quelltexte und die Dokumentation zu CoPool von der GRS übernommen. Das erlaubt eine langfristige technische Pflege der

COCOSYS-CoPool-Kopplung. Dazu wurde ein Projektmanagement-Projekt in der Projektverwaltungssoftware TeamForge eingerichtet und der Quelltext der Software wurde im Versionsverwaltungs-System SVN eingetragen. Die Visual-Studio-Projekte für Co-Pool wurden archiviert, um die Erstellung mit den bei der GRS verfügbaren C/C++-Compilern zu erlauben. Mit Umzug der Projektmanagement-Software von SVN/TeamForge zu Git/GitLab stehen die CoPool-Projekte nun im dortigen Softwarearchiv zur Verfügung.

## 2.3 Homogenisierung von Stoffdaten

Ursprünglich waren an dieser Stelle Arbeitsschritte zur vereinheitlichten Verwendung aktualisierter Stoffdaten in AC<sup>2</sup> geplant. Bei Verfügbarkeit von relevanten Ergebnissen der Hochschule Zittau/Görlitz für die COCOSYS-Entwicklung (hier: Verfügbarkeit von schnellen Berechnungsmethoden für in COCOSYS benötigte Stoffdaten zu Wasser/Dampf nach dem IAPWS-Standard sowie von nichtkondensierbaren Gasen) sollen diese zukünftig im Rechencode AC<sup>2</sup> einheitlich von ATHLET und COCOSYS verwendet werden. Im Verlauf der Zusammenarbeit zwischen der GRS und der Hochschule Zittau/Görlitz zu diesem Thema wurde vereinbart, dass zunächst Datenbanken für ATHLET bereitgestellt werden und die Bereitstellung und Integration der entsprechenden Stoffdaten für COCOSYS in einem Nachfolgevorhaben der Hochschule Zittau/Görlitz zu dem Projekt 1501552 erfolgt. Daher wurde dieser Arbeitspunkt mit der kostenneutralen Vertragsänderung vom 6.10.2020 zurückgestellt.

# 3 Modellentwicklung zu Aerosolen und Spaltprodukten

Die Umstrukturierung des Moduls AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten war bereits Gegenstand der Vorhaben RS1508 und RS1532 und resultierte aus zwei wesentlichen Motivationen:

- 1. Ermöglichung einer konsistenten Beschreibung der Spezies zwischen den verschiedenen Modellen für Aerosolphysik, Iodchemie und Spaltproduktbehandlung
- 2. Ermöglichung einer konsistenten Beschreibung der Geometrien in diesen Modellen als auch im thermohydraulischen Modul.

Dabei wurden zunächst eine Reihe von Einzelmodellen für das Aerosolverhalten und für die lodchemie auf zentral geführte und daher konsistente Bilanzen umgestellt. Hierbei zeigte sich, dass die ursprünglich als Umstrukturierung geplante Weiterentwicklung den gestellten Anforderungen (u. a. der Forderung nach konsistenter Nutzung von Geometriedaten und Strukturen in den Iod-, und Aerosolmodellen sowie in den thermohydraulischen Modellen) nicht gerecht werden konnte, sodass eine vollständige Neuprogrammierung des Moduls (NewAFP) erforderlich wurde.

Aufgrund des neuen, verfeinerten Konzeptes von Datenstrukturen in NewAFP, mithilfe derer die verschiedenen physikalischen Hosts von Spaltprodukten, die Transport- und Übertragungsprozesse sowie die Speziesmengen bilanziert werden, ermöglicht NewAFP prinzipiell eine deutlich detailliertere Modellierung (z. B. für die Chemie im Sprühtropfen und im Wasserfilm auf Strukturen) und damit auch neue oder erweiterte Modelle für die Simulation von Einzelphänomenen. Das von Grund auf neu entwickelte Aerosol-, Iod-, und Spaltproduktmodul NewAFP soll das bisher benutzte AFP ablösen. In diesem Arbeitspaket wurden weitere dazu notwendige Modellverbesserungen an NewAFP vorgenommen, um – perspektivisch – das frühere Modul AFP durch das (neue) detailliertere Modul NewAFP zu ersetzen.

#### 3.1 Weiterentwicklung von NewAFP und aktueller Stand

Die mit den hier durchgeführten Arbeiten erreichten Verbesserungen in der Beschreibung der Spezies beziehen sich auf folgende Punkte:

- AFP behandelt Aerosol-, lod-, und Spaltproduktspezies unterschiedlich:
  - Im Datensatz sind mehrfache Definitionen zwischen diesen drei Teilen nötig

- In AFP fehlen wichtige Rückwirkungen zwischen den Modellen:
  - Z. B. führen die chemischen Zersetzungen von IO<sub>3</sub> oder Silberiodid nicht zur Abnahme der Speziesmengen im Aerosolmodell.
  - Der Radioaktive Zerfall von <sup>131</sup>I führt nicht zur Abnahme von chemischen lodverbindungen.
- NewAFP löst diese Probleme durch die Definition eines einheitlichen Speziesbaums
  - Mehrere Ebenen: Aerosol- und Nichtaerosolkomponenten, chemische Verbindungen, Elemente und Isotope
  - Berücksichtigung der Umwandlung von unten nach oben als auch von oben nach unten wie in Abb. 3.1 dargestellt



Abb. 3.1 Hierarchischer Aufbau des neu entwickelten Speziesbaums

- AFP benötigte separate Beschreibungen von Strukturen in Aerosol-, Iod-, und Spaltproduktteil, anders als in THY:
  - Mehraufwand bei Datensatzerstellung
  - Inkonsistenzen zwischen verschiedenen Teilen

• NewAFP erlaubt eine konsistente Beschreibung der Geometrie durch die einheitliche Benutzung aller Strukturen zusammen mit dem thermohydraulischen Modell

Um die laufende Entwicklung zu überprüfen, sind Testdatensätze erstellt worden, die unabhängig von dem COCOSYS-Regressionstesten, aber vom Vorgehen ähnlich, implementiert worden sind. Dieses Vorgehen ermöglicht das frühzeitige Auffinden von unerwünschten bzw. fehlerhaften Effekten als Folge der umfangreichen Entwicklungstätigkeit. Da die Entwicklung von NewAFP noch deutlich stärker voranschreitet als andere Entwicklungsbereiche von COCOSYS, wird dieser Teil noch separat vom COCOSYS-Regressionstesten gehalten und von den Entwicklern per Hand gesteuert. Trotzdem werden auch erste NewAFP-Testdatensätze im Continuous-Integration (CI)-Verfahren verwendet.

### **Beta-Version von NewAFP**

Die Entwicklung von NewAFP ist umfangreich und komplex und erstreckt sich über einen sehr langen Entwicklungszeitraum. Mittlerweile hat NewAFP einen Stand erreicht, der es erlaubt, dass externe Organisationen den Code zu Forschungszwecken anwenden. NewAFP wird bereits bei Framatome Erlangen im Rahmen des AMICO-Projekts und bei KIT Karlsruhe zur Abwaschmodellierung eingesetzt. Insbesondere die Verwendung bei Framatome mit einem großen Anlagendatensatz zeigte Probleme (Programmabstürze und noch nicht zufriedenstellende Performance) des neuen Codes, deren Lösung einen großen Teil der Entwicklungsarbeiten im letzten Projektjahr beanspruchte. Dadurch hat sich die Stabilität deutlich verbessert und es ist nun möglich, eine Vorab- bzw. β-Version an externe Organisationen weiterzugeben, die für Forschungszwecke eingesetzt werden kann.

Folgende Vorgänge können in NewAFP simuliert werden:

- Das physikalische Verhalten von Aerosolen
- Chemische Vorgänge: die lodchemie
  - einschließlich Ansätzen für das Verhalten von Ruthenium (Ru),
  - einschließlich Vorgängen in Wasserfilmen und Sprüh-Tröpfchen;

- Transportvorgänge
  - in Strömungsverbindungen (Junctions), außer denen für die kombinierte Gas-/Wasserströmung (vom Typ ATM\_FULL)
  - inklusive des Abwaschens von Strukturen (neu)
- Effekte der Dosisrate, diese muss durch Tabellen vorgegeben werden
  - berücksichtigt im Chemieteil
- Containmentsprühen
  - dabei erfolgt die Simulation der Aerosole wie im alten AFP
  - Gasförmiger Iod-Massentransfer zwischen Tröpfchen und Atmosphäre (Kohlenwasserstofffragmente R, organische Iodverbindungen RI, I<sub>2</sub>)

Eine Modellierung einer Reihe von Phänomen ist erst durch die Entwicklung von NewAFP möglich geworden. Dies betrifft im Wesentlichen Modelle, die eine höhere Auflösung von räumlichen Details benötigen. Dies wird nun durch eine konsistente Beschreibung von Geometrien und Trägern (Hosts), auf denen die verschiedenen Spezies vorhanden sind, ermöglicht. Außerdem ist die konsistente Beschreibung von Spezies in dem strukturierten Speziesbaum umgesetzt worden, um eine konsistente Verschiebung von Spezies innerhalb verschiedener Komponenten zu ermöglichen. Eine Auflistung von Modellen, die durch die neuen Modellierungsmöglichkeiten realisiert werden konnten, ist in folgender Auflistung gegeben:

- Abwaschmodellierung (Mitriss von auf Strukturen abgelagerten Aerosolen durch Wasser)
  - Nicht nur Behandlung von Aerosolpartikeln, sondern auch Massentransfer innerhalb der Sprühtröpfchen inkl. chemischer Reaktionen in den Tröpfchen
  - Die Behandlung der lodchemie in den Sprühtröpfchen wird erst durch die genauere Modellierung der Geometrien möglich.
- Modelle zur Simulation der Wechselwirkung von Ag-Aerosolpartikeln mit gasförmigem lod unter Bildung von Silberiodid-Partikeln (Agl)
  - Beschreibung in der Atmosphäre als auch im Sumpf inkl. abgelagerter Aerosole

- Der strukturierte Speziesbaum ermöglicht die Einordnung und Verschiebung von neu gebildeten Aerosolpartikeln unter korrekter Berücksichtigung der Partikelgrößenklassen.
- Unsicherheiten in Phebus-FPT1-Rechnungen zeigen noch offene Fragestellungen und Entwicklungsbedarf, weshalb eine standardmäßige Aktivierung derzeit nicht geboten ist.

Allerdings hat NewAFP noch nicht den Stand erreicht, um das ursprüngliche AFP komplett zu ersetzen. Das hat mehrere Gründe. Speziell durch die Entscheidung, das in AFP verwendete FIPISO durch VENTINA zu ersetzen, verzögert sich die Implementierung der Spaltproduktbehandlung. Außerdem hat die Validierung noch nicht denselben Stand erreicht wie AFP und wird im Validierungsvorhaben RS1579 fortgesetzt. Darüber hinaus fehlt es noch an Erfahrungsrückfluss externer Anwender. Da nicht alle Partner ihre vorhandenen Eingabedatensätze sofort auf den neuen Code umstellen werden, ist eine parallele Veröffentlichung von AFP und NewAFP für einen gewissen Zeitraum geboten. Der Erfahrungsrückfluss nach dem nächsten AC<sup>2</sup>-Release stellt damit einen wichtigen Schritt da, um NewAFP weiter zu verbessern. Eine Auflistung noch nicht abgeschlossener Modellentwicklungen ist im Folgenden gegeben:

- Externe Quellen von Spaltprodukten
  - Kopplung mit ATHLET-CD und CCI
  - Aerosole und Chemieteil sind bereits gekoppelt.
  - Die Behandlung von Isotopen braucht die Einbindung von VENTINA, was im Nachfolgevorhaben behandelt wird.
  - Damit fehlen die Berücksichtigung des radioaktiven Zerfalls von Spaltprodukten sowie die entstehende Nachzerfallsleistung.
- Radiolytische lodchemie
  - Radiolytische I<sub>2</sub>-Freisetzung von chemisorbiertem Iod
- pH-Modell
  - Dieses Modell ist bei Framatome separat von COCOSYS entwickelt worden und in COCOSYS/AFP enthalten.

- Mit Blick auf neue Fragestellungen f
  ür das Langzeitverhalten von S
  ümpfen (z. B. in Fukushima) k
  önnen zuk
  ünftig 
  Änderungen auftreten, die bei einer Implementierung direkt ber
  ücksichtig werden sollten.
- Weitere Modelle
  - Pool-Scrubbing (SPARC)
    - Erfahrungsrückfluss aus IPRESCA. Hierbei ist noch offen, ob SPARC/B-98 übernommen werden sollte, oder ob neue korrelative Ansätze verfügbar werden.
    - Die Ruhr-Universität Bochum wird an der Entwicklung neuer Konzepte arbeiten. Schnittstellen für neue Modelle sollen im Nachfolgevorhaben bereitgestellt werden.
  - Transport durch Rekombinatoren
  - Venturi-Scrubber
  - Resuspension
    - Sowohl nasse als auch trockene Resuspension fehlen noch.
    - Insbesondere die nasse Resuspension ist stark an Spaltprodukte gekoppelt und bedarf der Implementierung von VENTINA.

Für NewAFP ist eine Dokumentation erstellt worden, die noch weiterer Verbesserungen bedarf. Da sich das Aerosolmodell im Vergleich zu AFP nicht unterscheidet, ist die diesbezügliche Beschreibung identisch zu der Beschreibung im COCOSYS-Manual. Die stark geänderte lodchemie des AIM-Modells ist in einer Vorabfassung als AIM-4-Theoriemodell vorhanden. Konzeptionell ist die Beschreibung der lodchemie so angelegt, dass sie separat von der COCOSYS-Eingabebeschreibung gehalten werden soll. Die Eingabeschreibung für NewAFP ist ergänzend dazu erstellt worden und sollte in zu-künftigen Versionen in das COCOSYS-Manual mit einfließen. Da in der kommenden AC<sup>2</sup>-Version AFP noch behalten werden soll, werden alle drei Dokumentationen zu NewAFP (NewAFP-Dokumentation, Eingabebeschreibung für NewAFP und AIM-4-Manual) getrennt von dem eigentlichen COCOSYS-Manual ausgeliefert.

#### 3.2 Verbesserung von Einzelmodellen

#### 3.2.1 Radiolytische lodchemie

Die radiolytische I<sub>2</sub>-Freisetzung von auf Farbe chemisorbiertem Iod und die aus abgelagerten Aerosolpartikeln (IO<sub>x</sub> und CsI) wurde anhand von Daten aus den OECD-Projekten BIP-3 und STEM-2 untersucht. Typischerweise wurden Experimente so durchgeführt, dass zuvor auf Proben abgelagerte Iodkomponenten in eine Strahlungsquelle eingebracht werden. Die Proben werden dabei von einer Atmosphäre von reiner Luft oder mit Wasserdampf überströmt. Das aus der Probe entwichene Iod wird dann in einer nachgelagerten Filterstrecke zeitabhängig bestimmt.

Bei der Freisetzung von chemisorbiertem Iod zeigten sich in verschiedenen Experimenten zeitabhängige Freisetzungen, die unterschiedliche Raten aufweisen. Es stellte sich heraus, dass die Unterscheidung in physisorbiertes und chemisorbiertes Iod in COCOSYS eine relative einfache Annahme einer unterschiedlich starken Bindung in zwei Kategorien darstellt. Andere Codes wie das Iodmodell in ASTEC verwenden noch mehr Kategorien (sogenannte "Töpfchen"), in denen die Iodspezies unterschiedlich stark gebunden sind. Allerdings lässt sich ein solches Vorgehen nicht chemisch/physikalisch abschließend begründen. Auch international ist es dabei bisher nicht gelungen, die Vielzahl der untersuchten Experimente mit einem einzigen Modell unter Verwendung eines Satzes von Modellparametern zu beschreiben.

Die Versuche aus den OECD-BIP und STEM Projekten haben jedoch gezeigt, dass die radiolytische I<sub>2</sub>-Freisetzung von auf Farboberflächen abgelagertem chemisorbiertem Iod einen wichtigen Beitrag zur I<sub>2</sub>-Konzentration in der Gasphase leistet. Diese Reaktion wurde in das NewAFP-Modul eingebaut.

Radiolytische Freisetzung von  $I_2$  unter  $\gamma$ -Bestrahlung:

$$I_{chs}(dep,p,g) + \gamma \xrightarrow{k_{66new}} 1/2 I_2$$
$$\frac{d[12]}{dt} = +k_{66new} [I_{chs}(dep,p,g)]^h \cdot D_G \cdot \frac{S}{V \cdot 1000} \cdot 0.5$$

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{I}_{\mathrm{chs}}(\mathrm{dep},\mathrm{p},\mathrm{g})]}{\mathrm{d}t} = -k_{66new}[\mathrm{I}_{\mathrm{chs}}(\mathrm{dep},\mathrm{p},\mathrm{g})]^h \cdot D_G$$

mit:

Ichs(dep,p,g) Auf Farboberflächen abgelagertes chemisorbiertes lod

$D_G$	Dosisleistung in der Gasphase
k <sub>66new</sub>	Reaktionsrate
h	empirischer Exponent
S	Wandoberfläche
V	Volumen der Gasraums

Bei der Freisetzung von gasförmigem Iod aus abgelagerten IO<sub>x</sub>-Partikeln zeigten sich in verschiedenen Experimenten unerklärliche Phänomene, wie z. B. eine verstärkte Freisetzung nach Abschalten der Strahlungsquelle. Es wurde versucht, das zeitliche Verhalten darüber abzubilden, und das abgelagerte Aerosol, also jeweils CsI als auch IO<sub>x</sub>, in eine radiolytisch aktive und eine nicht-aktive Komponente zu unterteilen. Damit wurde die zeitliche Freisetzung von flüchtigem Iod für verschiedene Experimente gut nachgerechnet, allerdings kann ein solches Vorgehen nicht chemisch/physikalisch abschließend begründet werden, weshalb diese Vorgehensweise nicht als Standardoption übernommen worden ist. Sie kann aber optional in NewAFP verwendet werden.

Generell muss die Freisetzung von lod sowie dessen Zersetzung durch Strahlung anhand der Erkenntnisse aus den verschiedenen BIP- und STEM-Projekten und auch aus dem OECD-Folgevorhaben ESTER weiter analysiert und in COCOSYS implementiert werden.

## 3.2.2 Sprühmodell für gasförmige Spezies

Die überarbeiteten geometrischen Objekte in NewAFP erlauben auch die Berücksichtigung der lodchemie in den Wassertröpfchen eines Sprühsystems. Über den Massentransfer an der Oberfläche der Sprühtröpfchen ist es daher möglich, neben dem Auswaschen von Aerosolen aus der Atmosphäre auch den Abbau von gasförmigen lodspezies in einem Sprühsystem zu berechnen. Das Experiment lod-31 in der THAI-Anlage wurde zur Modellbildung herangezogen und im COCOSYS-Validierungsvorhaben RS1579 nachgerechnet. Diese Ergebnisse zeigen die generelle Anwendbarkeit der neuen Modelle für die betrachtete Fragestellung.

In diesem Vorhaben sind die Zonen für die Sprühtröpfchen im Code implementiert worden und es sind Fehler in enger Zusammenarbeit mit Experten im Validierungsvorhaben (RS1579) behoben worden. Weitergehende Erfahrungen mit diesem Modell werden derzeit extern im AMICO-Projekt bei Framatome gesammelt. Dafür wurde in NewAFP die Möglichkeit geschaffen, den Massentransfer für die Gasphase und die Wasserphase unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Wasserphasen (Tröpfchen, Wasserfilm, Sumpf) zu definieren. Des Weiteren wurde ergänzt, dass den unterschiedlichen Wasserphasen verschiedene zeitabhängige pH-Werte via Inputeingabe zugeordnet werden können, denen für den Massentransfer und auch in bestimmten chemischen Reaktionen eine wichtige Rolle zukommt. Aus den vorgenannten Arbeiten werden Vorschläge für Parameteranpassungen erwartet, die speziell die Iodchemie und den Massentransfer in den Sprühtröpfchen berücksichtigen. Von besonderem Interesse sind dabei der pH-Wert im Tropfen sowie in den Sümpfen als auch Konkurrenzablagerungsprozesse z. B. an den Wänden im THAI-Behälter.

### 3.2.3 Verhalten von Aerosolen und chemischen Komponenten im Sumpf

In AFP kam es beim Verdampfen eines Sumpfes zu einer unphysikalischen Freisetzung von Spezies in die Atmosphäre, da die enthaltenen Stoffe woanders hin transportiert werden mussten, um die Massenbilanz zu erhalten. Testrechnungen zeigen, dass mit NewAFP ein solches Verhalten nicht auftritt. Diese Auswertungen werden auch im Regressionstesten zu NewAFP berücksichtigt. Für gasförmige Stoffe ist entscheidend, dass der Massentransfer unabhängig vom Volumen des Wassers korrekt berechnet wird. Die umgestalteten NewAFP-Zonen, die auch sehr kleine Zonen wie z. B. Sprühtröpfchen ermöglichen, gewährleisten dieses. Abgelagerte Aerosole werden dabei von Sumpfoberflächen auf trockene Atmosphärenoberflächen transferiert, wobei die korrekte Einordnung in den Speziesbaum berücksichtigt wird. Im Laufe der Testrechnungen konnte ein Fehler in diesem Modell behoben werden und die Spezies werden jetzt korrekt transferiert.

Anders als AFP ist NewAFP in der Lage, nichtlösliche Aerosole im Sumpf zu behandeln. Von Interesse sind dabei sowohl die Agglomeration von Partikeln im Sumpfwasser als auch die Geschwindigkeit der Sedimentation sowie das Aufschwimmen an der Wasseroberfläche. Bislang existieren keine Experimente, die dieses Thema explizit behandeln. Allerdings ist für das geplante Projekt *THAI Phase VII* bei Becker Technologies ein solcher Versuch unter dem Thema *Sedimentation unlöslicher Aerosole im Sumpf* vorgesehen. Dieser würde wichtige Daten über in Wasser getragene Aerosolpartikel hervorbringen.

#### 3.2.4 Simulation von Aerosolabwaschvorgängen an Strukturen

In Zusammenarbeit mit KIT ist das im ESSA-Projekt von KIT (FKZ 1501537) entwickelte Abwaschmodell CONRAG (**CON**densate cove**RAG**e) /WAN 19/, /WAN 20b/, /WAN 21/ in COCOSYS eingebaut worden. Es berechnet die Benetzung einer Struktur und die Dicke des sich einstellenden Wasserfilms aus kondensierendem Dampf an den Strukturen sowie von oben herablaufendem Wasser. Dieses Modell ist eng verknüpft mit dem **A**bwaschmodell für **un**lösliche **A**erosole (AULA) in NewAFP. Einerseits liefert NewAFP die Beladung der Oberfläche mit Aerosol als Randbedingung für CONRAG. Andererseits berechnet CONRAG die Geschwindigkeit und Dicke des herablaufenden Kondensatfilmes sowie die Anteile der benetzten Fläche an der Gesamtstruktur. Berücksichtigt werden dabei Geometrieinformationen wie der Winkel der betrachteten Struktur als auch Partikelmaterialeigenschaften wie die Porosität des abgelagerten Aerosols. Diese Informationen werden in AULA genutzt, um die Menge der abgewaschenen nichtlöslichen Aerosole zu berechnen.

Der Bearbeiter des KIT war für 2 Wochen in der GRS zur Einführung in COCOSYS und zur Koordination der Arbeiten. Der Quellcode konnte durch KIT weiterentwickelt werden und ist nach Abschluss der Arbeiten bei KIT durch die GRS in den Entwicklungszweig des Thermohydraulik-Moduls THY integriert worden. Die in THY berechneten Randbedingungen werden im Abwaschmodell von NewAFP korrekt berücksichtigt. Erste Rechnungen des KIT /WAN 21/ zeigen das Potenzial des Modells zur Verbesserung der Abwaschmodellierung von Aerosolen.

Weiter bieten die Abschätzungen der benetzten Wandanteile die Möglichkeit, Wärmeübergänge abhängig von benetzten und trockenen Teilen zu berechnen, was derzeit in COCOSYS noch nicht behandelt wird. Zusätzlich zu diesem Rivulet<sup>1</sup>-Modell unter Kondensationsbedingungen besteht ein ebenfalls am KIT entwickeltes Rivulet-Modell unter Verdampfungsbedingungen, wie sie bei der Kühlung des Containments über die äußere Stahlschale z. B. in Anlagen des Typs AP600/1000 bzw. die auf diesem Konzept aufbauende Design-Variante (PCCS-System im CAP1400) auftreten (siehe Abschnitt 4.1). Diese beiden Modellvarianten sind derzeit nicht miteinander gekoppelt. Sowohl die Vereinheitlichung beider Modelle als auch die Nutzung zur verbesserten Berechnung des Wärmetransports sind Teil des geplanten Projektes VEKOCO (Modellierung des

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Dt.: Bach, Rinnsal, Flüsschen

Wärmeübergangs bei **Ve**rdampfung und **Ko**ndensation in **CO**COSYS), das ein Nachfolgevorhaben des ESSA-Projekts am KIT werden soll. Diese externe Modellentwicklung wird durch die GRS unterstützt.

# 3.2.5 Pool-Scrubbing und nasse Resuspension

Im Rahmen des IPRESCA-Projekts ist der Wissensstand zu dieser Thematik international vereinheitlicht worden. An zwei Benchmark-Aktivitäten hat die GRS mit dem in AFP verwendeten Modell SPARC-B/98 teilgenommen. Insgesamt konnte aus diesen Aktivitäten bislang keine ausreichende Basis für eine Neuentwicklung eines Modells zum Pool-Scrubbing abgeleitet werden, weder für gezielte Verbesserungen in SPARC noch direkt in NewAFP.

Bei der ersten Benchmark-Aktivität ging es um die Hydrodynamik beim Durchgang durch eine Wasservorlage. Dazu ist ein Experiment am italienischen Institut RSE in der SCRUPOS-Anlage (SCRUbbing by POol and Spray) /DEL 17/ mit einer aufrechten Düse in einem 1 m tiefen Becken nachgerechnet worden. Die Einspeisung von reiner Luft erfolgt mit 5,7 kg/h über die Düse mit einem Durchmesser von 1 cm bei Zimmertemperatur, womit die Einspeisegeschwindigkeit 16,8 m/s beträgt. Eine schematische Zeichnung des Behälters ist in Abb. 3.2 dargestellt.



Abb. 3.2 Schematische Zeichnung des SCRUPOS-Experiments

Die Aufgabe in dieser Benchmark-Aktivität war es, die hydrodynamischen Modelle der beteiligten internationalen Codes zu vergleichen und unsichere Parameter in den verschiedenen Zonen zu identifizieren. Unterschieden werden dabei drei Zonen: Die erste ist die Einspeisezone unter Bildung eines Jets (orange), der in dem betrachteten Experiment sehr kurz war, weswegen dieser auch in den vergrößerten Ausschnitten nur als schmaler Strich eingezeichnet ist. Am Ende des Jets bildet sich die Primärblase (grün). Nach dem Aufbrechen der Primärblase steigen die Blasen in der Blasenaufstiegszone auf an die Wasseroberfläche. Diese sind in der Grafik als weiße Punkte dargestellt.

Die GRS-Ergebnisse sind am 27. Juni 2019 beim IPRESCA-Meeting in Frankfurt am Main präsentiert worden. Die Beiträge sind von IRSN gesammelt worden, um ein gemeinsames Paper für die NUTHOS-13 einzureichen, die wegen Covid-19 von ursprünglich August 2020 auf September 2022 verschoben wurde.

Allgemeine Ergebnisse des Code-Vergleichs in Bezug auf hydrodynamische Phänomene waren übergreifend über alle teilnehmenden Codes /MAR 22/:

- Die meisten Codes sagen das Strömungsregime am Ende der Einspeisedüse korrekt voraus.
- Die Größe der Primärblase an der Einspeisedüse wird korrekt vorausgesagt.
- Die Form der Blasen in der Aufstiegszone wird korrekt vorhergesagt.
- Probleme gibt es bei der Berechnung der Form der Strömung.
- Die Übergangszone zwischen der Einspeisezone und der Blasenaufstiegszone wird kaum beschrieben.
- Die Aufstiegsgeschwindigkeit der Blasen wird nicht richtig berechnet.

Die Auswirkung auf den Rückhaltefaktor ist noch unklar, allerdings stellen hydrodynamische Effekte teilweise Grundlagen für mechanistische Modellvorstellungen dar. Auch an der zweiten Benchmark-Aktivität hat die GRS teilgenommen. Dabei ging es um die Rückhaltung von gasförmigem Iod, also I<sub>2</sub> und Organoiod RI, beim Massentransfer. In der aktuellen AFP-Version ist dieser Teil von SPARC nicht aktiv, sondern der Benutzer kann die Rückhaltung dieser Spezies durch feste Dekontaminationsfaktoren vorgeben, um die Rückhaltung gasförmiger Spezies aufgrund eigener ingenieurmäßiger Abschätzung berechnen zu können. Daher ist für die Teilnahme die Berechnung im Code auf einem eigenen Entwicklungszweig aktiviert worden. Die verwendeten Modelle werden in /OWC 91/ beschrieben und werden über Gleichgewichtsbetrachtungen des Massentransfers an der Gas-Flüssigkeit-Schnittstelle der aufsteigenden Blasen berechnet.

$$[TI_2(aq)] = H(I_2) \cdot [I_2(gas)]$$

mit:

- [*T*l<sub>2</sub>(aq)] Gesamte flüssige molare Konzentration von lod an der Phasengrenze als l<sub>2</sub>.
- [I<sub>2</sub>(gas)] Molare I<sub>2</sub>-Konzentration in den Gasblasen
- $H(I_2)$  lod Partitionskoeffizient.

Analoges gilt für organische lodverbindungen RI

Um den Anschluss an die vorhergehenden Arbeiten zu gewährleisten, ist wieder das im ersten Benchmark verwendete Rechenmodell benutzt worden, obwohl in dem Experiment keine gasförmigen lodspezies untersucht worden sind. Es handelt sich somit um ein hypothetisches Szenario und nicht um eine echte Experimentnachrechnung.

Die beiden relevanten Spezies sind molekulares lod I<sub>2</sub> und Organoiod RI. In der Berechnung der Spezies werden große Unterschiede bezüglich der Rückhaltung im Pool der SCRUPOS-Anlage beobachtet. Unter Verwendung der originalen hydrodynamischen Randbedingungen und einer unterstellten I<sub>2</sub>- bzw. RI-Konzentration von 10<sup>-5</sup> mol/l ergeben sich in Abhängigkeit der Wasserhöhe die in Abb. 3.3 gezeigten Dekontaminationsfaktoren. Während sich für I<sub>2</sub> bis an die Austrittshöhe bei 1 m ein Dekontaminationsfaktor von 460 einstellt, beträgt er für RI an dieser Position lediglich 1,77.

Diese hohen Rückhaltungen treten aber nur bei reinem Wasser auf. Sehr schnell lösen sich die Gase in der Wasserphase und ein Gleichgewicht zwischen der Konzentration in den Gasblasen und in der Wasservorlage wird erreicht. In Abb. 3.4 wird gezeigt, dass die Effizienz der Rückhaltung unter den Bedingungen der Basisrechnung bereits nach wenigen Sekunden so weit reduziert ist, dass praktisch nichts mehr zurückgehalten wird. Als Vergleich ist auch die Effizienz für Aerosole dargestellt, die über den gesamten Zeitraum in der Wasservorlage ausgewaschen werden. Nicht nur der Abscheidemechanismus, sondern auch die Effizienz bei Auswaschvorgängen ist zwischen gasförmigen Spezies und Aerosolen völlig unterschiedlich.



Abb. 3.3 Dekontaminationsfaktor für I<sub>2</sub> und RI in Abhängigkeit der Poolhöhe



Abb. 3.4Dekontaminationseffizienz für gasförmige Spezies I2 und RI als Funktion<br/>der Zeit im Vergleich zu Aerosolen

Während der Analysen zeigte sich weiter, dass die Effekte bei der Rückhaltung der Gasspezies in der Wasservorlage von denen des Massenaustauschs zwischen Atmosphäre und Pool über die Pooloberfläche in Abhängigkeit der Konzentration oberhalb des Pools überlagert werden. Kurz nach dem Start der Einspeisung befindet sich noch kein Iod in der Atmosphäre oberhalb des Pools, weswegen die Rückhaltung ohne gleichzeitigen Massenaustausch an der Pooloberfläche stattfindet. Nach längerer Zeit nimmt die Rückhaltung im Wasser ab, womit die Konzentration oberhalb des Pools zunimmt und der Massenaustausch zwischen Atmosphäre und Pool an der großen Oberfläche eine zunehmende Rolle spielt. Daher sind alle Rechnungen zweimal durchgeführt worden, einmal ohne einen Massenaustausch an der Pooloberfläche und einmal mit aktiviertem Massenaustausch (Massentransfer) an der Pooloberfläche, in der folgenden Abb. 3.5 mit MT gekennzeichnet. In den Kurven ohne Massentransfer erreicht die Konzentration in der Atmosphäre oberhalb der Wasseroberfläche, also nach Austritt aus dem Pool, innerhalb der betrachteten 1.000 s den Wert der eingespeisten Konzentration. Da wie oben gesagt, die Rückhaltung schnell abnimmt, reichert sich nur wenig I<sub>2</sub> in dem Pool an. Dementgegen findet in der Rechnung mit Massentransfer an der Pooloberfläche immer ein Austausch über diese große Pooloberfläche statt, sodass in dem Wasser eine Konzentration von 0,4·10<sup>-5</sup> mol/l nach 1.000 s erreicht wird.



Abb. 3.5 Vergleich der I<sub>2</sub>-Konzentration im Sumpf und in den Gasbläschen ohne und mit berücksichtigtem Massentransfer (MT) an der Pooloberfläche

In Variationsrechnungen sind verschiedene Einflussfaktoren auf das Auswaschen untersucht worden, um die entscheidenden Einflussgrößen zu identifizieren. In den durchgeführten Arbeiten sind die Volumenstromrate der Quelle, die Konzentration in dem Trägergas, die Temperatur und der Wasserdampfanteil variiert worden. Aufgrund der oben beschriebenen Randbedingung, dass die Effizienz sehr schnell sinkt, sind die meisten Variationsrechnungen mit geringeren Konzentrationen durchgeführt worden, um das Lösen der gasförmigen Spezies zu verlangsamen. Die Ergebnisse sind von der Japan Atomic Energy Agency (JAEA) gesammelt worden. Zusammenfassende Ergebnisse der Partner gibt es noch nicht. Zur Anwendung von SPARC-B/98 ist festzuhalten:

- I<sub>2</sub> wird deutlich stärker ausgewaschen als RI, da der Massentransfer entsprechend größer ist als für organisches Iod.
- Der Prozess der Abscheidung gasförmiger Spezies wird durch den Massentransfer an der Blasenoberfläche bestimmt und ist damit deutlich anders als das Auswaschen von Aerosolen.
- Unter verschiedenen Bedingungen dominiert der Massentransfer an der Pooloberfläche, sodass die Rückhaltung beim Pool-Scrubbing keinen großen Einfluss auf die Bilanz gasförmiger lodspezies hat.
- Damit scheint die Relevanz einer genauen Modellierung der Iod-Rückhaltung (Iod-Scrubbing) im Vergleich zur Aerosolabscheidung deutlich geringer.

## 3.2.6 Filtermodell – Aufheizung und Temperaturen im Filter

In COCOSYS sind verschiedene Filtermodelle vorhanden, mit denen die Rückhaltung von Spezies aus der durchströmenden Atmosphäre berechnet werden kann und die somit eine Verringerung der luftgetragenen Konzentrationen simulieren. Im Falle von Unfällen in Kernkraftwerken sind diese Spezies Träger von radioaktiven Stoffen. Die freigesetzte Nachzerfallsleistung wird in COCOSYS im Falle einer Kopplung mit einer Spaltproduktrechnung auf den verschiedenen Spaltproduktträgern (Hosts) freigesetzt. Für in Filtern abgelagerte Stoffe war diese bisher nicht implementiert und die freiwerdende Wärme wurde nicht im THY-Modul berücksichtigt. Eine Aufheizung von Filterstrecken kann bisher also nicht berechnet werden. Solange ein Filter durchströmt wird, ist mit einer Wärmeabfuhr an die Umgebung zu rechnen. Problematisch wird es, wenn die Filterstrecke wieder mit Ventilen verschlossen wird. In dem Fall wird die Wärme nicht mehr aus dem Inneren der Filter abtransportiert und kann zu einer Beschädigung der Filter durch den Temperaturanstieg führen. Solche Rechnungen sind in der Bewertung von Containment-Filterstrecken wie von Schwarz und Sonnenkalb /SCH 15/ bisher nicht für Filtersysteme durchgeführt worden.

### 3.2.6.1 Experimenteller Hintergrund

Der Wärmeeintrag in Filtern wurde bereits bei der Implementierung des Faserfiltermodells für die ACE-Experimente AA19 und AA20 diskutiert /WEB 13/. Allerdings musste damals die angenommene Nachzerfallsleistung als Wärme in die Filterstrukturen eingespeist werden. Eine schematische Skizze der damaligen Experiment-Nachrechnungen ist in Abb. 3.6 dargestellt.



## Abb. 3.6 ACE AA19 und AA20 Nodalisierung aus /WEB 13/

In der Nachrechnung ist ein Drei-Zonen-Datensatz verwendet worden. Die Einspeisung von Aerosol und dem Trägermedium aus Dampf und Stickstoff erfolgt in den Aerosol-Mixing-Vessel (RAMV), die Filterbox wird mit der Zone RFBOX berücksichtigt und die Abgabe des ausströmenden Mediums erfolgt in die Umgebungszone ENVIRON. Die Originalgrafik aus /WEB 13/ ist durch einen grünen Kasten ergänzt worden, der die Simulation des Filters inklusive seines Gehäuses darstellt. In COCOSYS ist ein Filtersystem an Strömungsverbindungen (Junctions) bzw. an Gebläse (Fan-Systeme) gekoppelt. Ein Filtersystem besteht dabei aus hintereinander angeordneten Filterstufen. In der Grafik ist ein Filtersystem in die Verbindung VFILT eingefügt. Dieses besteht aus einem Wasserabscheider (Demister DM), 6 Vorfilterschichten (FV1 – FV6) und 6 Feinfilterschichten (FF1 – FF6). Die Filterstrecke endet in der Filterbox (RFBOX), wobei in der Realität diese Filterbox das Filtersystem enthält. In der Filterbox gibt es zwei Strukturen. Die Vliese (VLIESE) sollen das Filtermaterial selbst abbilden und die umgebende Struktur, die die Filterbox thermisch mit der Umgebung koppelt, wird als F\_BOX abgebildet. Eine weitere Verbindung leitet die gefilterte Atmosphäre aus der Filterbox RFBOX in die Umgebung.

#### 3.2.6.2 Modellkonzept

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist, die Ablagerungen in den Filtern mit den Strukturen in der Filterbox zu verbinden, sodass die Nachzerfallsleistung der in den Filtern abgeschiedenen Spezies einer Filterstruktur zugerechnet wird. Aufgrund der komplizierten geometrischen Struktur verschiedener Filtermaterialien kann eine solche Berechnung nicht einfach aus den Filterdaten erfolgen. Daher wurde die Strategie verfolgt, die Filter mit einer vom Benutzer vorgegebenen Struktur zu koppeln, für die die Spaltproduktablagerungen aus den Filtern angenommen werden. Die Filter können somit frei mit Zonen verbunden werden, wodurch Strahlungsterme und Drainagen vom Benutzer frei gewählt werden können.

Umgesetzt wird dieses Konzept, indem der Benutzer im COCOSYS-Eingabedatensatz bei den Filtereingaben unter C---- JUNCTIONS einen Strukturnamen FSTRU und eine Seitennummer FSTRUS (1 oder 2 für die linke bzw. rechte Seite) angeben muss. Die Eingabe ist optional, wobei im Filter anfallende Nachzerfallsleistung im THY nur berücksichtigt wird, wenn eine Filterstruktur angegeben ist. Ein Überblick über die in der Eingabe benötigten Ergänzungen ist im Folgenden gegeben, allerdings ist hier nur eine Beschreibung für die beiden neu hinzugefügten Parameter FSTRU und FSTRUS gegeben.

```
C---- JUNCTIONS

...

K---- VNAME

...

if filters are inside

----- FILTER

FDIR

[FSTRU FSTRUS]

at least a maximum of 5 filters

FNAME1 FTYPE1 FTAREA1 FTEMP1

...

FNAMEn FTYPEN FTAREAN FTEMPN
```

#### Erläuterung

#### FSTRU

Verbunde Filterstruktur (c).

Die Nachzerfallsleistung der im Filter abgelagerten Spezies wird dieser Struktur zugerechnet.

#### FSTRUS

Filterstruktur Seiten Nummer (i).

1: Linke Seite

2: Rechte Seite

Zusätzlich zur Verteilung der Nachzerfallsleistung auf die Filterstrukturen wird die charakteristische Fläche ZACONV zur Berechnung der Zonengeschwindigkeit ZVELO der über die angegebene Struktur und Seite verbundenen Zone auf den Wert der Filterstruktur gesetzt. Das ist notwendig, um einen konsistenten konvektiven Wärmeübergang zwischen der Filterstruktur und der Strömung durch den Filter zu berechnen.

### 3.2.6.3 Testrechnung

Aufbauend auf den ACE-Rechnungen von Weber /WEB 13/ ist ein Testbeispiel für die Verwendung von NewAFP erstellt worden. Dasselbe ist auch für AFP implementiert worden ist. Dabei wird Caesium- und Mangan-Aerosol in dem Rechnungszeitraum von 130 – 1800 s mit Raten von 6,6·10<sup>-4</sup> bzw. 5,0·10<sup>-4</sup> kg/s eingespeist. Insgesamt also 1,1 kg Caesium (Cs) und 0,835 kg Mangan (Mn). Zusätzlich wird über die Option DCAY\_FANP eine Tabelle für die Nachzerfallsleistung extern vorgegeben. Diese wird so aufgesetzt, dass die mit Cs und Mn eingespeiste Leistung insgesamt 0,35 kW entspricht. Dieser Wert wird in /WEB 13/ angegeben und entspricht der in einem Störfall zu erwartenden Leistung von Aerosolen und Iod, skaliert auf die kleineren Dimensionen der ACE-Tests. Um eine mögliche Filteraufheizung durch die in den Filtern abgelagerten Aerosole zu simulieren, wird auch eine Zeitspanne simuliert, während der die Filterstrecke nicht durchströmt wird. Dazu wird die Filterstrecke VFILT von 100 – 150 min durch ein Ventil abgesperrt. Die Rechnung endet nach 200 min.

Im Folgenden werden einige Ergebnisse dieser Testrechnung mit Filterstruktur mit einer ohne Nutzung einer solchen Struktur verglichen, um die Eigenschaften der neu entwickelten Modellierung zu zeigen. Als erstes ist die Aerosolmasse der Komponenten Cs (Kreuze) und Mn (Kreise) in Abb. 3.7 dargestellt. Dabei ist die Rechnung mit Filterstruktur in Rot eingezeichnet und die ohne in Grün. Die gesamte eingespeiste Menge ist als durchgehende Linie eingezeichnet und wird mit der in die Umgebung freigesetzten Masse in den gestrichelten Kurven verglichen.

Die freigesetzte Masse ist für Cs um einen Faktor 10<sup>8</sup> kleiner und für Mn um einen Faktor 10<sup>7</sup> kleiner als die eingespeiste Masse. Die Unterschiede erklären sich durch die
unterschiedlichen Größenklassen der eingespeisten Aerosolkomponenten. Die Berücksichtigung der Nachzerfallsleistung auf der Filterstruktur hat keinen Einfluss auf die Filtereigenschaften des Aerosols.

Die verbundene Filterstruktur ist das Filtergehäuse. Allerdings wird über langreichweitige γ-Strahlung ein Anteil auch auf die Wasser- und Gasphase sowie die VLIESE-Struktur übertragen. Die eingetragene Leistung in die Strukturen ist in Abb. 3.8 über der Zeit aufgetragen.

Die Struktur für das Filtergehäuse erhält nach dem Ende der Einspeisung eine konstante Leistung. Der Anteil, der in den Vliesen zurückgehalten wird, ist zunächst auch konstant, bis nach 160 min ein Sprung auftritt. Zu diesem Zeitpunkt ist die Wasservorlage in der Zone RFBOX komplett verdampft. Der Teil der Nachzerfallsleistung, der an der Wasseroberfläche und im Wasser absorbiert worden ist, wird entsprechend der allgemein gültigen Regeln in COCOSYS auf die verbleibenden Hosts aufgeteilt, weshalb die VLIESE auch einen größeren Anteil der  $\gamma$ -Strahlung erhalten.

Die berechnete Zonengeschwindigkeit (Kreuz) in RFBOX sowie die Durchflussgeschwindigkeit in der Verbindung VFILT werden in Abb. 3.9 verglichen zwischen der Rechnung mit Filterstruktur (rot) und ohne (grün).



Abb. 3.7 Aerosolbilanz in Testrechnung



Abb. 3.8 Nachzerfallsleistung in Testrechnung



Abb. 3.9 Geschwindigkeiten in Testrechnung



Abb. 3.10 Temperaturen in Testrechnung

Während die beiden Größen in der Rechnung ohne Filterstruktur um eine Größenordnung unterschiedlich sind, liegen beide bei etwa 4 m/s in der Rechnung mit vorhandener Filterstruktur. Dieser Unterschied ist darauf zurückzuführen, dass die charakteristische Fläche ZACONV der mit der Filterstruktur verbundenen Zone auf den Wert der Strukturfläche gesetzt wird, um eine konsistente Berechnung der Zonengeschwindigkeit mit der Geschwindigkeit durch den Filter zu erzielen. Zwischen 100 und 150 min erfolgt keine Strömung durch den Filter, weshalb die betrachteten Geschwindigkeiten alle Null sind.

Die Folgen der berücksichtigten Nachzerfallsleistung der Spezies in den Filtern sind in Abb. 3.10 dargestellt. Die Kurven mit dem Kreis zeigen die Gastemperatur in der Filterzone RFBOX und die Vierecke die Oberflächentemperatur der dort verbundenen Filterstruktur. Rot dargestellt ist wieder die Rechnung mit Filterstruktur und grün die ohne als Vergleich.

Die mit der Umgebung verbundene Filterstruktur ist deutlich kälter als das Innere des Filters. In der Rechnung mit Filterstruktur heizt sich diese bis 100 min um etwa 5 K auf im Vergleich zu der Rechnung ohne Berücksichtigung der Nachzerfallsleistung. Die Zone der Filterbox RFBOX ist sogar um einige Grade kälter, da die erhöhte Zonengeschwindigkeit zu einem besseren Wärmetransport zwischen der Struktur und dem Inneren des Filtergehäuses führt. Nach dem Schließen des Ventils bei 100 min nimmt die Temperatur in RFBOX stark ab, da kein heißes Gas aus RFBOX ausströmt. In der Zeit bis 150 min liegt die Temperatur sowohl auf der Filterstruktur als auch in der Filterbox-Atmosphäre nur etwa 5 K höher als in der Rechnung mit vernachlässigter Nachzerfalls-leistung der im Filter abgelagerten Spezies.

#### 3.2.6.4 Diskussion

Die durchgeführten Arbeiten erlauben eine detailliertere Berechnung der Wärmeentwicklung in Filtersystemen. Diese Erweiterungen können nun in Bewertungen von Filterstrecken einfließen und Arbeiten wie die zu Venturi-Scrubbern /SCH 15/ um die Wärmeentwicklung in Metallfaserfiltern ergänzen. Allerdings erfordert die Modellierung die Eingabe von spezifischen Materialeigenschaften der Filter-Vliese und des umgebenden Gehäuses. Die Anwendbarkeit des Modells sollte in Validierungsrechnungen überprüft werden. Zu klärende Punkte sind:

- Plausibilität der berechneten Zonengeschwindigkeit
  - Damit errechneter Wärmeübergang und Austrag an die Umgebung

- Abbildung sequenzieller Filter mit verschiedenen Zonen
  - Eventuell mit Implementierung einer 2D-Wärmeleitung zwischen den Gehäuseteilen verschiedener Filtermodule
- Mögliche Aufteilung der Strahlung auf Strukturen nach kurz- (α, β) und langreichweitiger (γ) Strahlung
- Abfuhr von anfallendem Kondensat über Drainagen

Derzeit ist das Isotopenpaket VENTINA noch nicht in NewAFP implementiert, weshalb innerhalb dieses Projekts nur die Modellierung der Nachzerfallsleistung über tabellarische Werte erfolgt. Das Modell ist allerdings auch in AFP implementiert, womit eine Kopplung mit FIPISO möglich ist.

# 4 Modellentwicklung zu thermohydraulischen Modellen

Die COCOSYS-Modelle zur Thermohydraulik im Containment sind Basismodelle in COCOSYS und weitgehend validiert. Die hier durchgeführten Arbeiten betreffen verschiedene Einzelphänomene:

- Abfuhr der Wärmeenergie von heißen Strukturen durch Wasserfilme
- Effekte möglicher Gegenstrombedingungen für Gase in engen Strömungsverbindungen
- Rückwirkungen von möglichen Strukturausdehnungen auf die Thermohydraulik
- Modellverbesserungen für das Fluten von Raumbereichen

#### 4.1 Einsatz des Wasserfilm-Modells bei der Containment-Außenkühlung

#### 4.1.1 Hintergrund

In vielen fortschrittlichen Reaktorkonzepten ist im Design als ultimative Wärmesenke die passive Wärmeabfuhr über die Außenwand des Containments vorgesehen. Beispiele sind der AP1000 von Westinghouse oder die auf dieser Technik basierende chinesische Designerweiterung mit größerer Leistung (CAP1400). Dabei wird die Außenseite der Stahlschale des Sicherheitseinschlusses durch einen herablaufenden Wasserfilm im Gegenstrom zu einem sich durch den Kamineffekt aufbauenden Luftstrom gekühlt (bekannt als PCCS – Passive Containment Cooling System). Ohne aktive Sicherheitssysteme oder Personalhandlung soll somit über mindestens 72 h die Restwärme sicher abgeführt werden. In COCOSYS-Simulationen für diese Anlagen stellten sich als wesentliche Einflussgrößen für die Wärmeabfuhr über die Stahlschale die benetzte Oberfläche sowie der Wärmeübergang an der Schnittstelle Stahl/Wasserfilm heraus. Zur Berechnung der benetzten Fläche unter diesen Bedingungen wurde bei KIT Karlsruhe ein Rivulet-Modell entwickelt /HUA 15a/ und in COCOSYS implementiert. Dieses Modell ist bisher seitens GRS noch nicht für Anlagen- oder Versuchsnachrechnungen angewendet worden und ist auch noch völlig unabhängig vom Rivulet-Modell für die Innenseite des Containments und für kondensierende Bedingungen (siehe 3.2.4).

Die Simulation des PCCS erfolgt durch die GRS bisher unter Verwendung des generellen Wasserfilm-Ansatzes in COCOSYS (d. h. ohne die von KIT erstellte Option zu Rivulets) und unter Verwendung des CO1-Wärmeübergangsmodells. Im Gegensatz

zum Kondensat im Containment ist der Wasserfilm bei Containment-Außenkühlung kälter als die Strukturoberfläche, auf dem er entlangläuft. Bei der Anwendung des CO1-Modells auf das PCCS im chinesischen CAP1400-Konzept zeigte sich, dass unter siedenden Bedingungen des Wasserfilms bei luftarmer oder -freier Atmosphäre und beginnendem Trockenfallen der Oberfläche unrealistisch hohe Wassertemperaturen berechnet werden. Diese Bedingungen traten im PCCS bei der zusätzlichen Fehlerannahme der Verstopfung des Lufteintritts des Annulus auf. Zudem zeigten sich numerische Instabilitäten bis hin Programmabbruch, sodass hier zum Entwicklungsbedarf besteht.

# 4.1.2 Anwendung des bei KIT entwickelten Rivulet-Modells für die Containment-Außenkühlung

Für das von KIT für COCOSYS entwickelte Rivulet-Modell /HUA 15a/ liegen drei einfache von KIT erstellte Testbeispiele vor, anhand derer die Ablauffähigkeit des Modells mit neuen COCOSYS-Versionen überprüft wurde. Diese Tests sind aber nicht in das offizielle Qualitätsmanagement von COCOSYS integriert, u. a. auch weil die dafür verwendeten Geometriemodelle in Bezug auf eine Unterteilung in COCOSYS-Zonen und -Strukturen nicht den aktuellen Nodalisierungsempfehlungen der GRS entsprechen. Die in /HUA 15a/ bzw. in /HUA 15b/ verwendeten AP1000-Datensätze stehen der GRS aufgrund von Eigentumsrechten der Westinghouse Electric Company nicht zur Verfügung.

Um eigene Erfahrungen mit dem Rivulet-Modell zu gewinnen und dadurch auch die Weiterentwicklung des Modells im Rahmen des geplanten KIT-Projektes VEKOCO zu unterstützen (insbesondere auch die Harmonisierung und Verknüpfung mit dem Modell für Kondensat-Rivulets), wurde das Modell jetzt in einem Datensatz zur Simulation des Wärmeübergangs bei der Containment-Außenkühlung für die WAFT-Anlage angewendet. Dabei kam die aktuelle COCOSYS-Entwicklerversion zum Einsatz, die als Bestandteil von AC<sup>2</sup>-2021 freigegeben werden soll.

Die Versuchsanlage WAFT (Water Film Test) der SJTU (Shanghai-Jiao-Tong-Universität) bildet ein 5 m hohes und 1,2 m breites beheiztes Segment der Containment-Stahlschale einer CAP1400-Anlage ab, wobei die Krümmung der Containmentschale mit 43 m Durchmesser vernachlässigt ist. Anhand von WAFT werden durch SJTU die Funktion des PCCS simuliert sowie Korrelationen und Modellansätze zur besseren Beschreibung der Vorgänge entwickelt /DU 20/, /ZHA 12/. Im Rahmen der Nachrechnung eines Verdampfungsversuches (ablaufender kalter Wasserfilm verdampft auf der beheizten und in diesem Versuch senkrecht eingestellten Platte) wurde von der GRS ein Datensatz entwickelt, der u. a. die Stahlplatte durch 11 übereinander angeordnete Strukturen modelliert (vgl. Abb. 4.1). Damit sind Aussagen, die anhand dieses WAFT-Datensatzes bzgl. des Rivulet-Modells getroffen werden, prinzipiell auch auf entsprechende Anlagendatensätze übertragbar.

In ersten PCCS-Simulationen für AP1000/CAP1400 hat die GRS das Ablaufen des Wassers entlang der Containment-Außenwand über DRAIN\_WALL-Verbindungen simuliert, so wie es dann auch durch KIT in /HUA 15a/, /HUA 15b/ zur Anwendung kam. Nachteil dieser Modellierung ist, dass dabei das Wasser immer mit dem Inventar des Sumpfes der jeweils angekoppelten Zone vermischt wird, bevor es zur nächsten darunter liegenden Struktur weiterläuft. Durch eine Modellerweiterung in COCOSYS (die FLOWPATH-Option /ARN 19/) ist mittlerweile ein direktes Ablaufen entlang von Strukturen möglich. Diese Modellierung ist für den aktuellen GRS-Datensatz für WAFT in Abb. 4.1 dargestellt.



Abb. 4.1 COCOSYS-Modell der Stahlplatte der WAFT Anlage, Strukturen S10 bis S0 und der Auffangrinne WDBS sowie die Modellierung der Wasserbespeisung zur Simulation des PCCS Im Folgenden wurde ein für Nachrechnungen zum WAFT-Experiment 3-S /POH 18/ erstellter COCOSYS-Datensatz verwendet. Da im Experiment 3-S ein konstanter PCCS-Wassermassenstrom von 0,18 kg/s vorlag, bildete sich ein geschlossener Wasserfilm aus, der keine Bewertung des Rivulet-Modells in COCOSYS ermöglicht. Deshalb wird nach Erreichen stationärer Bedingungen wie im Experiment (300 s) in der Rechnung der Massenstrom bis 1 000 s linear auf null verringert, sodass ein völliges Austrocknen des Films auftritt – beginnend ab 800 s mit der unteren Struktur S0 bis nach 1 000 s die gesamte Platte trocken ist. Diese Rechnung (noch ohne Rivulet-Modell) zeigte das erwartete Ergebnis, d. h. die Verringerung der Filmdicke und ab 800 s die signifikante Reduzierung der von der Platte abgeführten Energie.

Anschließend wurde das Rivulet-Modell durch Definition von entsprechenden Moduldaten aktiviert (K---- RIVULET unter C---- MODULES) und eine Rechnung durchgeführt. Die Verwendung der neuen FLOWPATH-Option führte nicht zu Fehlern/Warnungen im Rivulet Modell. Allerdings konnte diese Rechnung aufgrund von sehr kleinen Zeitschritten bei ca. 142 s nicht praktikabel zu Ende geführt werden. Als Ursache des Problems wird die Berechnung der Filmtemperatur der untersten Struktur WDBS ausgegeben (siehe Abb. 4.1). WDBS ist für die Simulation der Wärmeabfuhr nicht unbedingt erforderlich und dient nur zur Ableitung des nicht verdampften Wassers von der Platte. Wird die Struktur WDBS aus dem Datensatz entfernt, so tritt keine Warnung mehr auf, aber es werden trotzdem sehr kleine Zeitschritte gewählt, die eine praktikable Fortführung der Rechnung nicht zulassen. Aus der Fehlerursachenuntersuchung (Debugging) dieses Rechnungslaufes konnten wegen vorliegender mehrfacher Divisionen durch Null bzw. dem Auftreten undefinierter Werte (NaN) in der iterativen Lösung im Rivulet-Modell keine hilfreichen Informationen abgeleitet wedren. Wie danach zu erwarten war, sind die berechneten Ergebnisse nicht stabil und erscheinen vor allem nicht plausibel. So ist nach 100 s bei einer Bedeckung von 100 % (Abb. 4.2) der ermittelte Wasserfilm nahezu 10mal so dick wie ohne Rivulet-Modell (Abb. 4.3). Aus /KAS 20/ kann abgeschätzt werden, dass die gemessene Wasserfilmdicke mit 0,18 kg/s PCCS Massenstrom bei 0,3 -0,4 mm liegt, also nahe dem von COCOSYS berechneten Wert ohne Rivulet-Modell. Auch der berechnete abgeführte Wärmestrom zeigt starke Schwingungen und ist wesentlich geringer als in der Rechnung ohne Rivulet-Modell (Abb. 4.4), wodurch dann auch die Plattenoberflächentemperatur von ursprünglich 88 °C auf 100 °C ansteigt (Messwert bei 80 – 82 °C).



Abb. 4.2 COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung mit Rivulet-Modell, Bedeckungsgrad der Stahlplatte (hier Struktur S4)



Abb. 4.3 COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung ohne und mit Rivulet-Modell, Dicke des Wasserfilms entlang der Stahlplatte



Abb. 4.4 COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung ohne und mit Rivulet-Modell, Wärmeabfuhr von der Stahlplatte

Divisionen durch Null oder "NaN" treten auch in der Release-Version auf, werden aber zum Teil durch die interne (von Compiler-Optionen abhängige) Fehlerbehandlung abgefangen (Werte normalisiert bzw. auf null gesetzt). An den entsprechenden Stellen wurden deshalb Tests implementiert, die in solchen Fällen zum regulären Programmstopp führen. Die Identifizierung der Ursache und deren Korrektur erfordert eine intensive Einarbeitung in das Modell, die im Rahmen dieses Vorhabens nicht möglich war.

Da die drei aus der Entwicklung des Rivulet-Modells /HUA 15b/ verfügbaren Testfälle (zwei zu senkrechten Platten und ein vereinfachter DWR-Datensatz) auch mit der aktuellen COCOSYS-Version lauffähig sind, wurde die Modellierung in diesen Datensätzen überprüft. Dabei zeigte sich, dass in diesen Testfällen Rivulets immer nur auf der rechten Oberfläche einer Struktur (*RIGHT*) definiert sind. Erklärend sei erwähnt, dass zur Definition einer Struktur im COCOSYS-Datensatz die angrenzenden Zonen auf beiden Seiten zu definieren sind, im Sinne von: "linke" und "rechte" Seite. Deshalb wurden weitergehende Untersuchungen mit dem WAFT-Datensatz (zunächst ohne Rivulet-Option) durchgeführt, in denen sich bestätigte, dass es keine Abhängigkeit der Rechenergebnisse von der Strukturseite gibt, auf denen das PCCS modelliert wird. Nach Aktivierung des Rivulet-Modells auf der rechten Seite (im Unterschied zum eingangs betrachteten Datensatz, wo das Rivulet-Modell auf der linken Seite aktiviert war) endet die Rechnung (sowohl in Release als auch in Debug-Modus) abnormal mit Problemen in der iterativen Lösung der Wasserfilmdicke im Gegenstrom zur Luft mit der Meldung "Problems with counter current flow at surface S0". Ohne die Struktur S0 tritt der gleiche Fehler an anderen Strukturen auf. Wird die FLOWPATH-Option für die Platten-Strukturen nicht verwendet, bleibt nach wenigen Zeitschritten COCOSYS ohne Fehlermitteilung hängen (Endlosschleife in der Iteration des Kontaktwinkels).

Weitere Untersuchungen erfolgten daraufhin mit dem Testfall *vertplate* von KIT. Zunächst wurde wie oben für den WAFT-Datensatz der Datensatz so modifiziert, dass das Rivulet-Modell auf der formal anderen Seite (hier: Änderung von RIGHT auf LEFT) der Struktur aktiviert ist. Beide Versionen des Testfalls laufen durch, aber in der LEFT-Variante treten wesentliche Unterschiede im berechneten Kontaktwinkel sowie im Bedeckungsgrad auf, was sich dann in der abgeführten Wärme widerspiegelt. Eine mögliche Ursache dafür ist, dass im Quellcode eine Abhängigkeit des Modells von der formalen Strukturseite in (LEFT, RIGHT) existiert, die mit den Entwicklern noch geklärt werden muss. Diese Probleme stehen im Widerspruch zur Strategie der variablen Simulation von Strukturen in COCOSYS.

Zudem wurde festgestellt, dass noch Inkonsistenzen bei der Behandlung von Umschaltprozessen im Rivulet-Modell (z. B. der Wechsel zwischen einzelnen Modelloptionen) im Vergleich zur üblichen Praxis im THY-Hauptmodul bestehen. Dadurch erfolgt keine automatische Reduzierung der Zeitschrittweite, weshalb eine deutliche Abhängigkeit der Ergebnisse von der Integrationsschrittweite auftritt und in der Konsequenz mögliche Instabilitäten an den Umschaltzeitpunkten verursacht werden können. Wenn im Testbeispiel die vom Anwender vorgegebene Begrenzung der Zeitschrittweite auf 4,5 s entfernt und somit die maximale Integrationsschrittweite von 50 s ermöglicht wird, hat dies sichtbare Unterschiede in den Ergebnissen zur Folge, was in Abb. 4.5 am Bedeckungsgrad gezeigt ist.

Das Rivulet-Modell wird durch Angabe der entsprechenden Modul-Daten für alle Strukturoberflächen, für die das CO1-Wärmeübergangsmodell angegeben ist, aktiviert. Wünschenswert wäre statt dessen, dass der Nutzer die Modelloption für einzelne Oberflächen auswählen kann, was so bereits für das Rivulet-Modell *Innenseite* (für Kondensation) mittels Item ----- USER\_RIVULET für eine beliebige Oberflächenseite einer Struktur möglich ist. Neben der Tatsache, dass beide Rivulet-Modelle unabhängig voneinander programmiert sind, ist auch die Kopplung beider Modelle sowohl auf der Innen- als auch auf der Außenseite einer Struktur (hier die Containment-Schale) derzeit nicht möglich – die Eingabe für das Innenmodell war in einer Rechnung ohne Wirkung. Der Benetzungsgrad wird gegenwärtig noch nicht für die Berechnung der effektiven Fläche für den Wärmeübergang benutzt.



Abb. 4.5 Einfluss der Zeitschrittweite auf den berechneten Bedeckungsgrad in COCOSYS, org = Begrenzung der Zeitschrittweite auf 4,5 s, dt = maximale Zeitschrittweite 50 s

Ab der COCOSYS-Version 3.0 gibt es die Option, segmentierte Strukturen zu definieren. Dabei wird in Abhängigkeit vom zeitlich veränderlichen Wasserstand in den Zonen auf beiden Seiten einer Struktur die Oberfläche automatisch in Anteile, die mit der Atmosphäre sowie solche, die mit dem Wasser in Kontakt stehen, aufgeteilt. Im Testbeispiel wurde die unterste Struktur SCONT11 mit dieser neuen Option simuliert, um die Kombination von Rivulet (PCCS-Simulation auf der *Außenseite*, d. h. RIGHT von SCONT11) und segmentierter Oberfläche zu überprüfen. Im zweiten Schritt wird dann zusätzlich durch die Einspeisung von Wasser in die Zone RD61 auf der Innenseite (Seite LEFT) die Ausbildung eines FLUID-Zonenteils und der Anstieg des Wasserstandes hervorgerufen. Bereits im ersten Schritt zeigte sich, dass die Kombination Rivulet plus segmentierte Struktur nicht funktioniert. Die Rechnung läuft zwar ohne Fehler/Warnung durch, es werden aber für die rechte Seite keine Rivulet-spezifischen Ergebnisse wie Bedeckungsgrad oder Filmdicke berechnet. Die Überlagerung von Rivulet und Segmenten ist im Quellcode bisher nicht vorgesehen. Um dies dem Anwender eindeutig zu vermitteln, wurde ein entsprechender Test implementiert.

Im Rahmen der Testrechnungen wurden neben den oben genannten Änderungen am Quellcode zur Vermeidung von Divisionen durch Null weitere punktuelle Verbesserungen vorgenommen (Ausdruck der Eingabedaten in den \*.prt.thy File, Korrektur der Ausgabe des Kontaktwinkels in Grad, interne Tests). Trotz dieser Änderungen benötigt das Rivulet-Modell im Hinblick auf die Simulation von Wasserfilmen (z. B. beim PCCS auf der Außenseite der Containment-Schale) weitere Entwicklung.

Alle identifizierten Probleme sowie Verbesserungsvorschläge sind in einem Dokument zusammengefasst, das mit KIT diskutiert wurde. Das KIT plant im VEKOCO-Projekt weitere Entwicklungsbearbeiten zu Wasserfilm-Modellen in COCOSYS, insbesondere eine Harmonisierung der Modelle für Verdampfung (Außenseite des Containments) und Kondensation (innen). Die GRS wird diese Arbeiten begleiten und auf die Klärung der noch offenen Punkte für eine Verbesserung der Anwendungsmöglichkeit hinwirken.

### 4.1.3 Verbesserungen im CO1-Modell bei Simulation eines Wasserfilms

Simulationen von AP1000/CAP1400-Anlagen sowie für die chinesische WAFT-Versuchsanlage haben gezeigt, dass im CO1-Modell die Wasserfilmtemperatur unter bestimmten Randbedingungen höher als die Siedetemperatur des Wassers berechnet werden kann.

In der WAFT-Versuchsanlage entspricht der Druck den Zuständen im Annulus, d. h. er wird nahe dem atmosphärischen Druck gehalten /DU 20/, /ZHA 12/. Unter solchen Bedingungen sind durchschnittliche Wasserfilmtemperaturen niedriger als 100 °C zu erwarten. In Abb. 4.6 ist der mit COCOSYS berechnete Zeitverlauf der Wasserfilmtemperaturen entlang der 5 m hohen Stahlplatte für ein fiktives Experiment an der WAFT-Anlage visualisiert, in dem luftarme Bedingungen unterstellt wurden. Die Struktur S10 simuliert den oberen Teil der Platte, weiter abwärts über S9 etc. bis hin zu S0 für den unteren Teil.

Wenn die beheizten Strukturen genügend Energie bekommen, erreicht der Wasserfilm Siedetemperatur. In der Rechnung verdampft von einigen Strukturen der Wasserfilm komplett, speziell die unteren Abschnitte der Stahlplatte S0 bis S4 (Abb. 4.1). Dabei gibt es Zeitspannen, in denen der Wasserfilm vor seiner vollständigen Verdampfung sehr hohe Temperaturen (d. h. oberhalb der Sättigungstemperatur) erreicht. Im Übergangszeitraum treten auch numerische Instabilitäten auf mit bis zu null Grad fallenden Werten – negative Temperaturen werden von COCOSYS verhindert. Auf anderen Strukturen wird der Wasserfilm langsam auf höhere Temperaturen erwärmt - siehe z. B. Struktur S6 (grüne Kurve). Zu bemerken ist, dass nach kompletter Verdampfung des Wassers in COCOSYS die Filmtemperatur auf die Wandtemperatur gesetzt wird, dann also höhere Werte als 100 °C möglich sind.

Um dauerhafte Wasserfilmtemperaturen höher als die Siedetemperatur des Wassers zu behindern, wurde eine Begrenzung im numerischen Verfahren im CO1- (und auch im älteren obsoleten CDW) Wärmeübertragungsmodell implementiert. Die bisher erzielten Ergebnisse sind in Abb. 4.7 visualisiert. Aufgrund iterativer Algorithmen im numerischen Berechnungsverfahren des Wasserfilms können Temperaturen größer als die Siedetemperatur noch für einzelne Zeitpunkte auftreten. Dauerhaftes unphysikalisches Verhalten ist allerdings mit dieser Begrenzung nicht mehr möglich.

Mit dieser Temperaturbegrenzung im CO1-Modell wurden die Wärmeflüsse von der Struktur an den Wasserfilm (d. h. die Wärmeabfuhr aus dem Containment) und die Berechnung der Wasserfilmdicke (Abb. 4.8 bzw. Abb. 4.10) nicht wesentlich geändert.

Leider hat sich damit die numerische Stabilität nicht wesentlich verbessert. Bei heißen Strukturen befindet sich das System oft in einem numerischen Ungleichgewicht. Zudem bedeckt im gegenwärtig genutzten CO1-Modell der Wasserfilm eine Struktur entweder komplett oder ist vollständig verdunstet. Auf diesen Grund oszilliert bei Strukturen, die deutlich heißer sind als die Siedetemperatur des Wassers, die Filmdicke zwischen 0 mm (kein Film) und einer kleinen Filmdicke. Um diese numerische Instabilität zu eliminieren, sind weitere Entwicklungen notwendig.

Bei anderen Datensätzen im COCOSYS-Regressionstesten wurden leider auch Verschlechterungen der numerischen Stabilität und deutliche längere Berechnungszeiten beobachtet. Deswegen wurde die Begrenzung der Wasserfilmtemperatur vorerst zurückgesetzt. Es wird erwartet, dass die Weiterentwicklung im geplanten VEKOCO-Projekt durch KIT Verbesserungen bringen wird.



Abb. 4.6 WAFT-Anlage, Wasserfilmtemperatur entlang der Platte – ohne Temperaturbegrenzung



Abb. 4.7 WAFT-Anlage, Wasserfilmtemperatur entlang der Platte – mit Temperaturbegrenzung



**Abb. 4.8** WAFT-Anlage, Wasserfilmdicke entlang der Platte – ohne Temperaturbegrenzung



Abb. 4.9 WAFT-Anlage, Wasserfilmdicke entlang der Platte – mit Temperaturbegrenzung

### 4.2 Gegenströmung von Gasen in engen Verbindungen

#### Hintergrund

Bei Auslegungsstörfällen und Unfällen in Kernkraftwerken können im Sicherheitseinschluss unter bestimmten Bedingungen gasförmige Gegenströmungen, zum Beispiel in Strömungsverbindungen zwischen Räumen, auftreten. Auch bei Experimenten wie dem TH-27-Versuch in der THAI+-Anlage und einigen Versuchen der PANDA-SETH-Reihe tritt das Phänomen in den Verbindungsleitungen auf. Dessen möglicher Einfluss auf die Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss ist noch nicht ausreichend untersucht. Dazu wurden im Rahmen dieses Projektes Untersuchungen durchgeführt.

In der THAI+-Anlage gibt es zwischen den Behältern TTV (THAI Test Vessel) und PAD (Parallel Attachable Drum) zwei Verbindungen (Abb. 4.10 links). In COCOSYS-Nachrechnungen des TH-27-Versuchs wurde beobachtet, dass in der oberen Verbindung eine Gegenströmung (Abb. 4.10 rechts) auftritt. In späteren Untersuchungen wurde entdeckt, dass auch in der unteren Rohrverbindung das Phänomen unter bestimmten Bedingungen auftritt. Im TH-27-Versuch tritt die Gegenströmung aufgrund von gleichzeitiger Helium-Einspeisung in den PAD-Behälter und Dampf-Einspeisung in den TTV-Behälter auf.



Gas-Gas-Gegenströmung

Nodalisierung Seitenansicht:

Abb. 4.10 COCOSYS-Nodalisierung für den Versuch THAI-TH-27 /FRE 16/



Abb. 4.11 COCOSYS-Nodalisierung für den Versuch PANDA-SETH-4.1 /OECD 12/

Auch in einigen Nachrechnungen der PANDA-SETH-Versuche (Abb. 4.11) kann zwischen den Behältern Drywell 1 (DW1) und Drywell 2 (DW2) eine Gegenströmung beobachtet werden. Bei PANDA-SETH 4.1 strömt ein heißes Luft-Dampf-Gemisch im oberen Teil des Verbindungsrohrs in eine Richtung und gleichzeitig strömt kühle Luft unten in die andere Richtung.

### Wissensstand

Bis jetzt gibt es in COCOSYS kein Modell, das Reibungskräfte zwischen unterschiedlichen Strömungen in zwei Verbindungen nebeneinander erfasst. Das physikalische Phänomen einer solchen Gegenströmung ist in der Literatur in unterschiedlichen Bereichen bekannt. Deswegen gibt es für diese Phänomene unterschiedliche mathematische Modelle, um eine solche Wechselwirkung zu beschreiben. Diese Modelle, die für Flüssigkeiten im Gegenstrom erstellt worden sind, sind aber nicht auf ebensolche Gasströmungen übertragbar. Es gibt ferner auch mehrere experimentelle und numerische Studien zur Flüssigkeits-Gas-Gegenströmung. Auf der Basis dieser Untersuchungen existieren mehrere Modelle für diesen Typ von Strömung. Die Modelle sind stark angepasst an die geometrischen Verhältnisse und nicht übertragbar auf eine allgemeine Gas-Gas-Gegenströmung. Gegenwärtig sind in der Literatur keine experimentellen Untersuchungen zu Gas-Gas-Gegenströmungen bekannt. Deswegen wurde im Folgenden ein neues, allgemeines Modell für die wechselseitige Beeinflussung von gegensinnig gerichteten Gasströmungen in engen Strömungsverbindungen erstellt.

#### Modellbeschreibung

In Experimenten für Wasser-Wasserdampf-Strömungen werden drei verschiedene Arten von Strömungen unterschieden:

- Bei kleinem Unterschied in den Geschwindigkeiten der zwei Phasen ist die Strömung laminar.
- Wenn der Unterschied in den Geschwindigkeiten steigt, wird die Strömung in einem Teil des Rohres turbulent.
- Bei noch größerem Unterschied wird die Strömung vollständig turbulent.

Dieses Verhalten wird auch bei einer Gegenströmung von zwei Gas-Phasen erwartet. Um die turbulente Wechselwirkung im Fall unterschiedlicher Geschwindigkeiten in zwei parallelen Verbindungen  $j_1$  und  $j_2$  (Abb. 4.12) zu berücksichtigen, wird der Verlustkoeffizient  $\zeta_i$  in dem Verbindungsmodell modifiziert:

$$\dot{G}_{j} = \frac{A_{j}}{l_{j}} \{ (p_{j_{s}} - p_{j_{t}}) + w_{j} - K_{j}G_{j}|G_{j}| \}, \quad K_{j} = \frac{\zeta_{j}}{2\rho A_{j}^{2}}$$
(4.1)

Der Verlustkoeffizient  $\zeta_j = \zeta_{form} + \zeta_{fric}$  besteht allgemein aus zwei Teilen. Der Reibungsdruckverlustkoeffizient  $\zeta_{form}$  wird automatisch von COCOSYS berechnet. Dieser hängt von der Länge der Verbindung, dem hydraulischen Durchmesser der Verbindung D, der Fläche der Verbindung  $A_j$ , dem Volumenstrom  $G_j$  und der dynamischen Viskosität  $\eta$  ab. Der Koeffizient für zusätzliche Verluste aufgrund geometrischer Effekte  $\zeta_{fric}$  wird in der Eingabe-Datei vorgegeben. In dem hier verfolgten Ansatz wird in additiver Ergänzung noch ein Beitrag  $\zeta^{turb}$  ergänzt, der den Effekt von Turbulenz während der Gegenströmung erfasst:

$$\zeta_i = \zeta_{form} + \zeta_{fric} + \zeta^{turb} \tag{4.2}$$

Bei Flüssigkeits-Gas-Gegenströmungen spielen die Unterschiede in den Geschwindigkeiten der zwei Phasen definitiv eine wichtige Rolle. Um den Effekt der Geschwindigkeit auf die Turbulenz zu beschreiben, wird in der Fluiddynamik die Reynolds-Zahl *Re* benutzt. Die Reynolds-Zahl ist normalerweise als das Verhältnis von Trägheits- zu Reibungskraft definiert, das mit der Dichte  $\rho$ , der Geschwindigkeit v, der charakteristischen Länge *L* und der dynamischen Viskosität  $\eta$  berechnet wird, vgl. Gl. (4.4), links. Der Massenstrom *G* ist als Produkt aus Geschwindigkeit, Dichte und einer (charakteristischen) Fläche *A* definiert. Deswegen kann die Reynolds-Zahl auch als Funktion des Massenstroms *G* geschrieben werden, vgl. (4.4), rechts. Mit *D* wird der hydraulische Durchmesser bezeichnet.

$$Re = \frac{\rho v L}{\eta}, \qquad G = v \rho A, \qquad Re = \frac{G D}{A \eta}$$
 (4.3)

Unter Verwendung der Differenz der zwei Geschwindigkeiten als charakteristische Bezugsgröße kann eine relative Reynolds-Zahl folgenderweise berechnet werden:

$$Re^{rel} = \frac{\rho |v_1 - v_1|L}{\eta} = \left| \frac{G_1}{A_1} - \frac{G_2}{A_2} \right| \frac{D_{j_1 \cup j_2}}{\eta}$$
(4.4)

Mit  $v_1$  und  $v_2$  sind die Geschwindigkeiten in den Verbindungen  $j_1$  und  $j_2$  bezeichnet (Abb. 4.12). Ebenso sind  $G_1$  und  $G_2$  die entsprechenden Volumenströme,  $A_1$  und  $A_2$  sind die entsprechenden Verbindungsflächen. Mit  $D_{j_1 \cup j_2}$  wird der hydraulische Durchmesser einer (virtuellen) Verbindung mit der gesamten Fläche  $A_1 \cup A_2$  der Verbindungen  $j_1$  und  $j_2$  bezeichnet. Auch wenn die Strömungen in  $j_1$  und  $j_2$  in die gleiche Richtung zeigen, kann  $Re^{rel}$  größer als null sein. Deswegen berechnet das hier vorgeschlagene Modell Druckverlust aufgrund von Turbulenzeffekten bei parallelen Strömungen in dieselbe Richtung, wenn die Geschwindigkeitsbeträge verschieden sind.



Abb. 4.12 Schematische Abbildung einer Gegenströmung

Es können folgende Aussagen getroffen werden:

- Im Fall von laminarer Strömung darf ζ<sup>turb</sup> keinen Einfluss haben und muss verschwinden.
- Mit schnellerer Strömung ab einem Wert von Re<sup>rel</sup> fängt die Strömung an, teilweise turbulent zu sein.
- Wenn aber die Strömung komplett turbulent ausgebildet ist, steigt der Einfluss der Turbulenz und deswegen ζ<sup>turb</sup> nicht weiter. Dieses Verhalten von ζ<sup>turb</sup> wird mit einer teilweise linearen Abhängigkeit von Re<sup>rel</sup> wie in Abb. 4.13 gezeigt modelliert.



**Abb. 4.13** Abhängigkeit von ζ<sup>turb</sup> von Re<sup>rel</sup>

Mit  $\zeta_{max}^{turb}$  wird der maximal mögliche Turbulenzverlustkoeffizient bezeichnet. Dieser soll genauso wie  $\zeta_{fric}$  in der Eingabe-Datei vorgegeben werden und ist damit abhängig von der Nutzereingabe. Für den Beginn der Turbulenz wird der Wert  $Re^{rel} = 2.300$  zugrunde gelegt und komplette Turbulenz wird bei  $Re^{rel} \ge 4.000$  erwartet. Die genannten numerischen Werte sind als kritische Werte für die Strömung eines Fluids in einem idealen Rohr bekannt. Momentan ist kein Experiment bekannt, um den oben beschriebenen Ansatz für eine Gas-Gas-Gegenströmung zu validieren. Auch beruht das teilweise lineare Verhalten von  $\zeta^{turb}$  auf einer Annahme.

#### Auswirkungen des Modells in Testrechnungen

Die Änderung (4.3) des Verlustkoeffizienten wurde in COCOSYS implementiert und dessen Einfluss auf die Thermohydrauliksimulation auf der Basis des THAI-Versuches TH-27 (Abb. 4.10) untersucht. Es zeigt sich, dass die globalen Effekte des neuen Koeffizienten  $\zeta^{turb}$  auf die Temperatur, den Druck, die Helium- und Dampf-Konzentration sowie auf die Gas-Geschwindigkeiten in großen Räumen sehr klein sind. Bei großem  $\zeta_{max}^{turb}$  gibt es aber deutliche lokale Effekte auf die Gas-Geschwindigkeit. Einen deutlichen Einfluss der Reibungsverluste auf die Geschwindigkeiten kann in der oberen Verbindung beim THAI-27-Versuch (offene Nachrechnung) beobachtet werden, s. Abb. 4.14, links. Für diesen Vergleich wurde ein Wert von  $\zeta_{max}^{turb} = 4$  verwendet. Da die Effekte nur lokal sind, ist nicht klar, ob diese Größenordnung für  $\zeta_{max}^{turb}$  realistisch ist. Bei diesem Versuch wurden die lokalen Geschwindigkeiten nicht gemessen. Um Empfehlungswerte für den maximalen zusätzlichen Reibungsverlust zu überprüfen, wurde ein Vergleich mit einer CFD-Software durchgeführt.



Abb. 4.14 Parallele Geschwindigkeiten im oberen Verbindungsrohr im TH-27-Versuch.
 Rot: Strömung im oberen Teil des Rohres; grün: Strömung im unteren Teil des Rohres; ohne ζ<sup>turb</sup> (links) und mit ζ<sup>turb</sup><sub>max</sub> =4 (rechts)

Für den Versuch PANDA-SETH 4.1 wurden dazu Studien mit der kommerziellen Software ANSYS-CFX durchgeführt. In Abb. 4.15 sind die durchschnittlichen Geschwindigkeiten in der oberen und der unteren Hälfte des Verbindungsrohrs verglichen. Bei  $\zeta_{max}^{turb} =$ 0,25 stimmen die von COCOSYS berechneten Geschwindigkeiten besser mit den von CFX berechneten, mittleren Geschwindigkeiten in Betrag und Richtung überein. Jedoch ist die Auswirkung des Effektes sehr klein. Deswegen ist der Einsatz des erweiterten Modells nur für kleine Rohre mit Durchmesser < ~ 1 Meter zu empfehlen. Für Verbindungen mit größeren Flächen ist der Effekt von  $\zeta^{turb}$  vernachlässigbar.



**Abb. 4.15** Durchschnittliche Geschwindigkeiten, errechnet mit CFX, mit COCOSYS ohne  $\zeta^{turb}$  und mit COCOSYS mit  $\zeta^{turb}_{max} = 0,25$ 

#### Fazit

Für COCOSYS wurde ein neuer Modellansatz, der die physikalischen Einflüsse bei den einzelnen Regimes in einer Gas-Gas-Gegenströmung beschreibt, entwickelt, implementiert und in Testrechnungen überprüft. Gegenstand dieser Testrechnungen waren numerische Untersuchungen des Druckverlustes aufgrund von Turbulenzen bei gasförmigen Gegenströmungen in Strömungsverbindungen. In der Anwendung auf realistische Szenarien in den Versuchsanlagen PANDA und THAI+ wurde der Einfluss dieses Phänomens bewertet. Mit dem neuen Modellansatz können lokale Strömungsgeschwindigkeisimuliert werden. Dies ten genauer kann für lokale Effekte in den Strömungsverbindungen von Bedeutung sein, die von den lokalen Strömungsgeschwindigkeiten beeinflusst werden, wie z. B. das Ablagern bzw. Aufwirbeln von Aerosolen. In den Testrechnungen zeigte der Einfluss des neuen Modells nur geringen Einfluss auf globale Parameter wie Druck und Temperatur, sodass die bisherige Validierung der Thermohydraulik von COCOSYS aufgrund dieses Effektes nicht in Frage gestellt werden muss. Das Modell hat Einfluss auf lokale Strömungsgeschwindigkeiten und verkleinert im Allgemeinen die Differenz der Geschwindigkeiten in der Strömungsverbindung. Eine Relevanz dieses Phänomens wird nur in engen Strömungsverbindungen vermutet. Eine detaillierte Beschreibung dieser Studie wurde in /ILI 19/ veröffentlicht.

# 4.3 Rückwirkungen von Strukturausdehnungen auf die Thermohydraulik

# 4.3.1 Hintergrund

Das Thermohydraulik-Hauptmodul (THY) von COCOSYS basiert auf dem Lumped-Parameter-Konzept, bei dem Räume des Containments bzw. von Versuchsanlagen durch Kontrollvolumina (auch als Zonen oder Nodes bezeichnet) abgebildet werden. Dabei ist das totale Volumen einer Zone immer konstant. Volumenänderungen der einzelnen Phasen innerhalb einer Zone, d. h. zwischen verschiedenen Zonenteilen, sind bereits berücksichtigt wie z. B. beim Anstieg des Sumpfvolumens mit der entsprechenden Verringerung des freien Gasvolumens in Nichtgleichgewichtszonen oder der dynamischen Wasserbewegung innerhalb von DRASYS- oder VORTEX-Zonen /ARN 19/.

Es gibt jedoch auf dem Gebiet der Reaktorsicherheit einige Fragestellungen, bei denen prozessabhängige Volumina von Zonen von Bedeutung sind, wie z. B.

- die Ausdehnung der Stahlschale des Containments in deutschen Konvoi-Anlagen bei hohen Innentemperaturen und -drücken,
- die elastische Verformung der 3 mm d
  ünnen Stahlw
  ände in Nasskondensatoren von WWER-440/213-Anlagen /NEA 03/ oder
- der Gasspeicher des Reactor-Cavity-Venting-Systems von RBMK-1000-Anlagen der 1. Generation /AEA 96/.

Die Veränderung des Zonenvolumens beeinflusst den Druckaufbau und damit das thermohydraulische Verhalten der Anlagen bei Störfällen. COCOSYS sollte deshalb so erweitert werden, dass auch prozess- oder nutzerabhängige Volumenänderungen zwischen gekoppelten Zonen bei der Lösung der Differentialgleichungen für den Zonenzustand berücksichtigt werden.

# 4.3.2 Durchgeführte Arbeiten

Unter den oben genannten Fragestellungen steht aus sicherheitstechnischer Sicht die Deformation der internen Stahlwände des Nasskondensators (engl. Bubble oder Bubbler Condenser) von WWER-440/213-Anlagen an erster Stelle. Deshalb wurden die Arbeiten zur Erweiterung von COCOSYS eng an diese Problematik angelehnt.

In den IAEA-Guidelines /IAEA 96/ zur Bewertung des Containments von WWER-440/213-Anlagen heißt es bzgl. der für Auslegungsstörfälle zu prüfenden Lasten:

"... Also included are pressure differences acting on bubbler condenser elements and other internal containment structures. The structural integrity of the bubbler condenser tray walls and its leaktight integrity are important to the proper functioning of the bubbler condenser containment during the time interval required to perform their safety function."

Bei Versagen der Zwischenwände des Nasskondensators (Nako), der in WWER-440/213 die Funktion eines Druckabbausystems erfüllt, kommt es zum Bypass der Wasservorlage, sodass verdampftes Kühlwasser nicht mehr kondensiert und damit beim Auslegungsstörfall *Leck 2F DN500* der Auslegungsdruck des Containments überschritten wird. Die 3 mm dünnen Zwischenwände aus Edelstahl sind für eine Druckdifferenz von 30 kPa ausgelegt. Für die Berechnung der in den ersten Sekunden des Auslegungsstörfalls auftretenden maximalen Druckdifferenz spielt auch die elastische Deformation der Nasskondensatorwände eine Rolle. Die Verformung der Zwischenwände und damit die Reduzierung des Gasvolumens führen zur Volumenkompression und damit zu einem stärkeren Druckanstieg im Inneren des Nakos /NEA 03/, was die sich einstellende Druckdifferenz beeinflusst. Diese Verformung von Wänden bzw. die Volumenänderung einer Zone kann bisher in Rechnungen mit COCOSYS nicht berücksichtigt werden.

### Ermittlung von Eingabedaten für COCOSYS zur Nako-Wandverformung

Der Versuchsstand EREC BC V-213 bildet ein WWER-440/213-Containment mit Nasskondensator im Maßstab 1:100 ab, wobei der Nako ein 4 m breites Segment mit prototypischen Maßen und Materialien ist (Abb. 4.16, links). Im Jahr 1999 wurden an der Anlage Experimente durchgeführt und dabei u. a. der Versuch Nr. 5 zu einem großen Leckstörfall /MEL 99/. Während des Versuchs wurde auch an einzelnen Stellen die Verformung der Nako-Wände (linear displacement, z. B. NX.40 und NZ.40 in Abb. 4.16) durch die einwirkende Druckdifferenz (PD.3040) gemessen.



1 – Sackraum (als Raum V0 bezeichnet), 2 – Dampferzeugerbox mit 3 optionalen Bruchorten (V1), 3 – Dampferzeugerbox (V2), 4 – Schacht des Nasskondensators (V3), 5 – Nasskondensator (V4), 6 - Luftfalle (V5), 7 - Druckbehältersystem zur Simulation des Kühlkreislaufes, 8 - Rückschlagklappe

Abb. 4.16 Schema der BC V-213-Anlage (links) /NEA 03/ und eines Nako-Segments (rechts) /AME 99/

Im Projekt wurden jetzt aus den Messdaten zur Wandverformung über die Zeit dN(t) Abhängigkeiten zur Verformung von der einwirkenden Druckdifferenz erstellt (dN/dp), siehe Abb. 4.17.



Abb. 4.17 EREC BC V-213, Test Nr. 5, Bearbeitung der Messwerte zur Wandverformung

Unter Nutzung der Wandgeometrie des Versuchsstandes sollen in Zukunft aus dN/dp Volumenänderungen von der Druckdifferenz ermittelt werden (dV/dp), die auch für den Nasskondensator in KKW repräsentativ sind, und die später als Randbedingungen in COCOSYS genutzt werden können.

#### Erweiterung von COCOSYS THY

Parallel zur Aufbereitung der experimentellen Ergebnisse wurde mit der Erweiterung von COCOSYS zur Simulation solcher Volumenänderungen begonnen. In relevanten Zonen wird jetzt das totale Volumen als Integrationsgröße geführt und ist damit prinzipiell in einzelnen oder verbundenen Zonen prozess- oder zeitabhängig veränderbar, was dann bei der Lösung der Differentialgleichungen für den Zonenzustand berücksichtigt wird. Die Ein- und Ausgabe von erforderlichen Daten inklusive logischen Tests ist bereits realisiert, muss aber nach ersten Anwendungserfahrungen sicher noch weiter angepasst werden (z. B. Fehlergrenzen). Die Umsetzung der physikalischen Abhängigkeit der Wandverformung für das WWER-440/213-Problem unter Anwendung der BC-V-213-Ergebnisse steht noch aus. Ebenso ist die Einbindung in COCOSYS THY noch unvollständig (u. a. fehlende Restart-Option). Soweit möglich wird in der Programmierung versucht, die Schnittstelle für andere Modelloptionen vorzubereiten, z. B. für eine mögliche Vorgabe von Volumen-Zeittabellen. Alle neuen Programmteile sind im FORTRAN-Modul pres\_dep\_vol\_mod.f90 enthalten. Anhand von zwei schnell laufenden Datensätzen zur GKSS-Versuchsanlage (Versuch M1 mit DRASYS-Zonenmodell bzw. INSERTION-Option) wird ständig geprüft, dass die Erweiterungen keine unerwünschten Nebeneffekte hervorrufen.

Die prinzipielle Möglichkeit der Änderung des totalen Zonenvolumens konnte bereits anhand eines einfachen 2-Zonen-Modells ohne Quellen und Senken gezeigt werden. Die Zonen ZLEFT und ZRIGHT mit je 10 m<sup>3</sup> Volumen sind dabei über eine Trennwand gekoppelt, sodass die angenommene Verformung der Trennwand zwischen

- 10 20 s von rechts nach links,
- 30 50 s von links nach rechts und
- 60 70 s wieder zurück in die Ausgangposition

aufgrund einer Volumenänderung von jeweils 0,2 m<sup>3</sup>/s (Abb. 4.18) entsprechende Änderungen der Raumdrücke hervorruft (Abb. 4.19). Dabei musste gegenwärtig die Wandverformung (Werte der Volumenänderung) noch fest im Quelltext programmiert werden.



Abb. 4.18 Testrechnung, Volumenänderung als Funktion der Zeit



Abb. 4.19 Testrechnung, Einfluss der Volumenänderung auf den Zonendruck

Es zeigte sich allerdings auch, dass während der Volumenänderungen die globale Energiebilanz noch verletzt wird, wohingegen die Massenbilanzen korrekt sind. Es ist beabsichtigt, im Folgevorhaben die begonnenen Arbeiten fortzuführen. Dies beinhaltet auch die Dokumentation des Modells inkl. eines Eingabebeispiels im COCOSYS Manual. Der Effekt der Volumenänderungen soll durch eine exemplarische Rechnung für die EREC-Versuchsanlage gezeigt werden.

### 4.4 Zonenfluten

In RS1508 und RS1532 wurde in COCOSYS eine Ergänzung für das komplette Auffüllen von Raumbereichen mit Wasser bereitgestellt. Mit dieser Modellerweiterung ist es möglich, unter Verwendung einer geeigneten Diskretisierung des Raumbereichs in mehrere atmosphärische COCOSYS-Zonen das Fluten von Zonen mit Wasser sowie einen entsprechenden Stofftransport (Konvektion) zwischen Zonen mit dem verfügbaren Strömungslöser in COCOSYS zu berechnen. Gegenüber einem CFD-basierten 3D-Modell gibt es generell viele Vereinfachungen und die Auflösung ist entsprechend der Nodalisierung von Raumbereichen mit der typischen Größe von COCOSYS-Zonen sehr viel gröber. Mit zunehmender Verwendung dieses Modells in COCOSYS-Simulationen wurden zuletzt von den Anwendern noch verschiedene Probleme identifiziert (z. B. zur Konvektion zwischen Zonen aufgrund von Temperaturgradienten), die in diesem Arbeitspunkt behoben wurden. Im Rahmen der Nutzerrückflüsse wurde darüber hinaus noch erheblicher Verbesserungsbedarf zur Simulation von Wärmeeinträgen an heißen Strukturen unter Wasser identifiziert. Diese Thematik geht jedoch über den hier geplanten Rahmen hinaus und soll in einem separaten Vorhaben behandelt werden.

### 4.4.1 Charakteristische Längen

Während einer Zonenflutung ändert sich der Wasserspiegel. Die Änderungen im Wasserspiegel beeinflussen die Konvektionsschleifen in der Atmosphäre und im Wasser. Um diesen Einfluss zu berücksichtigen wurde eine dynamische und automatisierte Begrenzung der eingegebenen charakteristischen Längen im Modell CO1 implementiert. Die charakteristischen Längen der Strukturen unter Wasser wurden auf die Wassertiefe begrenzt. Die charakteristischen Längen der Strukturen in der Containment-Atmosphäre wurden auf die Atmosphären-Höhe begrenzt.

### 4.4.2 Wärmeaustausch-Modelle

Das Fluten von Zonen kann nur mit segmentierten Strukturen korrekt betrachtet werden. Die Segmentierung von Strukturen wird von COCOSYS automatisch und dynamisch berechnet, wobei die (vom Nutzer) eingegebenen Werte für den niedrigsten und den obersten Punkt berücksichtigt werden. Bisher wurde diese Segmentierung nur in dem Modell CO1 berücksichtigt. Mit dieser Begrenzung war die Simulation von einigen Phänomenen, wie z. B. Wärmestrahlung während Zonenfluten nicht möglich. Um die Verwendbarkeit von COCOSYS für sicherheitstechnisch relevante Fragestellungen zu erweitern, wurden Modelle erweitert, damit die Segmentierung von Strukturen korrekt betrachtet werden kann. Die folgenden fünf Modelle wurden erweitert:

- Modell für Nutzer-definierten Wärmeübergangskoeffizient TAB
- Modell für Nutzer-definierten Wärmefluss QBC
- Modell für Wärmestrahlung von Strukturen auf Zonen WGR
- Modell für Sieden in Wasserpools ROH

Diese Erweiterungen erlauben genauere Berechnungen von Wärmeaustausch während Zonenfluten.

# 4.4.3 Allgemeine Fehlerkorrekturen und Erweiterungen

Innerhalb des Projektzeitraums ist die Implementierung von vollständig mit Wasser gefüllten Zonen verstärkt eingesetzt worden. Dabei sind von den Anwendern verschiedene Probleme gemeldet worden.

- Beim Wiedererzeugen einer Gasphase, die beim Löschen einen übersättigten Zustand hatte, war auch die neu erzeugte Gasphase als übersättigt markiert. Der Grund hierfür war, dass der Sättigungszustand der neuen Gasphase nicht entsprechend des einströmenden Gases neu berechnet worden ist. Das führte zu massiven Störungen im Druckverlauf, da der Wasserdampfpartialdruck im übersättigten Zustand durch die Temperatur vorgegeben ist. Der Sättigungszustand der neuen Gasphase wird nun abhängig vom Zustand des einströmenden Gases berechnet und die Gasphase konsistent initialisiert.
- Bei der Anbindung an ATHLET und dem Füllen von Zonen mit Wasser aus ATHLET kam es zu Programmabstürzen, da das zugehörige Volumen in ATHLET statisch an den Gaszonenteil der COCOSYS-Zone gebunden war und dieser Gaszonenteil bei

vollständig mit Wasser gefüllten Zonen verschwindet. Die Anbindung wurde um einen dynamischen Wechsel zum dann nur noch vorhandenen Wasserzonenteil erweitert. Der Anwender erhält in der Ausgabe eine entsprechende Information.

- Im Zusammenhang mit Strukturen, die entsprechend der Höhe des Wasserzonenteils in ein unter Wasser liegendes und ein mit dem Gaszonenteil verbundenes Segment geteilt werden, wurde der an das Gas gebundene Anteil beim Fehlen der Gasphase nicht unter allen Umständen entfernt. Grund dafür waren eine komplexe Logikimplementierung und der Umstand, dass die Logik auf zwei Quellcodeblöcke verteilt war. Die Logik wurde überarbeitet und die Funktionalität in einem Block zusammengefasst, damit wurde das Problem behoben.
- In der Modellierung des Massenaustauschs über den neuen Verbindungstyp ATM\_FULL, der für die Simulation von komplett mit Wasser aufgefüllten Zonen in COCOSYS bereitsteht, sind Ergänzungen vorgenommen worden, um den Effekt von thermischen Konvektionsströmungen anzunähern. Die Modellierung ist analog zu der des Verbindungstyps SUMB\_BAL umgesetzt, welcher bisher für den Transport von Wasser zwischen Zonen eingesetzt worden ist. Durch Vorgabe der empirischen (z. B. im Abgleich mit CFD-Rechnungen ermittelten) User-Parameter VWCONVEC (global für alle Verbindungen ohne eigenen Wert) bzw. VWCONV (für individuelle Verbindungen) wird prinzipiell eine globale bzw. individuelle Verstärkung der in COCOSYS gerechneten Vermischung über die ATM\_FULL-Verbindungen berücksichtigt.

# 5 Modellentwicklung für das Ex-Vessel-Verhalten von Kernschmelze

Bei einem Kernschmelzunfall kann nach Versagen des RDB Kernschmelze in das Containment ausgetragen werden. Die Wechselwirkung dieser Ex-Vessel-Kernschmelze mit Strukturen der Reaktorgrube wird mit dem COCOSYS-Modul CCI (Corium-Concrete-Interaction) simuliert. Dieses besteht im Kern aus einer gemeinsam mit IRSN erarbeiteten Version des Rechencodes MEDICIS /NEA 17a/ zur Simulation von Schmelze-Beton-Wechselwirkungen (MCCI). Das Modul ist im Rahmen von Benchmarks und Code-Vergleichen umfangreich untersucht und validiert worden.

Ein Arbeitspunkt zum CCI-Modul bestand darin, Rückflüsse aus neu verfügbaren experimentellen Daten zu MCCI sowie aus Anwendungsrechnungen von internen oder externen Nutzern zu verwerten und damit den Modellstand des CCI-Moduls zu aktualisieren.

In COCOSYS gibt es bislang noch keinen Ansatz, um in Unfallsimulationen eine sogenannte Schüttbettkonfiguration zu berücksichtigen. Eine solche Konfiguration kann nach Eintrag von Kernschmelze in wassergefüllte Räume im Containment bei einer ausreichenden Fragmentierung der Kernschmelze entstehen und ist gegebenenfalls kühlbar. Um diese Modelllücke zu schließen, sind in einem zweiten Arbeitspunkt Grundlagen gelegt worden, um zukünftig die Kühlbarkeit eines Schüttbettes durch COCOSYS zu bewerten und ein gekühltes Schüttbett in COCOSYS-Simulationen zu berücksichtigen.

In einem dritten Arbeitspunkt zum Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten wurde das in Grundzügen in RS1532 ausgearbeitete Konzept für ein Core-Catcher-Modell in COCOSYS implementiert, getestet und es wurden bereits notwendige Verbesserungen durchgeführt.

Im vierten und letzten Arbeitspunkt zum Ex-Vessel-Schmelzeverhalten wurde der Modellstand in COCOSYS zur Simulation der Schmelzeausbreitung verbessert und dabei wurden Rückflüsse von internen und externen Anwendern verwertet.

#### 5.1 Aktualisierung zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI)

Zielsetzung der hier durchgeführten Arbeiten war es, Verbesserungen des MCCI-Modells in COCOSYS im Hinblick auf Fortschritte im internationalen Wissensstand (MOCKA-Experimente /FOI 14/, /FOI 19/ – *Large-scale experiments on molten corium* 

95

*concrete interaction* **Ka***rlsruhe*, Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen bei der GRS, ...) und insbesondere auf den realitätsnahen Einsatz in Anlagenrechnungen (ATHLET-CD/COCOSYS-Kopplung in AC<sup>2</sup>) mit Austrag von Schmelze in den SB zu erreichen.

# 5.1.1 Rückflüsse aus Validierung und internationalem Wissensstand

Aufgrund verschiedener vertiefender Untersuchungen zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (Molten-Corium-Concrete-Interaction, MCCI), die z. T. in den parallelen Vorhaben RS1544 *Validierung und Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC* und RS1579 *Validierung von COCOSYS im Programmsystem AC*<sup>2</sup> durchgeführt worden sind, kann dem CCI-Modul in COCOSYS in Anbetracht des internationalen Wissensstandes ein ausreichend guter Validierungsstand attestiert werden. Aus den nachfolgend genannten Aktivitäten der GRS zu MCCI kann zurzeit kein konkreter Bedarf von prinzipiellen Modellverbesserungen in COCOSYS/CCI abgeleitet werden. Verbesserungen am Modellstand erfolgten daher vor allem auf der Basis von Rückflüssen aus einzelnen Anwendungen, in denen Einzelprobleme unter bestimmten Randbedingungen aufgetreten waren. In Anbetracht der bestehenden Unsicherheiten wurden Modellverbesserungen vor allem zur Handhabung und zur verbesserten Abbildung realer Verhältnisse durchgeführt.

Diese Bewertung stützt sich auf folgende Sachverhalte:

- Als ein wichtiges Ergebnis der in RS1544 mit dem CCI-Modul durchgeführten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse konnte festgehalten werden, dass für zwei untersuchte Experimente (OECD-CCI-3 bei ANL und MOCKA 5.7 bei KIT) jeweils alle 100 Rechnungen mit breit angelegter Parametervariation ohne Programmabbruch durchgelaufen sind, was die Robustheit des CCI-Hauptmoduls von COCOSYS demonstriert /REI 19/.
- Ferner wurde basierend auf den genannten Sensitivitätsanalysen zum CCI-Modul in RS1544 festgestellt, dass insgesamt 5 unsichere Eingabeparameter einen dominanten Beitrag zur Unsicherheit der COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse haben /REI 19/: Die drei effektiven Wärmeübergangskoeffizienten zur unteren, seitlichen und oberen Grenzfläche des Schmelzepools sowie die Zerstörungstemperatur und Zerstörungsenthalpie des Betons.

- Mit der Zielsetzung, einen universellen Ansatz für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter zu MCCI im CCI-Modul zu erproben, wurde im Rahmen von RS1544 das Experiment VBES-U5 zu MCCI, das in der VULCANO-Testanlage (Teil der PLINIUS-Testplattform, die Versuche VB sind der Untersuchung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung gewidmet) bei CEA Cadarache, Frankreich, durchgeführt wurde, analysiert. In den VBES-Versuchen der VB-Testserie werden spezielle Randbedingungen untersucht, im Unterschied zu den VB-Hauptversuchen, die für vermutete Standardbedingungen in Reaktoren ausgelegt sind. Hauptziel des VBES-U5-Tests war, MCCI mit oxidischer Schmelze und silikatischem Beton in einer 2D-Konfiguration sowie das daraus resultierende Verhältnis von axialer zu radialer Betonerosion zu untersuchen und dabei eine anfängliche Krustenbildung möglichst zu vermeiden. Mit dem CCI-Modul wurden auch hier ausreichende Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen des VBES-U5-Tests erzielt /BAK 18/. Damit konnte der universelle Ansatz für noch unsichere Modellparameter validiert werden. Dieser hatte zuvor in Nachrechnungen von anderen MCCI-Versuchen in anderen Anlagen mit silikatischem Beton bereits gute Näherungen erbracht.
- Im Rahmen des EU-SAFEST-Projektes (Severe Accident Facilities for European Safety Targets) wurden MCCI-Versuche zur Untersuchung der Wechselwirkung von oxidischer Schmelze mit basaltischem Beton sowohl bei Framatome Erlangen als auch beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) durchgeführt. Dieser Betontyp, bei dem die silikatischen Aggregate einem Basaltgestein entstammen, ist aufgrund seiner Verwendung in den Reaktoranlagen am Standort Fukushima Daiichi ins Blickfeld der Forschung zu MCCI geraten /NEA 17b/. Im Projekt RS1579 wurden für beide Versuche (bei Framatome und bei KIT) Nachrechnungen mit COCOSYS/CCI durchgeführt /BAK 20/. Auch hier ist der zuvor für silikatische Betone validierte Ansatz für die unsicheren Modellparameter verwendet worden. Allerdings zeigt der basaltische Beton in den Versuchen aufgrund stärkerer axialer Erosion im Vergleich zur seitlichen Erosion ein abweichendes Verhalten gegenüber der Codesimulation, welche sich an der Validierung von Experimenten mit silikatischem Beton orientiert. Die experimentelle Datenlage zu der in den Versuchen mit basaltischem Beton beobachteten Tendenz (stärkere axiale Erosionstiefe im Vergleich zur seitlichen) ist derzeit spärlich und lässt noch keine dedizierte Modellverbesserung bzw. belastbare Empfehlung an Nutzer zu. Der Anwender sollte verbleibende Unsicherheiten in der Prognose von mehrdimensionalen Erosionsprofilen durch entsprechende Parametervariation der unsicheren Parameter im Eingabedatensatz berücksichtigen.
Die GRS beteiligte sich mit COCOSYS/CCI im Rahmen des OECD-Projektes ARC-F (Analysis of Information from Reactor Buildings and Containment Vessels of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station) an einem gemeinsamen Rechenfall zum MCCI-Vorgang in der Anlage Fukushima, Block 1. Es wird zurzeit davon ausgegangen, dass dort nach Versagen des RDB die Kernschmelze für ca. 10 Tage ohne Kühlung mit Wasser mit den Betonstrukturen langzeitig interagiert haben muss. Es zeigt sich, dass alle beigetragenen Rechnungen mit den Codes ASTEC, COCOSYS, MELCOR, TOLBIAC-ICB, SOCRAT, SAMPSON unter Verwendung ähnlicher Ansätze und Annahmen, die für diesen Benchmark verabredet waren, einen ähnlichen kontinuierlichen Fortschritt der Betonzerstörung in dem betrachteten Zeitraum prognostizieren. Eine Variationsrechnung der GRS, in welcher der für silikatische Betone validierte Parameteransatz der GRS für die offenen Modellparameter verwendet wurde, zeigt allerdings, dass aufgrund der Annahme erhöhter Betonzerstörungstemperatur auch ein Stopp des Betonzerstörungsfortgangs unter den sonstigen Annahmen des Benchmarks nach ca. 30 h möglich sein könnte. Die konzertierte Aktivität zu MCCI im Rahmen von ARC-F soll mit weiteren Untersuchungen fortgesetzt werden. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf mögliche Bedingungen, unter denen ein Stoppen der Erosion durch die Rechencodes prognostiziert werden könnte. Der GRS-Beitrag zeigt, dass die Unsicherheit der in den Modellen angesetzten Betonzerstörungstemperatur zur Unsicherheit in der Prognose der fortschreitenden Erosion beiträgt. Die GRS-Ergebnisse sowie die der anderen Teilnehmer werden im März 2022 in einem Beitrag auf der Konferenz NURETH-19 in Brüssel publiziert.

## 5.1.2 Durchgeführte Verbesserungen am Modellstand

Die Anbindung zwischen dem MCCI-Modul CCI und COCOSYS ist im Hinblick auf die Zeitschrittsteuerung (Synchronisation) korrigiert worden. In einigen älteren Datensätzen war die Hierarchie der Module fälschlicherweise so definiert, dass das Thermohydraulikmodul effektiv den Zeitschritt nicht reduzieren konnte, z. B. im Fall von Transienten in Quellen und/oder Senken für die Lösung der thermohydraulischen Bilanzgleichungen in der Atmosphäre. Die korrekte Synchronisationshierarchie im Eingabedatensatz lautet: THY: Level 1; CCI: Level 2; Regel: MIN\_A, vgl. User Manual /ARN 19/. Probleme mit einer falsch spezifizierten Synchronisationshierarchie machten sich zuvor in einzelnen CCI-Rechenfällen der in RS1544 durchgeführten Unsicherheitsanalyse bemerkbar. Das Coding in COCOSYS (V3, V2.4v5) wurde entsprechend korrigiert. Es zeigten sich abschließend keine nennenswerten Einflüsse auf die physikalischen Rechenergebnisse selbst, u. U. kann eine Zeitschrittbegrenzung im Eingabedatensatz notwendig werden. Einzelne Korrekturen am CCI-Modul wurden aufgrund der Auswertung von Rückflüssen von Anwendern durchgeführt. Die Verbesserungen beinhalten u. a. Korrekturen von ausgegebenen Rechendaten, die Ergänzung der Prüfung auf Konsistenz zwischen Codeversion und Materialdatenbank, die Umstellung auf MPI-basierte Kommunikation zwischen den COCOSYS-Modulen und Korrekturen für die Linux-Version. Alle Korrekturen können in der Historie im Projektarchiv (Repository) unter GitLab nachverfolgt werden.

Die Restart-Fähigkeit des CCI-Moduls ist dahingehend erweitert worden, dass jetzt für Restart-Zeitpunkte, zu denen die Schmelze-Beton-Wechselwirkung noch nicht begonnen hat, das CCI-Modul komplett initialisiert wird. Damit können im Datensatz durch den Anwender vor Beginn der Schmelze-Beton-Wechselwirkung die Modellparameter vollständig geändert werden. Dies erleichtert Variationsrechnungen für die Simulation des Unfallablaufes in Anlagenrechnungen mit Schmelze-Beton-Wechselwirkung, bei denen der Rechenzeitbedarf bis zum RDB-Versagen bereits beträchtlich ist.

# 5.2 Modellentwicklung zur Berücksichtigung der Phänomene nach Schmelzeeintrag in Wasser

In diesem Arbeitspunkt wurden die Arbeiten für die Integration einer Diagnosemöglichkeit in COCOSYS zur Kühlbarkeit einer gefluteten Schüttbettkonfiguration als Folge eines Schmelzeeintrags in eine Wasservorlage fortgesetzt.

Zur Untersuchung der Kühlbarkeit eines ausgebildeten Schüttbettes unter Annahme radialsymmetrischer Bedingungen steht das am IKE entwickelte Rechenprogramm COCOMO /BUC 16/ zur Verfügung.

Erste Arbeiten der GRS zur Simulation der Kühlung einer Schüttung von Schmelzepartikeln mit dem Rechenprogramm COCOMO wurden bereits im Vorhaben RS1532 durchgeführt /SPE 17/. Mit der in RS1532 abgeleiteten Methode, Dryout-Wärmestromdichten für Schüttbetten mit COCOMO zu bestimmen, wurden in RS1532 für bestimmte Eingabeparameter parametrische Variationsrechnungen durchgeführt, um den Einfluss der einzelnen Parameter auf die maximal abführbare Wärmestromdichte eines Schüttbettes zu untersuchen.

Da bei der Simulation mit COCOMO ein hoher Rechenzeitbedarf besteht, was für eine Kopplung mit COCOSYS ungeeignet ist, soll in COCOSYS ein eigenständiges, schnell laufendes Simulationsmodell (bzw. Korrelation) entwickelt werden, mit dem die maximal abführbare Wärmestromdichte eines mehrdimensionalen Schüttbettes mit ausreichender Genauigkeit angenähert werden kann.

Ähnliche Ansätze werden auch von anderen Instituten (z. B. KTH, Schweden /CHE 19/) erprobt, was die Zweckmäßigkeit des von der GRS in RS1532 vorgeschlagenen Ansatzes bestätigt.

## 5.2.1 Einschätzung des Einflusses mehrdimensionaler Effekte

Vertikale Schüttungen in Zylindergeometrie mit eindimensionaler Zuströmung des Wassers (von oben / von unten) sind in Bezug auf die Kühlbarkeit experimentell eingehend untersucht, siehe z. B. /LEI 17/. Die Betrachtung einer Schüttbettkonfiguration mit eindimensionaler Zuströmung (s. Abb. 5.1, (a)) ist sinnvoll, um die Effizienz der mehrdimensionalen Effekte (s. Abb. 5.1, (b)) gegenüber der 1D-Situation einzuschätzen. Für die 1D-Situation kann die Dryout-Wärmestromdichte durch ein einfaches empirisches Modell angenähert werden, das in der Literatur umfassend diskutiert ist: Es handelt sich um das Lipinski-Modell /LIP 82/ zur Berechnung der Dryout-Wärmestromdichte basierend auf der Betrachtung eines eindimensionalen homogenen Schüttbettes. Das Modell umfasst Effekte sowohl von laminaren als auch von turbulenten Strömungsbedingungen, der Zweiphasenreibung und der Kapillarkraft.



 Abb. 5.1 Geometrische Konfiguration eines Schüttbettes (a) mit eindimensionaler Zuströmung und einheitlicher Schüttbetthöhe (zylinderförmig), und eines Schüttbettes (b) mit mehrdimensionaler Zuströmung und variabler Schüttbetthöhe (kegelförmig) /CHE 19/

Die Dryout-Wärmestromdichte  $q_{1D}^{"}$  aus eindimensionaler Betrachtung ergibt sich im Lipinski-Modell zu:

$$q_{1D}^{''} = \left(\frac{q_T^4}{4q_L^2} + q_T^2\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{q_T^2}{4q_L}$$
(5.1)

wobei  $q_L$  die Wärmestromdichte im laminaren Grenzfall und  $q_T$  die Wärmestromdichte im turbulenten Grenzfall repräsentieren:

$$q_{L} = \frac{(\rho_{l} - \rho_{g})gd^{2}\varepsilon^{3}h_{lv}}{150(1 - \varepsilon)^{2}} \left(\frac{\mu_{g}}{(1 - s)^{3}}\frac{1}{\rho_{g}} + \frac{\mu_{l}}{\rho_{l}s^{3}}\right)^{-1} \left(1 + \frac{\lambda_{c}}{L}\right)$$
(5.2)

$$q_T = \left[\frac{(\rho_l - \rho_g)gd\varepsilon^3 h_{l\nu}^2}{1,75(1 - \varepsilon)} \left(\frac{1}{\rho_g(1 - s)^3} + \frac{1}{\rho_l s^3}\right)^{-1} \left(1 + \frac{\lambda_c}{L}\right)\right]^{1/2}$$
(5.3)

Die Hauptparameter dieses Modells umfassen Partikeldurchmesser d, Porosität  $\varepsilon$ , Schüttbetthöhe L und Kühlmitteleigenschaften in flüssiger und gasförmiger Phase (Dichten  $\rho_l$ ,  $\rho_g$ , Viskositäten  $\mu_l$ ,  $\mu_g$ , Verdampfungswärme  $h_{l\nu}$ ) und es wird vorausgesetzt, dass sich Wasser und Schmelzepartikel homogen auf Sättigungstemperatur zum Umgebungsdruck befinden.  $\lambda_c$  beschreibt die Höhe, bis zu der das Wasser entgegen der Schwerkraft aufgrund der Kapillarkräfte des trockenen Schüttbetts in dieses hineingezogen würde.

Zur Bewertung des Einflusses von möglicher mehrdimensionaler Zuströmung des Wasser, z. B. bei Schüttbetten in Kegelgeometrie, wurde in /CHE 19/ der Faktor  $f_s$  eingeführt, mit dem die maximal abführbare Wärmestromdichte eines analogen Schüttbettes mit 1D-Zuströmung multipliziert werden muss, um die maximal abführbare Wärmestromdichte eines Schüttbettes mit mehrdimensionaler Zuströmung anzunähern.

Der Faktor  $f_s$  könnte durch Division der z. B. von COCOMO in zweidimensionaler Geometrie (2D) berechneten Wärmestromdichte eines mehrdimensionalen Schüttbettes  $q_{2D}^{"}$ durch die (bekannte) Wärmestromdichte  $q_{1D}^{"}$  eines analogen eindimensionalen (1D) Schüttbettes angenähert werden:

$$f_s = \frac{q_{2D}}{q_{1D}^{"}} \tag{5.4}$$

Die Analysen in /CHE 19/ zeigen, dass  $f_s$  prinzipiell größer 1, allerdings keine Konstante ist, sondern für die dort betrachteten Rechenfälle zwischen ca. 1,1 und 1,8 variiert. Somit ist es nicht möglich,  $q_{2D}^{"}$  auf der Basis von (5.4) durch  $f_s \cdot q_{1D}^{"}$  unter Verwendung eines konstanten  $f_s$  anzunähern.

Im Folgenden wird von axialsymmetrischen Bedingungen ausgegangen, für die sich in /SPE 17/ nahezu übereinstimmende Ergebnisse in 2D- und 3D-Rechnungen mit COCOMO ergeben hatten. Der 3D-Effekt kann gegenüber 2D allerdings nicht vernachlässigt werden, sobald ausgeprägte 3D-Effekte relevant sind. Ähnlich wie der Effekt von zweidimensionalen Einflüssen gegenüber der 1D-Konfiguration ( $f_s = 1,1...1,8$ ) sollte ein Einfluss von 3D gegenüber der 2D-Konfiguration für nicht-axialsymmetrische Probleme erwartet werden.

Eine simple Skalierung der mit der 1D-Korrelation (5.1) errechneten Wärmestromdichten mittels (5.4) zur Dryout-Wärmestromdichte in 2D-Konfiguration  $q_{2D}^{*}$  mit einem konstanten Faktor  $f_s$  ist also ohne Berücksichtigung der spezifischen 2D-Effekte nur ungenau. Daher wird nachfolgend der Ansatz verfolgt, zunächst eine Datenbank von Dryout-Wärmestromdichten in 2D-Geometrie auf der Basis von COCOMO-Rechnungen zu erzeugen. Dafür wird eine Zusammenstellung von Eingabeparametern und deren Parameterbereichen für ein mehrdimensionales Schüttbett (s. Abb. 5.1, (b)) benötigt. Auf dieser Basis kann dann eine Matrix von Variationsrechnungen mit dem Rechenprogramm COCOMO erstellt werden.

#### 5.2.2 Erstellung einer Datenmatrix für die Dryout-Leistungsdichte in 2D

Zu Beginn der Arbeiten wurde der GRS vom Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart zuerst eine aktuelle Version des Rechenprogramms COCOMO bereitgestellt. Diese Version wurde von der GRS auf eigener Hardware erfolgreich installiert und anhand einer Testrechnung problemlos überprüft. Auch die Ergebnisse der im Vorläufervorhaben durchgeführten Rechnungen konnten mit der aktuellen COCOMO-3D-Version fehlerfrei durchgeführt werden. Die Eingabeparameter wurden mit Experten vom IKE schrittweise diskutiert und die Visualisierung der Ergebnisse mithilfe der COCOMO-Benutzeroberfläche demonstriert. Weiterhin wurde mit dem IKE die Berechnung und Auswertung des zeitlichen Verlaufs der maximal abführbaren Wärmeleistung eines Schüttbettes in COCOMO diskutiert.



Abb. 5.2 COCOMO-Rechengitter für den gerechneten Referenzfall einer Schüttbettkonfiguration, rot: Schüttbett, dunkelblau: Wasserpool, hellblau: Gasraum

Nachfolgend wurde von der GRS mit Unterstützung durch das IKE ein Referenz-Datensatz für eine Schüttbettkonfiguration erstellt. Zur Bestimmung der maximal abführbaren Wärmeleistung wurde mit COCOMO ein Referenzfall gerechnet, bei dem die spezifische Wärmeleistung von 300 W/kg (bezogen auf die gesamte Partikelmasse des Schüttbettes) bis auf 700 W/kg innerhalb eines Zeitraums von 5.000 s konstant erhöht wird. Wenn im Schüttbett eine Trockenstelle auftritt und die Partikeltemperaturen die lokale Sättigungstemperatur erreichen, wird die Rechnung beendet und die Leistung zu diesem Zeitpunkt als maximal abführbare Leistung abgespeichert. Das für die Rechnung mit COCOMO verwendete Rechengitter ist in Abb. 5.2 dargestellt, aus der sich auch die modellierte geometrische Konfiguration erkennen lässt.

Als Voraussetzung für die Durchführung einer Vielzahl parametrischer Variationsrechnungen wurde zunächst eine Liste mit potenziell wichtigen Einflussparametern für die Charakterisierung der Schüttbettkonfiguration erstellt. Diese Liste enthält Daten zur Parameteridentifikation, Unsicherheitsbereiche (Wertebereiche) sowie Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen, die auf Auswertungen des aktuellen Standes der Technik, empirischen Erkenntnissen aus früheren Untersuchungen sowie Expertenschätzungen basieren. Als wesentliche Einflussparameter wurden die in Tab. 5.1 aufgeführten Parameter Systemdruck, Gesamtmasse der Kernschmelze, Partikeldurchmesser, Porosität und geometrische Parameter (Böschungswinkel, Radius der Reaktorgrube) variiert. Außerdem wurden auch Stoffdaten der Schmelzepartikel wie Schmelzedichte, Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit berücksichtigt.

Parameter	Beschreibung	Einheit	Wertebereich	Verteilungsfunktion	
P <sub>sys</sub>	Systemdruck	bar	1,1 – 5,0	Normal	
Mcorium	Gesamtmasse der Kernschmelze	kg	10.000 - 440.000	Gleichverteilt	
Porosität	Porosität des Schütt- betts	%	20 - 60	Normal	
DPartikel	Mittlerer Partikeldurch- messer	m	0,001 – 0,005	Gleichverteilt	
Winkel	Böschungswinkel	Grad	0 – 45	Gleichverteilt	
R <sub>cav</sub>	Radius der Reak- torgrube	m	2,5 – 3,5	Gleichverteilt	
Rho	Schmelzedichte	kg/m³	6.500 - 8.000	Gleichverteilt	
Cp	Wärmekapazität	J/(kg K)	600 – 835	Gleichverteilt	
Lambda	Wärmeleitfähigkeit	W/(m K)	1 – 8,5	Gleichverteilt	

Tab. 5.1Einflussparameter für die Simulation der Schüttbettkonfiguration mit<br/>COCOMO

Die Parameterkombinationen wurden mit Hilfe der SUSA-Software /KLO 19/ nach dem Zufallsprinzip und unter Verwendung der in Tab. 5.1 definierten Wertebereiche und Verteilungsfunktionen erzeugt. Sofern für einzelne Parameter keine Hinweise auf spezielle Häufung der zu erwartenden Werte in bestimmten Wertebereichen erkennbar waren, wurde eine Gleichverteilung unterstellt. Dies bedeutet, dass dieser Parameterwert innerhalb des durch Minimum und Maximum gekennzeichneten Wertebereichs als gleich wahrscheinlich angenommen wurde.

Ferner wurden 100 Datensätze erzeugt und anschließend 100 Variationsrechnungen mit COCOMO durchgeführt. Hier soll bemerkt werden, dass alle 100 Rechnungen mit breit angelegter Parametervariation ohne Programmabbruch durchgelaufen sind.

Als wesentliches Ergebnis wurde für jede Variationsrechnung die maximal aus der Schüttung abführbare spezifische Wärmestromdichte herangezogen. In Tab. 5.2 sind beispielhaft 20 Werte aus 100 Variationsrechnungen für die maximal abführbare Wärmestromdichte jeweils in Abhängigkeit der aufgeführten Einflussparametern eines mehrdimensionalen Schüttbettes dargestellt.

Aus der kumulativen Verteilung der Rechenfälle bezogen auf die Dryout-Leistungsdichte in Abb. 5.3 kann der Anteil der Rechenfälle abgelesen werden, für den mindestens eine bestimmte Dryout-Leistung simuliert wurde. Z. B. wurde in 40 % der errechneten Fälle eine Dryout-Leistungsdichte von mindestens ca. 200 W/kg gerechnet.

P <sub>sys</sub> , Pa	M <sub>corium</sub> , kg	Porosität, -	d <sub>Partikel</sub> , m	Winkel, °deg	R <sub>cav</sub> , m	<i>q</i> <sub>2D</sub> , ₩/kg
389771,56	254814,9	0,442	0,0012	44,42	3,10	128,0
241864,47	101623,4	0,297	0,0014	17,77	2,85	103,0
179759,50	29820,6	0,405	0,0045	1,47	3,39	373,0
306823,72	293660,6	0,289	0,0030	27,73	3,18	106,0
229164,28	133828,2	0,495	0,0012	6,56	2,83	277,0
218811,94	54980,0	0,262	0,0040	39,74	3,36	155,0
202976,80	371018,8	0,427	0,0011	30,95	2,66	93,0
164674,31	371388,1	0,306	0,0049	28,18	2,69	82,0
130073,94	256949,7	0,319	0,0019	4,93	2,85	88,5
196978,30	172431,5	0,429	0,0042	35,46	3,10	330,0
399420,25	344211,8	0,221	0,0037	18,86	3,16	71,0
307727,84	38480,7	0,297	0,0049	30,07	3,37	363,0
347412,44	184986,5	0,368	0,0049	13,45	2,73	250,0
191732,66	286715,0	0,403	0,0041	24,33	3,32	228,0
246353,09	368262,7	0,254	0,0049	36,00	3,34	95,0
341453,50	386426,3	0,219	0,0016	22,09	2,98	59,5
269560,62	384691,3	0,298	0,0035	39,23	3,23	102,0
288023,28	282317,0	0,427	0,0042	30,96	2,67	187,0
203171,94	150280,8	0,224	0,0018	8,98	2,61	61,0
272587,12	376689,9	0,354	0,0038	2,51	3,03	128,0

Tab. 5.2Dryout-Wärmestromdichte q"2D in Abhängigkeit aufgeführter Einflusspara-<br/>meter für 20 aus 100 Variationsrechnungen mit COCOMO-3D



Abb. 5.3 Kumulative Verteilungsfunktion der COCOMO-Rechenfälle bezogen auf die spezifische Dryout-Wärmestromdichte

## 5.2.3 Sensitivität der Parameter auf die Dryout-Leistungsdichte

Im nächsten Schritt wurden die vorliegenden Ergebnisse der mit COCOMO durchgeführten Variationsrechnungen für die maximal abführbare Wärmestromdichte eines mehrdimensionales Schüttbettes im Hinblick auf die sensitiven Parameter ausgewertet.

Abb. 5.4 zeigt, dass unter Verwendung der Regressionsansätze nach Pearson (als Maß für den Grad eines linearen Zusammenhangs), Spearman (als Maß für den Zusammenhang zwischen Ergebnis und Parameter ohne Annahme eines linearen Zusammenhangs) und der partiellen Korrelation (als Maß für den linearen Zusammenhang unter Eliminierung der Einflüsse der jeweils anderen Parameter) in der mit COCOMO errechneten Datenmatrix die Parameter Schmelzemasse, Porosität und Partikeldurchmesser die größten Einflüsse auf die Kühlbarkeit haben. Mit Zunahme der Porosität und des Partikeldurchmessers wird die Dryout-Leistungsdichte, d. h. die maximal aus dem Schüttbett extrahierbare Leistungsdichte, erhöht. Die Masse hat starken Einfluss auf die Höhe des Schüttbettes und mit zunehmender Höhe nimmt die Dryout-Wärmestromdichte ab. Auch der Winkel und die verfügbare Fläche des Ausbreitungsraums

für das Schüttbett haben Einfluss auf die Höhe. Zu einem ähnlichen Ergebnis kommt eine Studie in /BUC 17/.



Abb. 5.4 Auswertung der Korrelationskoeffizienten für die Dryout-Wärmestromdichte in Abhängigkeit von Schüttbettparametern

Für die weitere Entwicklung eines Diagnoseverfahrens sollen geeignete Interpolationsverfahren eingesetzt werden. Für das Verfahren sollen die einflussreichsten Parameter in der Abb. 5.4 als unabhängige Größen berücksichtigt werden. Die Beschränkung auf drei unabhängige Parameter hätte Vorteile, da Interpolationen in einem Raum mit mehr als drei unabhängigen Größen Unsicherheiten durch die Komplexität der numerischen Interpolationstechniken mit sich bringen. In RS1532 wurde bereits gezeigt, dass die resultierende Schüttbetthöhe einen maßgeblichen Einfluss auf die Dryout-Leistungsdichte hat. Die drei unabhängigen Parameter Schmelzemasse, Radius der Reaktorgrube, Böschungswinkel haben alle direkten Einfluss auf die sich ergebende Schüttbetthöhe. So liegt es nahe, die Schüttbetthöhe H neben den Schüttbettparametern Porosität und Partikeldurchmesser als unabhängige Variable (anstelle der Parameter Schmelzemasse, Radius der Reaktorgrube, Böschungswinkel) für eine Interpolation in den COCOMO-Ergebnissen zu verwenden.

Die Arbeiten zum Einbau eines Diagnoseverfahrens in COCOSYS (basierend auf Interpolation der Dryout-Wärmestromdichte in einem mehrdimensionalen Parameterraum, aufgespannt durch COCOMO-Rechenergebnisse) sollen im Nachfolgevorhaben erfolgen.

#### 5.3 Implementierung eines Core-Catcher-Modells

In Reaktoren der Generation III+, wie z. B. dem EPR oder dem WWER-1200, kommt dem Ex-Vessel-Core-Catcher als generisches Design-Merkmal eine wichtige Bedeutung für das Sicherheitskonzept zur Beherrschung von Unfällen zu. Ein Ex-Vessel-Core-Catcher ist ein passives System zur Stabilisierung und langfristigen Kühlung einer Kernschmelze im Containment. Nach einem Versagen des RDB soll der Core-Catcher die gesamte Kernschmelze (Brennstoff und Strukturmaterialien) auffangen, zur verbesserten Kühlbarkeit konditionieren und so eine langfristige Interaktion der Schmelze mit den Betonstrukturen im Containment verhindern. Das entwickelte Modell ist flexibel angelegt worden, sodass verschiedene Designs von Core-Catchern gab es in WWER-1000-Reaktoren in China (Tianwan) und Indien (Kudankulam). In den WWER-Anlagen kommen die in Abb. 5.5 gezeigten tiegelähnlichen Core-Catcher zum Einsatz. Ein unterschiedlicher Ansatz wird beim EPR verfolgt, der einen Core-Catcher mit einer großflächigen Kammer für die flache Ausbreitung der Schmelze vor Flutung dieser vorsieht (Abb. 5.6).

Beiden Konzepten gemeinsam ist, dass der Core-Catcher innen mit einem sogenannten Opfermaterial ausgekleidet ist und von außen mit Wasser gekühlt wird. Durch einen solchen Aufbau werden verschiedene Zielsetzungen verfolgt:

- Überführung der Nachzerfallswärmeleistung der Kernschmelze in Latentwärme beim Aufschmelzen des Opfermaterials
- Einbringung von Sauerstoff in die Schmelze f
  ür die Oxidation von metallischen Bestandteilen wie Zr
- Verdünnung der Kernschmelze mit geschmolzenem Opfermaterial, und damit einhergehend Volumenvergrößerung und vergrößertes Oberfläche-zu-Volumenverhältnis, sowie eine Schichtungsumkehr, sodass die anfänglich dichtere Oxidschmelze langfristig die Metallschmelze von oben bedeckt. Die Schichtungsumkehr ist erwünscht, sodass ein direkter Kontakt zwischen Metallschicht und Wasser vermieden wird.



Abb. 5.5 Prinzipskizze eines Core-Catchers beim WWER-1200 /ZVO 19/



Abb. 5.6 Prinzipskizze des Core-Catchers beim EPR /FIS 10/

## 5.3.1 Vereinfachende Annahmen

Insgesamt soll das Core-Catcher-Modell im Vergleich zu anderen Modellen in COCOSYS eine ausgewogene Detaillierungstiefe aufweisen. Dies erforderte eine Reihe von Annahmen und Vereinfachungen, um die Modellierung nicht zu komplex zu gestalten:

- Für die Interaktion zwischen Kernschmelze und Opfermaterial wird das Aufschmelzmodell des CCI-Modells in COCOSYS benutzt. Der gesamte Wärmestrom, der in das Opfermaterial abgegeben wird, wird für die Berechnung des Aufschmelzens verwendet. Der Nutzer muss die empirischen Modellparameter Schmelztemperatur und Schmelzenthalpie vorgeben.
- Der Pool kann in zwei Schichten (Oxid und Metall) dargestellt werden. Die Reihenfolge der Schichtung und eine mögliche Schichtungsumkehr ergeben sich durch die relativen Dichten zueinander.
- Der Wärmeübergang von der heißen Schmelze an die gekühlten Core-Catcher-Platten setzt erst dann ein, wenn ein direkter Kontakt zwischen Kernschmelze und Platte besteht, d. h. sobald die Schmelzfront bis zur Seiten- oder Bodenplatte vorgedrungen ist. Die Kontaktfläche und der übertragene Wärmestrom nehmen dann mit der Zeit zu.
- Im Modell können die gekühlten Platten in mehrere eindimensionale Wärmeleitstrukturen in COCOSYS unterteilt werden. Wenn es einen direkten Kontakt zwischen Kernschmelze und einer dieser Strukturen gibt, wird der übertragene Wärmestrom stets auf die gesamte Wärmestruktur innenseitig übertragen, auch wenn die Kontaktfläche nur klein ist. In Fällen, wo diese Vereinfachung nicht angemessen erscheint, kann durch die weitere Unterteilung der Core-Catcher-Platten in 1D-Strukturen eine ausgewogenere Darstellung erzielt werden.
- Zum Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und Core-Catcher-Platte nach Aufschmelzen des gesamten Opfermaterials gibt es nicht viele Untersuchungen. Solange keine besseren Daten verfügbar sind, wird für diesen Wärmeübergang ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient angesetzt, der in der Eingabedatei vorzugeben ist.
- Für den Wärmeübergang auf der gekühlten Seite der Core-Catcher-Platten zum Wasser hin kann erzwungene oder Naturkonvektion bis hin zum Blasensieden angenommen werden. Da ingenieurmäßige Korrelationen für die tatsächliche Geome-

trie der Strömungskanäle und der vorliegenden Flow-Regimes in der Regel nicht verfügbar sind, kann der Nutzer als Alternative einen konstanten Wärmeübergangskoeffizient vorgeben. Eine mechanistische Auswertung des Phänomens könnte über eine 3D-Rechnung mit einem CFD-Code erfolgen, welches aber im Hinblick auf COCOSYS kein ausgewogenes Modellwerkzeug ist und im Bereich der Zweiphasen-Strömung andere verbleibende Unsicherheiten aufweist.

## 5.3.2 Modelldetails

Die Interaktion der Kernschmelze im Core-Catcher mit dem Opfermaterial wird mit dem CCI-Modell von COCOSYS abgebildet. In diesem Modell wird in einer COCOSYS-Zone ein CCI-Pool definiert (Zone 2 im Beispiel der Abb. 5.7). Das Volumen der Kühlkanäle wird durch das freie Volumen der Zone 1 repräsentiert. Dieses kann zu einem großen Teil, oder auch ganz, unter Berücksichtigung der neuen ATM\_FULL-Strömungsverbindungen geflutet sein. Über ATM\_FULL-Strömungsverbindungen können COCOSYS-Zonen zum Teil oder auch ganz geflutet werden. Sofern eine Strömungsverbindung im oberen Bereich zwischen Zone 1 und Zone 2 definiert ist, kann das Wasser auch direkt die Schmelze fluten. Unter Verwendung des CCI-Modells für die Kernschmelze/Opfermaterial-Wechselwirkung kann für die anfängliche Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial eine Schar von Punkten ( $r_i$ ,  $z_i$ ) vorgegeben werden (Abb. 5.8). Unter der Annahme axialer Symmetrie wird so eine axialsymmetrische 2D-Fläche definiert.



Abb. 5.7 Schematischer Überblick über beteiligte Einheiten im Core-Catcher-Modell



**Abb. 5.8** Definition der inneren Schnittstelle zwischen Kernschmelze und Opfermaterial in Form einer 2D-Punkteschar (r, z)

Die Core-Catcher-Platten selbst werden durch einen Satz von COCOSYS-Wärmeleitstrukturen repräsentiert, die eine axialsymmetrische Geometrie besitzen. Diese müssen streng horizontal oder vertikal sein (Abb. 5.9). Das Volumen des Opfermaterials ist dann als Volumen zwischen den axialsymmetrischen Profilen der Punkteschar für die innere Fläche des Opfermaterials (wie z. B. in Abb. 5.8) und den axialsymmetrischen Core-Catcher-Platten gegeben. Das allgemeine Konzept ist in Abb. 5.7 (ohne Segmentierung der Platten) dargestellt. Unter Verwendung der Beispielkoordinatenschar der Abb. 5.8 und einer horizontalen (z = -0.8 m) und einer vertikalen (r = 2.85 m) Core-Catcher-Platte, die den COCOSYS-Wärmeleitstrukturen STR1 und STR2 zugeordnet ist, resultiert die in Abb. 5.10 dargestellte geometrische Anordnung des Opfermaterials.



Abb. 5.9 Axialsymmetrische Segmentierung der Core-Catcher-Seiten- und -Bodenplatte





In diesem Konzept sind folgende Wärmeübergänge von Bedeutung:

- Wärmeübergang von der Kernschmelze an das Opfermaterial: Sofern das Opfermaterial betonähnlich ist (wie z. B. beim EPR-Konzept) wird ein ähnlicher Wärmeübergangsmechanismus, wie in vielen MCCI-Experimenten untersucht, erwartet. In Experimenten wurden bislang verschiedene Betontypen verwendet: silikatischer, basaltischer, Kalk-/Sandstein-Beton sowie serpentinitischer Beton. Aus den MCCI-Experimenten abgeleitete Wärmeübergangskoeffizienten sollen nur in Verbindung mit zuvor gemachten Annahmen über die Zerstörungstemperatur T<sub>dec</sub> des Betons für die Ermittlung der Wärmeübergangskoeffizienten verwendet werden. Unter der Annahme von  $T_{dec} = 1.800$  K liegen typische Wärmeübergangskoeffizienten im Bereich mehrerer 100 W/(m<sup>2</sup> K), z. B. 300 W/(m<sup>2</sup> K) für den Wärmeübergang am Boden und 1.600 W/(m<sup>2</sup> K) für den Wärmeübergang an der Seitenwand bei Oxidschmelzen in einer Grube aus silikatischem Beton und vermutetem Einfluss einer stabilen Schicht erstarrten Materials am Boden. Diese Werte wurden im Rahmen einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für das CCI-Modul in COCOSYS ermittelt /SPE 18/. Wenn das Opfermaterial deutlich unterschiedlich zu einem bislang untersuchten Beton ist, z. B. wenn es keine Gase enthält, die beim Aufschmelzen freigesetzt werden können, kann nicht unbedingt der gleiche Wärmeübergangskoeffizient wie mit Beton angenommen werden. Hier liegt eine beträchtliche Unsicherheit vor; aus diesem Grund bleibt es vorerst dem Anwender überlassen, nach seiner Maßgabe den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Schmelze und Opfermaterial im CCI-Input-Teil der COCOSYS-Eingabedatei vorzugeben.
- Wärmeübergang von der oberen freien Oberfläche der Schmelze: In Abb. 5.7 handelt es sich hierbei um den Wärmeübergang von der Kernschmelze nach oben zur freien Oberfläche (und dann zur Atmosphäre in Zone 2 bzw. an das die Schmelze überdeckende Wasser sowie an die oberen Strukturen in Zone 2). Hierbei kommt dasselbe Modell wie in der gewöhnlichen CCI-Rechnung zum Einsatz, d. h., freie oder erzwungene Strömung in der Atmosphäre und Strahlung unter trockenen Bedingungen bzw. ein freies Behältersieden unter gefluteten Bedingungen werden berücksichtigt.
- Wärmeübergang von der Kernschmelze an die Core-Catcher-Platten: In Abb. 5.7 handelt es sich hierbei um den Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und den Strukturen STR1 und/oder STR2, nachdem ein direkter Kontakt zwischen Kernschmelze und STR1 bzw. STR2 hergestellt ist. Dieser direkte Kontakt wird

vom CCI-Modul berechnet, sobald die Schmelzfront zwischen Kernschmelze und Opfermaterial an die Begrenzung durch die Core-Catcher-Platte vorgedrungen ist. Vorher wird in einer vereinfachenden Annahme kein Wärmeeintrag in die Core-Catcher-Platte berechnet. Da die Phänomene beim Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und Core-Catcher-Platte anders sind als während der MCCI-Phase mit Opfermaterial, muss der Nutzer hier separat einen Wärmeübergangskoeffizienten vorgeben. Speziell bei der unteren Begrenzung (Bodenplatte) erfolgt die Kühlung der Schmelze in stabiler Stratifikation und in Abwesenheit einer Gasdurchsetzung muss von einem beträchtlichen Einfluss von Wärmeleitung ausgegangen werden. Diese kann nur vereinfacht durch die Wahl eines niedrigen Wärmeübergangskoeffizienten angenähert werden. Experimentelle Daten sind nur begrenzt vorhanden. Der Versuch WCB-1 aus dem OECD-MCCI-2-Projekt /FAR 10a/, /FAR 10b/ bietet dazu einige Messdaten, die im Rahmen des parallel laufenden Validierungsprojektes zu COCOSYS zur Überprüfung des Modells genutzt werden.

Wärmeübergang an der Außenseite der Core-Catcher-Platte zum Wasser: Hiermit ist der Wärmeübergang gemeint, der in Abb. 5.7 von den Strukturen STR1 bzw. STR2 nach außen zum Wasser der Zone 1 gerichtet ist. Das Wasser in den Kühlkanälen des Core-Catchers wird durch Naturkonvektion oder durch Zwangskonvektion umgewälzt. Prinzipiell kommen daher Mechanismen bei freier oder erzwungener Strömung bis hin zum Blasensieden zum Tragen. In diesem Fall wird der Wärmeübergang noch durch den Effekt des Siedens verstärkt. Für die in Core-Catcher-Systemen verwendeten Kühlkanalgeometrien liegen aber keine abgesicherten ingenieurtechnischen Korrelationen vor. Für erste Testanwendungen wurde daher die Möglichkeit geschaffen, Vorgabewerte von Seiten des Nutzers für den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Core-Catcher-Platte und Wasser zu verwenden.

Ein weiteres wichtiges Detail hängt mit der Repräsentation des Opfermaterials im Modell als kompakte, äußere Schicht zwischen Kernschmelze und Core-Catcher-Platten zusammen. Im Konzept des WWER-1200 z. B. (Abb. 5.5) besitzt der Bereich des Füllmaterials viele Spalte und Lücken, in die die Kernschmelze eindringt und somit zu Beginn der Wechselwirkung effektiv eine höhere Kontaktfläche zwischen Kernschmelze und Opfermaterial ermöglicht wird. Dies wird im Modell durch einen Nutzerparameter  $f_{\rm geom} > 1$  berücksichtigt, durch den zeitabhängig die für die Berechnung des Aufschmelzens herangezogene Kontaktfläche virtuell um einen Faktor erhöht wird. Mit fortschreitendem

Aufschmelzen wird dieser Faktor  $f_{geom}(t)$  linear wieder auf 1 zurückgeführt, wenn nur noch ein minimaler Rest an Opfermaterial verblieben ist. Maßgeblich für die lineare Anpassung ist die aufgeschmolzene Masse an Opferbeton  $m_{SM,melt}$  im Vergleich zur gesamten aufzuschmelzenden Masse  $m_{SM,0}$ :

$$f_{\text{geom}}(t) = 1 + \left(f_{\text{geom},0} - 1\right) \frac{m_{\text{SM},0} - m_{\text{SM},\text{melt}}}{m_{\text{SM},0}}$$
(5.1)

#### 5.3.3 Beispielanwendung auf einen Core-Catcher im WWER-1200

In diesem Abschnitt wird beispielhaft die Anwendung des Core-Catcher-Modells auf einen generischen Core-Catcher im Anlagenmaßstab illustriert. Zu diesem Zwecke wurden ungefähre Daten (Geometrie, Materialien, Anfangs- und Randbedingungen) wie für einen Core-Catcher im WWER-1200 aus frei verfügbaren Quellen angenähert. Hierbei wurden Ergebnisse aus einer Studie verwendet, die im Rahmen des Projektes 3611R01504 im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit angefertigt worden war /BAK 14/. Die wichtigsten Annahmen für den Rechenfall lauten:

- Die Anfangsmasse der Kernschmelze im Core-Catcher wurde auf 150 t geschätzt mit gleichen Gewichtsanteilen von Oxidschmelze (88 Gew.-% UO<sub>2</sub> und 12 Gew.-% ZrO<sub>2</sub>) und Metallschmelze (ca. 12 t Zr + Stahl).
- Für die Anfangstemperatur der Schmelze im Core-Catcher wurden 2650 K angenommen. Es wurde zum Zwecke der Beispielrechnung eine konstante Leistung von 20 MW in der Kernschmelze unterstellt.
- Um die Interpretation der Leistungsbilanz zu vereinfachen, wurde in dieser Beispielrechnung angenommen, dass die gesamte Masse zum Zeitpunkt t = 0 s bereits in den Core-Catcher abgestürzt ist, d. h. ein kontinuierlicher Eintrag von Kernschmelze in den Core-Catcher wurde hier nicht simuliert. Ab t = 0 s werden daher die konstanten 20 MW an volumetrischer Beheizung freigesetzt.
- Die Kernschmelze wurde als eine vermischte Schmelzeschicht im Core-Catcher simuliert. Eine geschichtete Simulation der Kernschmelze im Core-Catcher ist alternativ möglich.

- Die Zusammensetzung des Opfermaterials im Core-Catcher wurde mit 60 Gew.-% Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und 40 Gew.-% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> angesetzt.
- F
  ür die Schmelztemperatur und Schmelzenthalpie des gemischten Opfermaterials wurden Werte von 1.800 K und 2,2 MJ/kg verwendet.
- Die geometrische Anordnung des Opfermaterials wurde wie in Abb. 5.10 vorgegeben. Die tatsächliche Anordnung des Opfermaterials im Core-Catcher des WWER-1200 ist nicht genau bekannt. Es wird vermutet, dass das Design anfänglich eine vergrößerte Kontaktfläche mit dem Opfermaterial im Vergleich zu Abb. 5.10 ermöglicht. Um dieser Annahme Rechnung zu tragen, wurde in der Beispielanwendung hier ein Geometrieparameter  $f_{geom,0} = 2$  im Unterschied zur unmodifizierten Rechnung ausgewertet.

Mit diesen Annahmen ist das Aufschmelzen des Opfermaterials im Core-Catcher wie in Abb. 5.11 (Größe der Kontaktflächen), Abb. 5.12 (Geometriefaktor) und Abb. 5.13 (2D-Konturen der Kontaktfläche zwischen Kernschmelze und Opfermaterial) berechnet worden.



Abb. 5.11 Zeitliche Entwicklung der Kontaktflächen



**Abb. 5.12** Zeitliche Einwicklung des Geometriefaktors fgeom(t)

Zu Beginn nimmt die Kontaktfläche zwischen Kernschmelze und Opfermaterial mit Abschmelzen des Opfermaterials zu. Sobald es zum ersten Kontakt der Kernschmelze mit den gekühlten Strukturen des Core-Catchers kommt (in der Rechnung mit  $f_{geom} = 1$  zuerst seitlich, bei ca. 4,4 h; danach am Boden, bei ca. t = 7,7 h), wachsen die Kontaktflächen der Schmelze mit der Seitenplatte bzw. der Bodenplatte an. Mit  $f_{geom} = 2$  erfolgt das Aufschmelzen leicht schneller und die direkten Kontakte zwischen Kernschmelze und dem Core-Catcher-Behälter werden früher errechnet.

In Abhängigkeit des gewählten Geometriefaktors  $f_{geom}$  zeigt die Beispielanwendung eine komplette Oxidation der Kernschmelze im Zeitraum zwischen 0,3 h und 0,6 h (Abb. 5.14). Für die Oxidation der Kernschmelze wird ein Teil des Sauerstoffs des geschmolzenen Opfermaterials verbraucht. Abb. 5.15 zeigt die Leistungsbilanz für den Rechnungsfall mit  $f_{geom} = 1$ .



Abb. 5.13Zeitabhängige Einwicklung der 2D-Kontur zwischen Kernschmelze und<br/>Opfermaterial (für  $f_{geom} = 1$ )



Abb. 5.14 Oxidationsgrad in Abhängigkeit des gewählten Geometriefaktors fgeom



**Abb. 5.15** Leistungsbilanz für  $f_{geom} = 1$ 

Ein quasi-stationärer Zustand (zugeführte Leistung  $\approx$  abgeführte Leistung) stellt sich nach ca. 8 h ein. Die berechnete Temperatur des gemischten Schmelzepools liegt zu diesem Zeitpunkt zwischen ca. 1 800 °C und 1 900 °C und variiert nachfolgend nur noch wenig.



Abb. 5.16 Berechnete Temperatur des vermischten Schmelzepools mit Variation von  $$f_{geom}$$ 



Abb. 5.17Berechnete Temperatur des stratifizierten Schmelzepools im Unterschied<br/>zum vermischten Fall (beide für  $f_{geom} = 1$ )

In einem variierten Rechenfall wurde für den Schmelzepool ein geschichteter Zustand angenommen. Zu Beginn liegt die oxidische Schmelze am Boden dieses Pools, überdeckt von der spezifisch leichteren Metallschmelze. Eine Schichtungsumkehr wird in der Rechnung mit  $f_{geom} = 1$  bei ca. t = 0,6 h mit Ende der Oxidation des Zr prognostiziert. Die Temperaturen der beiden Schichten stellen sich dann (quasi-stationär) auf ca.  $T_{oxide} \approx 1$  900 °C und  $T_{metal} \approx 1$  550 °C ein (Abb. 5.17).

## 5.3.4 Schlussfolgerungen

Das für COCOSYS entwickelte Core-Catcher-Modell setzt einige Vereinfachungen an, um für COCOSYS eine ausgewogene Modelltiefe bereitzustellen. Das Modell nimmt einen axialsymmetrischen Core-Catcher an und das Opfermaterial wird als kompakte Schicht zwischen freiem Innenraum des Core-Catcher-Behälters (den die Schmelze einnimmt) und den gekühlten Behälterstrukturen angesetzt. Tatsächliche Bedingungen (Masse von Kernschmelze, Opfermaterial, anfängliche Kontaktfläche zwischen Kernschmelze und Opfermaterial etc.) müssen auf diese Annahmen umgerechnet werden. Zur virtuellen Erhöhung der Kontaktfläche zwischen Opfermaterial und Kernschmelze dient ein zu diesem Zweck eingeführter Modellparameter  $f_{geom}$ . Mit diesem Modell lässt sich der Zustand der Schmelze während der Konditionierungsphase im Core-Catcher beschreiben. Eine Wärmabfuhr von der Schmelze an die Strukturen des Behälters setzt in der Modellannahme erst dann ein, wenn das Opfermaterial lokal weggeschmolzen ist und direkt mit dem Behälter in Kontakt kommt.

Für die Wärmeübergänge zwischen Schmelze und Opfermaterial bzw. zwischen Schmelze und Behälter gibt es noch Unsicherheiten und aus diesem Grund muss der Nutzer empirische Wärmeübergangskoeffizienten vorgeben. Die hier gezeigte, auf Reaktormaßstab skalierte Beispielrechnung für einen mit generischen Daten modellierten Core-Catcher mit Ähnlichkeiten zu einem WWER-1200-Design zeigt Ergebnisse, die unter Verweis auf die ungenauen Vorgaben von Anfangs- und Randbedingungen als realistisch eingeschätzt werden, basierend auf dem Vergleich dieser mit Daten aus frei verfügbaren Quellen, z. B. /ZVO 19/. Die Tauglichkeit des Core-Catcher-Modells im Rahmen der Anwendung von COCOSYS auf aktuelle Anlagendesigns mit Core-Catcher, z. B. WWER-1200 oder EPR, sollte in einem anwendungsorientierten Vorhaben erprobt werden. Allerdings sind hierfür genaue Anlagendaten notwendig, die für die genannten Designs derzeit nicht frei verfügbar sind.

#### 5.4 Verbesserungen des Modellstands zur Schmelzeausbreitung

Die internationale Forschung zu Reaktorunfällen mit Freisetzung von Kernschmelze ins Containment beschäftigt sich intensiv mit der Aufarbeitung des Unfalls in Fukushima. Auf der Basis aktueller Untersuchungen vom Zustand in den zerstörten Blöcken 1 und 3 der Anlage wurde eine großflächige Verteilung von erstarrter Kernschmelze in der Pedestal-Region unter dem RDB identifiziert /PEL 20/. Das tatsächliche Ausmaß solcher Ausbreitung der Schmelze nach Austrag dieser aus dem RDB ist ein Schlüsselparameter für die weitere Kühlbarkeit der Schmelze und für die Entwicklung von möglichen Schmelze-Beton-Wechselwirkungen. Das in 2019 begonnene, internationale OECD-Forschungsprojekt ROSAU (unter Beteiligung von USA, Frankreich, Japan, Schweden u. a.) zielt auf die Erforschung dieses Schlüsselphänomens ab /NEA 20/.

Für die Analyse von Schmelzeausbreitungen steht COCOSYS-Nutzern das separate Modell LAVA zur Verfügung. Ursprünglich war geplant, LAVA in COCOSYS als generelles Modell für die Simulation von Schmelzetransport in Kopplung zu den anderen Phänomenen einzubauen. Es hat sich aber gezeigt, dass die spezielle Vereinfachung der Kräftebilanz in LAVA (Vernachlässigung der Trägheitskräfte) zur Ableitung der Gleichungen für die Schmelzebewegung für Untersuchungen von Grenzsituationen (kleine Massenströme, hoch-viskose Schmelze) zwar effektiv und genau ist, aber für davon abweichende Bedingungen (große Massenströme, niedrig-viskose Schmelze) keine korrekte Prognose erbringen würde. Daher kann das Modell LAVA nicht für jeden Fall der Schmelzeausbreitung als Analysewerkzeug verwendet werden und der Weg einer standardmäßigen Anbindung von LAVA an COCOSYS (als eine Art Black-Box-Tool) wurde nicht weiterverfolgt. Stattdessen ist basierend auf Vorarbeiten in /SPE 12/ ein auf theoretischen Grundlagen basierendes Diagnoseverfahren für Schmelzeausbreitungsvorgänge in COCOSYS eingebaut worden.

## 5.4.1 Schnelle Diagnosemöglichkeit zur Effizienz der Ausbreitung

Die Diagnose beruht auf dem Prinzip des Wettbewerbs zwischen Ausbreitung und Erstarrung, siehe auch /SPE 12/ zu weiteren Details der Grundlagen. Es werden bewährte, theoretische Näherungen für die Berechnungen einer zeitabhängigen Position der Schmelzefront im Ausbreitungsraum verwendet. Unter vereinfachenden Annahmen wird damit eine mittlere Höhe des Schmelzevolumens im Ausbreitungsraum unter der Annahme abgeschätzt, dass keine Abkühlung wirksam ist. Dies wird mit der zeitlich zunehmenden Krustendicke verglichen. Für die Bewertung der Ausbreitungseffizienz liegt die Annahme zu Grunde, dass die Ausbreitung gestoppt wird, sobald die Krustendicke einen kritischen Anteil an der mittleren Schmelzehöhe erreicht hat bzw. diesen übersteigt.

## 5.4.1.1 Verwendung theoretischer Näherungslösungen

Die Tabelle Tab. 5.3 zeigt die benutzen theoretischen Lösungen für die axialsymmetrische Ausbreitung, d. h. für den Radius R(t) auf einer Fläche, vgl. /SPE 10/.

Tab. 5.3Selbstähnliche Näherungslösungen für den Radius einer schwerkraftgetrie-<br/>benen Ausbreitung auf einer Fläche /SPE 10/

Gleichgewicht aus Trägheitskräften und Gravitation	$R_i$ (t, α) = $\chi_i$ (g'Q) <sup>1/4</sup> t <sup>(α+2)/4</sup>	(5.2)
Gleichgewicht aus Reibungskräften und Gravitation	$R_{\nu}(t, \alpha) = \chi_{\nu} \left(\frac{g' Q^3}{3\nu}\right)^{1/8} t^{(3\alpha+1)/8}$	(5.3)

In diesen Gleichungen steht g<sup>'</sup> für die modifizierte Gravitationskonstante g<sup>'</sup> =  $g \Delta \rho / \rho$ , worin  $\Delta \rho$  für die Differenz zwischen der Dichte der Schmelze  $\rho$  und der Dichte der Atmosphäre  $\rho_{atm}$  steht. Der Parameter  $\alpha$  beschreibt die Einströmbedingung. In dem in COCOSYS eingebauten Verfahren werden exklusiv zwei Bedingungen verwendet:  $\alpha = 1$ für konstanten Volumenstrom und A = 0 ohne Volumenstrom, d. h. konstantes Volumen im Ausbreitungsraum. Weitere Parameter in Tab. 5.3: Q repräsentiert entweder den Volumenstrom (für  $\alpha = 1$ , [m<sup>3</sup>/s]) oder das gesamte Volumen  $V_0$  [m<sup>3</sup>] der Schmelze.  $\nu$  steht für die kinematische Viskosität [m<sup>2</sup>/s]. Die Vorfaktoren  $\chi_i$  und  $\chi_v$  waren zuvor durch theoretische bzw. empirische Betrachtungen ermittelt bzw. festgelegt worden und werden in Tab. 5.4 gelistet.

Tab. 5.4	Vorfaktoren für	die theoretischen	Näherungslösungen

	trägheitsdominiert	reibungsdominiert		
konstanter Volumenstrom $\alpha = 1$ :	$\chi_i = 1.0$	$\chi_v = 0.71$		
konstantes Volumen α = 0:	$\chi_i = 1.14$	$\chi_v = 0.894$		

Wie auch schon in /SPE 12/ ausgeführt, erfolgt die Verwendung der theoretischen Näherungslösungen aus Tab. 5.3 stückweise mit Anschlussbedingungen. Zunächst werden die Lösungen für konstanten Volumenstrom (obere Zeile in Tab. 5.4) ausgewertet, bis das Ende der Einströmzeit  $t_{end}$  erreicht ist. Daraus ergeben sich ein Ausbreitungsradius  $R(t_{end})$  und eine Geschwindigkeit  $v(t_{end}) = dR/dt|_{t_{end}}$  für das jeweilige Regime (trägheitsdominiert oder reibungsdominiert). Aus der Theorie geht hervor, dass, solange die Ausbreitung trägheitsdominiert ist, die reibungsdominierte Lösung größere Ausbreitungsradien als die entsprechende trägheitsdominierte Lösung prognostiziert und die tatsächliche Ausbreitung somit überschätzt. Dies lässt sich als Kriterium für den Übergang zwischen den beiden Ausbreitungsregimes verwenden, d. h. die reibungsdominierte Lösung verwendet. Der Übergang der stückweisen Abschnitte für konstanten Volumenstrom ( $\alpha = 1$ ) zur Näherungslösung für konstantes Volumen ( $\alpha = 0$ ) wird dann bei identischer Geschwindigkeit und gleicher Ausbreitungslänge (=  $R_{\alpha=1}(t_{end})$ ) vorgenommen, d. h., ab  $t_{end}$  wird der Zuwachs an Ausbreitungslänge aus der Lösung für konstantes Volumen  $R_{\alpha=0}$  ermittelt, wobei dort an dem Zeitpunkt  $\tilde{t}$  identischer Geschwindigkeit angesetzt wird:

$$R(t_{\text{end}} + \Delta t) = R_{\alpha=1}(t_{\text{end}}) + R_{\alpha=0}(\tilde{t} + \Delta t) - R_{\alpha=0}(\tilde{t})$$
(5.4)

#### 5.4.1.2 Weitere Annahmen zu Randbedingungen

Benötigte Stoffeigenschaften wie Dichte und Viskosität der Schmelze sowie die Wärmeleitfähigkeit der Kruste werden aus den in CCI berechneten Stoffdaten für das auszubreitende Schmelzevolumen entnommen, welches im Anschluss (nach der Ausbreitungsanalyse) als neuer CCI-Schmelzepool in COCOSYS weiter simuliert wird und mit den Betonstrukturen im Ausbreitungsraum wechselwirkt. Für die Berechnung des Volumenstroms ergeben sich zwei Möglichkeiten:

- Wenn die Ausbreitung der Schmelze nach Austrag dieser aus ATHLET-CD nach COCOSYS erfolgt, wird der Volumenstrom aus der Dauer und der Masse des Schmelzeaustrags aus ATHLET-CD bis zum Einsetzen der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in COCOSYS berechnet, d. h. der Zeitpunkt, an dem die akkumulierte Schmelzemasse den Eingabe-Parameter ACCUMA übersteigt, vgl. User Manual zum Abschnitt EXTMELT.
- 2. Wenn die Ausbreitung nach Durchschmelzen eines anderen CCI-Pools erfolgt, wird der Volumenstrom unter der Annahme eines Behälterausfließens angenähert, wobei die Geometrie des Behälters, aus welchem Schmelze ausfließt, als idealer Zylinder mit konstanter Querschnittsfläche betrachtet wird, und der Querschnitt des Lecks [m<sup>2</sup>] im Datensatz vorgegeben werden muss. Die

Querschnittsfläche [m<sup>2</sup>] für den auslaufenden Behälter wird identisch wie die freie Oberfläche des Pools, aus dem Schmelze ausfließt, zum Durchschmelzzeitpunkt angenommen. Für die Berechnung des Volumenstroms wird ein Ausflusskoeffizient von  $C_d = 0.6$  angenommen, um dissipative Verluste zu berücksichtigen.

Basierend auf empirischen Beobachtungen in Experimenten, in denen die Schmelzeausbreitung oft durch komplexe Zwangskräfte (Trägheitskräfte, Verkrustung an den Seitenflächen der Strömung) innerhalb eines Sektors von ca. 90° ausgebreitet wird, obwohl dort keine geometrische Berandung vorhanden ist, wird in der Analytik hier ein ebensolches Verhalten unterstellt: Es wird angenommen, dass der Volumenstrom in einen auf einen Winkel von 90° virtuell eingegrenzten Sektor einströmt und auch nur die Fläche in diesem Sektor befüllen kann. Der Volumenstrom wird um einen Faktor 360°/90° = 4 skaliert, um dennoch die axialsymmetrische Formel anzuwenden, im Ergebnis wird die bedeckte Fläche aber entsprechend rückgerechnet (auf ein Viertel). Die Höhe der Schmelze ist ein Maß für den weiteren Antrieb der Schmelzeausbreitung durch den Einfluss der Schwerkraft. Andererseits entstehen durch die Abkühlung der Schmelze Krusten auf der Oberfläche oxidischer Schmelzen, welche die Ausbreitung am Ende abstoppen. In dem hier gewählten Ansatz wird unterstellt, dass die ausgebreitete Schmelze homogen durchmischt ist. Im Falle der Ausbreitung einer aus Metallen und Oxiden gemischten Schmelze werden für die Krustenbildung nur die Stoffeigenschaften der Oxidschmelze unterstellt.

#### 5.4.1.3 Immobilisierungskriterium

Neben dem Ausbreitungsradius wird in dem Diagnoseverfahren die zeitliche Entwicklung einer Kruste auf der Oberfläche der ausgebreiteten Schmelze abgeschätzt. Dies erfolgt mit einem wurzelförmigen Wachstumsansatz entsprechend der GI. (5.5).

$$\Delta s = \frac{\frac{\lambda}{s} (T_0 - T_{\text{surf}}) - P_{\text{dec}} H}{\rho (f_l H_1 + max [c_p (T_0 - T_{liq}), 0])} \Delta t$$
(5.5)

Hierin sind:

- λ Wärmeleitfähigkeit der Kruste [W/(m K)]
- To Temperatur der Schmelze bei Ausbreitung [K]
- T<sub>surf</sub> Oberflächentemperatur der Kruste [K]

P<sub>dec</sub> volumetrische Nachzerfallswärmeleistung [W/m<sup>3</sup>]

- H mittlere Höhe der Schmelze [m]
- $\rho$  Dichte der Schmelze [kg/m<sup>3</sup>]
- *f*<sub>l</sub> Flüssiganteil [-]
- *H*<sub>1</sub> spezifische Latentwärme für die Erstarrung (Differenz zwischen spezifischer Enthalpie bei Liquidus und bei Solidus [J/kg]
- $c_p$  Wärmekapazität [J/(kg K)] bei  $T_{lig}T_{lig}$ Liquidustemperatur [K]

Die Oberflächentemperatur wird dabei zeitabhängig so berechnet, dass der abgestrahlte Wärmestrom an die Umgebung (die die Temperatur  $T_{env}$  hat) identisch ist mit dem durch Wärmeleitung durch die Kruste hindurchgeführten Wärmestrom:

$$\sigma_B \epsilon \left( T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{env}}^4 \right) = \frac{\lambda}{s} \left( T_0 - T_{\text{surf}} \right)$$
(5.6)

- $\sigma_B$  Stefan-Boltzmann-Konstante 5.67E-8 [W/(m<sup>2</sup> K)]
- *ε* Emissivität [-]

Wenn das Verhältnis zwischen Krustendicke s(t) (mit der Zeit zunehmend) und mittlerer Schmelzehöhe H(t) (mit der Zeit abnehmend) einen kritischen Wert übersteigt,

$$\frac{s(t)}{H(t)} > f_{\rm crit} \approx 0.3 \tag{5.7}$$

wird in diesem Ansatz ein Abstoppen der Ausbreitung (Immobilisierung) unterstellt. Durch Vergleich zwischen tatsächlichen Ausbreitungsflächen in bekannten Experimenten zur Schmelzeausbreitung und der Prognose (5.7) konnten in /SPE 12/ empirische Werte für  $f_{crit}$  ermittelt werden, mit denen ungefähre Übereinstimmungen zu den Experimenten erzielt werden können. Die in /SPE 12/ ermittelten Werte waren in einem Wertebereich von ca.  $f_{crit} = 0,1 \dots 0,3$  gestreut (vgl. /SPE 12/, Tab. 4.1 auf S. 142).

Der Einfluss des Parameters  $f_{crit}$  wird hier nachfolgend einmal näher anhand des Schmelzeausbreitungsexperimentes ECOKATS-1 untersucht. Das Experiment ECOKATS-1 stellt in dem EU-Vorhaben ECOSTAR einen wichtigen Meilenstein der

experimentellen EU-Forschung zur Schmelzeausbreitung dar. Auf der Basis dieses Experimentes wurde in dem ECOSTAR-Vorhaben ein blinder Code-Benchmark durchgeführt, womit die Entwicklung ausgewählter Schmelzeausbreitungscodes abschließend validiert und bewertet wurde /SPE 04/. In diesem Experiment wurden ca. 550 kg oxidische Schmelze, bestehend aus Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SiO<sub>2</sub>, CaO und FeO in einer Geometrie bestehend aus einem Zuführungskanal und einer rechteckigen Fläche, welche das Design des EPR-Core-Catchers nachempfinden soll, zur Ausbreitung gebracht. Der Massenstrom in den Zuführungskanal hielt ca. 85 s an. Insgesamt wurde eine Fläche von ca. 5 m<sup>2</sup> mit Schmelze bedeckt.



 Abb. 5.18 Mit dem vereinfachten Immobilisierungs-Kriterium prognostizierte Schmelzeausbreitungen (blaue Kurven) für ECOKATS-1 in Abhängigkeit des Parameters f<sub>crit</sub> im Vergleich zum Experiment (orange)

Mit dem nun auch in COCOSYS implementierten Verfahren wird für dieses Experiment eine Flächenbedeckung unter Variation des Parameters  $f_{crit}$  wie in Abb. 5.18 gezeigt errechnet. Die beste Übereinstimmung ergibt sich hier für  $f_{crit} = 0,4$ .

In der früheren Untersuchung /SPE 12/ wurde für ECOKATS-1 mit diesem Verfahren ein kleinerer Wert ermittelt ( $f_{crit} = 0,26$ ). Dies liegt an dem großen Einfluss der angenommenen Wärmeleitfähigkeit durch die entstehende Kruste in Gl. (5.5). Die Ergebnisse in /SPE 12/ wurden für eine unterstellte Wärmeleitfähigkeit von  $\lambda = 1,5$  W/(m K) der

Oxidkruste ermittelt, die typisch für UO<sub>2</sub>/ZrO<sub>2</sub>-Oxide ist. Der Datenbericht zu ECOKATS-1 nennt aber eine vergleichsweise höhere Wärmeleitfähigkeit von  $\lambda = 5,4$  W/(m K) /ALS 04/, mit diesem Wert wurden die Ergebnisse in Abb. 5.18 erzielt. Da der Stoffwert der Wärmeleitfähigkeit im Allgemeinen nicht genau bekannt ist, leitet sich hieraus eine signifikante Unsicherheit ab.

Das folgende Diagramm zeigt den Einfluss der Wärmeleitfähigkeit bei fest geschriebenem Parameter  $f_{crit}$  = 0,3 ((Referenzwert).





Das Diagramm zeigt größere Ausbreitungsflächen mit kleiner werdender Wärmeleitfähigkeit der Kruste, da kleinere Wärmeleitfähigkeiten eine wärmeisolierende Wirkung haben.

Die Abb. 5.18 und Abb. 5.19 zeigen exemplarisch, dass für die Bewertung der Ausbreitungseffizienz eine signifikante Unsicherheit zu berücksichtigen ist. Als Referenzwert für die Verwendung des Kriteriums in COCOSYS wird vor dem Hintergrund der empirischen Auswertungen in /SPE 12/ und der oben gezeigten Parametereinflüsse der Wert

$$f_{\rm crit} = 0.3$$
 (5.8)

festgelegt. Um allerdings der benannten Unsicherheit Rechnung zu tragen, werden bei Anwendung des Kriteriums in COCOSYS neben dem Referenzwert  $f_{crit} = 0,3$  auch noch die Ausbreitungsradien (bzw. Flächen) bei  $f_{crit} = 0,1$  und  $f_{crit} = 0,5$  ausgewertet, sodass der Anwender zusätzliche Informationen für seine Bewertung des Vorganges zur Verfügung hat.

Die Textausgabe erfolgt in der Datei \*.prt.cci für den entsprechenden CCI-Pool. Es wird dabei ein Zeitraum bis zum Fünffachen der angenommenen Ausströmzeit betrachtet. Im Beispiel unten beträgt die berechnete Ausströmzeit 121,32 s (= inflow time). Der Radius bzw. die Fläche als Funktion der Zeit werden für  $f_{crit} = 0,3$  dann bis zu etwa t = 600 s. berechnet. Die zweite Spalte (Überschrift: *radius*) listet den abgeschätzten Radius, wohingegen die Spalten 3 und 4 die getrennt berechneten Radius-Werte für konstanten Volumenstrom ( $r_flux$ ) bzw. konstantes Volumen ( $r_vol$ ) zum Vergleich enthalten. Die beiden letzten Spalten enthalten die Berechnungsgrundlage für das Kriterium, die zeitabhängige Krustendicke (*crust*) und die zeitabhängige, mittlere Höhe (*height*) der Schmelzeausbreitung. Der Kopfteil der Textausgabe gibt die wichtigsten Größen für die Einschätzung der Ausbreitung nach diesem Kriterium wieder, darunter den abgeschätzten Radius ( $r_immob$ ) und die Fläche ( $A_immob$ ).

					/
SIMPLIFIED SPREADING ANAL	YSIS ****				
t immob f=0.3 (s) :	21	1.71			
t immob f=0.1 (s) :		7.20			
t immob f=0.5 (s) :	43	3.68			
r immob f=0.3 (m) :	13	3.22			
A immob f=0.3 (m**2) :	13	7.29			
(assuming sector = 90°!)					
volume spread (m**3) :		9.31			
inflow time (s) :	123	1.32			
temperature (K) :	251	5.92			
dyn. viscosity (kg/s/m) :	0.5321	E-02			
T liquidus (K) :	1930	0.00			
T solidus (K) :	1430	0.00			
vol. power (W/m**3) :	154711	7.39			
latent heat (J/kg) :	651769	9.98			
time (s) radius (m)	r_flux (m)	r_vol (m)	crust (m)	height (m)	
0.000E+00 0.000E+00 0.607E+01 0.509E+01 0.121E+02 0.856E+01	0.000E+00 0.509E+01 0.856E+01	0.000E+00 0.123E+02 0.174E+02	0.100E-04 0.194E-02 0.268E-02	0.000E+00 0.229E-01 0.162E-01	
U.I825+U2 U.II65+U2	し、エエもビキリス	し . エタリビキリス	しょううしビーしる	し エ ろ と 皆 一 し エ	

130

	0.243E+02	0.144E+02	0.144E+02	0.202E+02	0.385E-02	0.114E-01
	0.558E+03	0.478E+02	0.715E+02	0.367E+02	0.227E-01	0.519E-02
	0.564E+03	0.478E+02	0.719E+02	0.368E+02	0.228E-01	0.518E-02
	0.570E+03	0.479E+02	0.723E+02	0.368E+02	0.229E-01	0.516E-02
	0.576E+03	0.480E+02	0.727E+02	0.369E+02	0.231E-01	0.514E-02
	0.582E+03	0.481E+02	0.731E+02	0.370E+02	0.232E-01	0.513E-02
	0.588E+03	0.482E+02	0.735E+02	0.370E+02	0.233E-01	0.511E-02
	0.594E+03	0.482E+02	0.738E+02	0.371E+02	0.235E-01	0.509E-02
	0.601E+03	0.483E+02	0.742E+02	0.372E+02	0.236E-01	0.508E-02
*	********	* * * * * * * * * * * * *	* * * * *			
1///	///////////////////////////////////////			///////////////////////////////////////		///////////////////////////////////////

Dem Anwender wird empfohlen, eine separate Untersuchung zur Schmelzeausbreitung durchzuführen, z. B. mit dem Modell LAVA, wenn die Größenordnung der abgeschätzten Ausbreitungsfläche (*A\_immob*) in derselben Größenordnung wie die der zur Verfügung stehenden Ausbreitungsfläche liegt, oder sogar kleiner ist. In diesem Fall verbleibt aufgrund der Ergebnisse der in COCOSYS jetzt verfügbaren Ausbreitungsanalyse und unter Verweis auf die Unsicherheiten die Möglichkeit, dass die tatsächliche Ausbreitung eine kleinere Ausbreitungsfläche zum Ergebnis haben könnte, als zur Verfügung steht. Die Ausbreitung wäre in diesem Fall nicht effizient und würde nicht den gesamten Raum gleichmäßig mit Schmelze füllen.

## 5.4.2 Weitere Arbeiten an LAVA

Aus der aktuellen Anwendung des Modells LAVA zur Schmelzeausbreitung, hier mit Fokus auf WWER-Anlagen, z. B. im Projekt INT KoNuS, dortiger AP 3, resultierten konkrete Vorschläge für Modellverbesserungen. Die meisten dieser Verbesserungen wurden in LAVA bzw. in dem dafür bereitgestellten Graphical-User-Interface (GUI) umgesetzt:

- Abbruch der Rechnung jetzt fr
  ühestens nach Ende von Problemzeit und Einstr
  ömzeit
- Korrektur an der Restart-Funktionalität
- Ermöglichung der separaten Vorgabe von anfänglicher Umgebungstemperatur und Bodentemperatur im Ausbreitungsraum
- Eliminierung redundanter Eingabegrößen in den Eingabedateien
- Benennung der LAVA-Version in Ausgabedateien und Graphiken
- Erweiterte graphische Auswertemöglichkeiten im GUI, z. B. 3D-Darstellung der Schmelzeoberfläche bezogen auf die reale Höhenkoordinate des Untergrunds, gesonderte Markierung von Quellenfeldern in 3D-Graphiken (vgl. Abb. 5.20)

 Komfortablere Bedienung des GUI zur Erzeugung von Ein- und Ausgabedateien sowie zum Durchführen der Rechnung



# Abb. 5.20 Beispielhafte 3D-Darstellung der berechneten Schmelzeausbreitung in einer WWER-1000-Anlage

Die orangefarbene Oberfläche zeigt die absolute Höhenkoordinate der Schmelzeoberfläche im Vergleich zu dem Bodenniveau der Räume (grau). Die Schmelze stürzt im lila eingefärbten Bereich der Reaktorgrube (Cavity) ab. Wenn der Füllstand über die 20 cm hohe Stufe zum Korridor (Corridor) steigt, erfolgt eine Ausbreitung in den Korridor und nachfolgend in den tiefer gelegenen Nebenraum (Compartment).

Weitere gezielte Arbeiten wurden nach Auswertung von Rückmeldungen interner und externer Nutzer zum Schmelzeausbreitungsmodell LAVA durchgeführt: In einer Anwendung bei dem bulgarischen Partner ENPRO waren numerische Schwierigkeiten bei der Ermittlung der Schnittstellentemperatur zwischen oberer Kruste der Schmelze und der Atmosphäre bei angehobener Umgebungstemperatur beobachtet worden. In Nachrechnungen von Experimenten ist diese Randbedingung nicht relevant und entsprechende numerische Schwierigkeiten waren daher in der Validierung bislang nicht entdeckt worden. Daraufhin sind von der GRS Rechnungen unter Verwendung des optionalen, vereinfachten Krustenmodells in LAVA ausgewertet worden, die für die betrachteten Anwendungen ähnliche Ergebnisse bei geringerem Rechenzeitbedarf und größerer numerischer Stabilität erbringen. Allerdings fehlt für eine Empfehlung zur Nutzung dieser Option seitens GRS eine entsprechende Validierungsbasis, die zuvor noch bereitgestellt werden sollte. Ferner ist das graphische User-Interface (GUI) für LAVA-Rechnungen in Einzelpunkten weiter verbessert worden. Z. B. wird nun ein irrtümliches Generieren von Quellfeldern, die für den Eintrag von Schmelze ins Rechengebiet benötigt werden, außerhalb des zulässigen geometrischen Bereiches abgefangen.
# 6 Querschnittsaktivitäten

Dieses Arbeitspaket umfasst Arbeitspunkte zur Einbindung der GRS und COCOSYS in die nationale und internationale Forschungslandschaft mit entsprechendem fachlichem Bezug zu den Themen dieses Vorhabens sowie Arbeitspunkte zur Gewährleistung der Qualität von Quellcode und Dokumentation:

- Einbindung von GRS-Arbeiten in internationale Aktivitäten und Ad-hoc-Verwertung von neuen experimentellen Daten
- Qualitätssicherung durch Ad-hoc-Verwertung von Nutzerrückflüssen
- Pflege des Quellcodes
- Qualitätssicherung durch dedizierte QM-Maßnahmen

# 6.1 Internationales

In diesem Arbeitspunkt wurde als eine Zielsetzung dieses Projektes der fachliche Austausch mit internationalen Expertengruppen und die Beteiligung an Arbeitsgruppen mit fachlich engem Bezug zu den Themen des Vorhabens verfolgt. Nur so kann der internationale Stand von F&E kontinuierlich in die Codeentwicklung der GRS eingebracht werden. Aus diesem Grund ist die Beteiligung der GRS in verschiedenen, vorwiegend internationalen Fachgruppen fortgesetzt worden. Die Teilnahme an internationalen Konferenzen und Workshops trägt zudem dazu bei, die wichtigsten zukünftigen Themen für Sicherheitsanalysen in der Reaktorsicherheitsforschung zu identifizieren. Der wissenschaftliche Austausch mit internationalen Fachkräften ist sehr bedeutsam, um frühzeitig Informationen über neue und innovative Strategien und Modelle in der Entwicklung und Anwendung von Sicherheitsanalysecodes zu erhalten und in dem Gebiet auf dem aktuellen Stand zu bleiben.

Es wurde an folgenden Konferenzen und Workshops teilgenommen:

 Teilnahme an einem IAEA-Beratungstreffen zum Status von Rechencodes zu Unfallabläufen in LWR (Mai 2018). Gegenstand des Treffens war die Erstellung eines Technischen Berichtes /IAEA 19a/ sowie weitere mögliche Aktionen im Nachgang zu einem Technical Meeting TM der IAEA zu dem genannten Thema. An diesem Meeting waren Anwender und Entwickler u. a. der Codes AC<sup>2</sup>, ASTEC, MAAP5, MELCOR, RELAP5/SCDAPSIM und SOCRAT beteiligt. Ein Diskussionspunkt auf diesem Treffen war der Einfluss des Anwenders auf die Rechenergebnisse, der trotz umfassender Validierung der Codes allgemein, d. h. auch für die anderen Codes im Bereich der Unfallsimulationen, als sehr hoch eingestuft wird. Aus diesem Grund wird die Durchführung von fachgerechten Schulungen und die Bereitstellung sorgfältig formulierter Nutzer-Empfehlungen (User Guidelines) durch die Code-Entwickler unterstrichen. Auch der Rolle von verbleibenden Unsicherheiten und der Untersuchung dieser durch z. B. Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen wird eine sehr große Bedeutung beigemessen.

- Teilnahme an der Konferenz NUTHOS-12 im Oktober 2018 (Qingdao, China). Dort wurde in Form eines Tagungsbeitrages von der GRS /SPE 18/ der Nutzen von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für die Code-Entwicklung am Beispiel des MCCI-Modells in COCOSYS (AC<sup>2</sup>) vorgestellt. Die Arbeiten der GRS hierzu (in RS1544 durchgeführt) beinhalten Auswertungen zu dem Versuch OECD-CCI-3 (ANL, USA) sowie einem Experiment 5.7 in der MOCKA-Versuchsanlage bei KIT, Deutschland. In zahlreichen Beiträgen von anderen Organisationen wird deutlich, dass nach Fukushima die Themen Schmelzeausbreitung und Schmelze-Beton-Wechselwirkung stärker in den Fokus internationaler Aktivitäten rücken. Insbesondere japanische Teams sind an neuen Modellierungstechniken hierzu interessiert. Dabei wird verstärkt der Einsatz von fein auflösenden, mehrdimensionalen numerischen Methoden für die Lösung der Bilanzgleichungen untersucht (CFD – Computational Fluid Dynamics). Das OECD-Projekt ROSAU (s. u.) beinhaltet ebenso die Themen Schmelzeausbreitung und MCCI, hier insbesondere unter Wasser.
- AC<sup>2</sup>-User-Meeting 2018 im November 2018. Das erste kombinierte Nutzertreffen für die AC<sup>2</sup>-Codes ATHLET, ATHLET-CD and COCOSYS. Von besonderer Wichtigkeit ist die Rückmeldung von COCOSYS-Nutzern, die in diesem Rahmen der GRS ihre praktischen Erfahrungen und geplanten zukünftigen Anwendungsgebiete mitgeteilt haben. Neben wertvollen Hinweisen zu einzelnen Verbesserungsmöglichkeiten an COCOSYS wurde der Bedarf eines verbesserten Modells in COCOSYS zur Simulation von Gebäudekondensatoren in WWER-1200-Anlagen hervorgehoben.
- Teilnahme am abschließenden Seminar (Final Seminar) des EU-SAFEST-Projektes (Dezember 2018). Im Rahmen des EU-SAFEST-Projektes wurden an Instituten in der EU-Experimente zu Phänomenen bei Kernschmelzunfällen durchgeführt. Die GRS konnte experimentelle Daten aus ausgewählten Experimenten für eigene Analysen verwerten. Bei den verwerteten Daten handelt es sich um Daten aus Experimenten zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI), die in der VULCANO-Anlage

bei CEA, Cadarache, bei Framatome Erlangen und bei KIT durchgeführt worden waren. Die Ergebnisse der GRS-Analysen des VULCANO-Experimentes VBES-U5 wurden bei diesem Seminar vorgestellt und diskutiert. Im Rahmen des Seminars konnte sowohl der Versuchsstand als auch die erkaltete Konfiguration der Schmelze im Versuchstiegel von GRS-Experten in Augenschein genommen werden. Der Besuch der Anlage und die Diskussion waren hilfreich zur Bewertung der Analyseergebnisse und des Modellstands in COCOSYS.

- Teilnahme am Vorbereitungstreffen (Project-Preparatory-Meeting) des Projektes • OECD-ROSAU im Januar 2019. Gegenstand des aktuell laufenden Projektes OECD-ROSAU sind Experimente beim Argonne National Laboratory (ANL) zum Verhalten einer Kernschmelze während ihrer Ausbreitung (Spreading) und während der Wechselwirkung mit Betonstrukturen (MCCI) unter Einwirkung einer Wasserbedeckung. Zielsetzung von OECD-ROSAU ist es, mit neuen experimentellen Erkenntnissen zu den beteiligten Phänomenen die Aussagefähigkeit von Simulations-Modellen zum Verhalten der Kernschmelze im Containment bei Kernschmelzunfällen in LWR zu verbessern. Das internationale Interesse an beiden Themenstellungen dieses Vorhabens hatte zuletzt - insbesondere auch im Licht der Auswertungen zum Unfallablauf in Fukushima - zugenommen. Von der OECD wurde in einem speziellen Vorbereitungstreffen im Januar 2019 der Projektvorschlag OECD-ROSAU unter den interessierten Ländern abgestimmt. An dem Projekt beteiligen sich aktuell Belgien, Frankreich, Japan, Kanada, Schweden, Südkorea, Tschechische Republik und die USA.
- Teilnahme am Summer-Workshop (September 2019) des ETSON-Junior-Staff-Programme (JSP). Der Workshop mit dem Titel Innovative Systems for Safety Functions – Including Passive Systems, on Gen III+, Gen IV, SMRs, Floating Power Plants and Other New Designs dient zum fachlichen Austausch junger Experten von TSOs, die zum European TSO Network beitragen. ETSON hat sich u. a. zum Ziel gesetzt, gemeinsame Ansätze für Sicherheitsbewertungen zu etablieren. Dazu werden gemeinsame Aktivitäten wie Workshops zu fachlichen Einzelthemen angestoßen und durchgeführt.
- Teilnahme an der ERMSAR-Conference 2019. Die Konferenz ERMSAR ist eine aus dem Europäischen Forschungsnetzwerk SARNET hervorgegangene internationale Tagung, auf der Fortschritte auf dem Gebiet der Forschung zu Kernschmelzunfällen berichtet werden. Das Teilnehmerfeld umfasst mittlerweile auch Teilnehmer außerhalb der EU, z. B. aus den USA, Russland und Japan. Engen Bezug zum Vorhaben

hatten u. a. die Sitzungen 4 (SA Modelling and Code Development) und 6 (Ex-Vessel Corium Interactions und Coolability). Durch die Teilnahme konnte die GRS u. a. Kenntnis zu Fortschritten in folgenden Einzelthemen gelangen: Neuentwicklung eines Modells zur Spaltproduktrückhaltung beim Pool-Scrubbing in ASTEC, Einfluss des Betontyps und der Betonzerstörungstemperatur auf MCCI (isotropisch/anisotropisch) in den MOCKA-Experimenten bei KIT, Ergebnisse des VE-U1-Experimentes in der VULCANO-Anlage zu MCCI-Bedingungen im Block 1, Fukushima. Die neuen Informationen erweitern den Wissensstand und konnten in der Durchführung des Arbeitsprogramms entsprechend verwertet werden.

- Teilnahme an NUGENIA-Fortschrittstreffen zur Technical Area 2 (TA2). Im April 2018 wurden beim periodischen NUGENIA-Treffen zu TA2 Arbeitsfortschritte der teilnehmenden Organisationen im Bereich Kernschmelzunfälle mit Fokus auf *In-Vessel-Corium/Debris Coolability* (TA2.1) und *Ex-Vessel-Corium-Interactions & Coolability* (TA2.2) präsentiert und diskutiert. Ebenso wurden Ideen zu neuen gemeinschaftlichen Projekten erörtert. Es wurde ein mögliches europäisches F&E-Projekt zur Verbesserung von Simulationscodes zu MCCI und Schmelzeausbreitung diskutiert. Der daraus entstandene Projektvorschlag, der inhaltlich eng mit den Themen von RS1561 verbunden ist, konnte bei dem EURATOM-Call H2020 allerdings nicht berrücksichtigt werden.
- Teilnahme an der ersten Sitzung der OECD-WGAMA-Task-Group zur Erstellung eines State-of-the-Art-Berichtes (SOAR) zum Verhalten und zur Beherrschung brennbarer Gase (Wasserstoff und Kohlenmonoxid) in Containments existierender und zukünftiger Anlagen. In dem Bericht sollen Lücken zwischen aktuellem Kenntnisstand und dem im Hinblick auf erfolgreiche Strategien zur Beherrschung von Unfällen (Accident-Management, AM) nötigen Wissen identifiziert werden. Daraus soll ein Leitfaden für zukünftige Forschungsfelder und Entwicklungsarbeiten abgeleitet werden. Es ist geplant, dass die Expertise der GRS in das Kapitel 4 des SOAR eingebracht wird, welches den aktuellen Wissensstand zur Verteilung und Vermischung von Gasen im Containment zusammenfasst, inklusive der verfügbaren Modelle in Computercodes und deren Validierungsstand.
- Teilnahme an der 4. Sitzung der von der OECD/WGAMA einberufenen Senior Expert Group on Safety Research / Support Facilities for Existing and Advanced Reactors 2 (SESAR/SFEAR2). Zielsetzung dieser Gruppe war es, die frühere SESAR-Einschätzung des Bedarfs an experimentellen Versuchsanlagen aus dem Jahr 2007 im Hinblick auf die nötige Fortsetzung von Forschungsarbeiten zur Reaktorsicherheit

zu überprüfen und zu aktualisieren. Gegenstand des Meetings waren abschließende Arbeiten an dem von der Gruppe erstellten Bericht. In diesem werden aktuelle Forschungsschwerpunkte und dazu betriebene experimentelle Forschungsanlagen gegenübergestellt und Maßnahmen empfohlen, wie wichtige Forschungsanlagen auch weiterhin erhalten und betrieben werden können. Der abschließende Berichtsentwurf ist auf dem 40. Treffen der CSNI-Programme-Review-Group (CSNI-PRG) akzeptiert worden.

# 6.2 Benutzerunterstützung / Rückflüsse aus der Anwendung

In aktuellen Vorhaben bei der GRS oder bei externen Partnern zur Anwendung oder zur Validierung von COCOSYS in AC<sup>2</sup> wurden einzelne Probleme und Fragestellungen identifiziert, die in engem zeitlichem Kontext zu diesen Arbeiten geklärt werden mussten. Solcher Informationsrückfluss kommt von externen Anwendern meist im direkten Kontakt per E-Mail zu bekannten Ansprechpartnern bei der GRS oder wird auch z. B. im Rahmen des AC<sup>2</sup>-User-Meetings (s. Abschnitt 6.1) eingeholt.

Für die Unterstützung interner und externer Nutzer von COCOSYS sowie AC<sup>2</sup> zu Containmentfragestellungen (Behebung von Programmierfehlern, Ad-hoc-Behebung von Modellschwächen, Unterstützung bei der Erstellung von Datensätzen etc.) wurden in diesem Vorhaben daher entsprechende Einzelarbeiten durchgeführt:

- Die Parameterein- und -ausgabe des Modells AICC zur Druckprognose bei Wasserstoffverbrennungen wurde in COCOSYS 3.0 erweitert. Mit der neu entwickelten Eingabemöglichkeit können bestimmte Zonen zu Bilanzgruppen für Auswertungen zusammengefasst werden. Die neuen Auswertungen erlauben einen schnelleren und einfacheren Vergleich zum COCOSYS-Wasserstoffverbrennungsmodell FRONT.
- Bei der Verarbeitung eines Eingabedatensatzes werden jetzt Leerzeichen am Anfang von Namen ignoriert, um in diesen Fällen Fehlinterpretationen durch den Code zu verhindern.
- Die charakteristische Gas-Geschwindigkeit innerhalb einer Zone wird bei der Berechnung begrenzt, um die Stabilität von COCOSYS während der Zonen-Flutung zu verbessern.
- Verfeinerungen bei der Verarbeitung von Wasserstandshöhen in einer Zone in Bezug auf Koordinaten von Deckenstrukturen. Diese Verfeinerungen ermöglichen die Behandlung von gefluteten Decken mit dem Verhalten, dass eine Decke wie eine

Seitenwand entweder nur mit Gas, teilweise mit Gas und Wasser oder nur mit Wasser Kontakt hat.

- Im Rahmen der Anwendung in anderen Projekten wurden im COCOSYS-User-Manual der Version 3.0 Fehler und fehlende Beschreibungen von Ein- und Ausgabedaten festgestellt und korrigiert (betrifft u. a. PARs vom Typ NIS, FAN-Systeme, Wandmaterial-Unterteilungen, CCI-Eingabedaten, Kopplung mit ATHLET-CD und CoPool, COCPLOT). Diese Korrekturen fanden Eingang in das aktualisierte User Manual der kürzlich freigegebenen Version AC<sup>2</sup> 2019.
- Die Möglichkeiten zur Erzeugung von Ergebnisgraphiken mithilfe der Visualisierungsstools COCPLOT und GNUPLOT wurden entsprechend den neuen Vorgaben in der GRS zum Layout von Graphiken erweitert.

# 6.3 Codepflege

# 6.3.1 Änderung des Versionskontrollsystems

Seit Juli 2020 kommt in der gesamten GRS das moderne Versionskontrollsystem GitLab (<u>https://about.gitlab.com</u>) zum Einsatz, das auf dem Programmpaket Git (<u>https://git-scm.com</u>) basiert, das für die eigentliche Interaktion mit dem Codearchiv zuständig ist. Git wird heute von vielen Softwareentwicklern eingesetzt, unter anderem von Microsoft und den Entwicklern des Linux-Kernel. Die auf einem GRS-eigenen Server betriebene GitLab-Instanz bietet über einer Weboberfläche neben dem Zugang zum Codearchiv weitere zusätzliche Funktionen an. Zum Beispiel lassen sich über die Weboberfläche Probleme nachverfolgen (Issue-Tracking) und auch projektübergreifend referenzieren (zum Beispiel in ATHLET). Neuentwicklungen sind planbar und können über Kommentarfunktionen diskutiert und abgestimmt werden.

Das bisher auf SVN (<u>https://subversion.apache.org</u>) basierende Softwarearchiv musste in ein Git-Archiv konvertiert werden, um die Entwicklungsgeschichte zu erhalten. Da das Tool Git selbst die Möglichkeit bietet, diese Konvertierung durchzuführen, war die Umstellung recht problemlos möglich, obwohl einige Eigenheiten von SVN durch entsprechende Konvertierungsparameter korrigiert werden mussten. Im Nachgang musste das Continuous-Integration-System (Jenkins) auf Git umgestellt werden. Jenkins prüfte das Subversion-Archiv auf Änderungen und führte dann die Übersetzung der AC<sup>2</sup>-Codes (COCOSYS, ATHLET, ATHLET-CD), inklusive Testrechnungen aus. Die Unterstützung für Git-Archive ist in Jenkins vorhanden. Anders als bisher initiiert der GitLab-Server nun die Aufgaben auf dem Jenkins-Server jedoch aktiv.

# 6.3.2 Herausgabe neuer COCOSYS-Versionen

Im Projektzeitraum wurden folgende COCOSYS-Versionen bzw. -Patches herausgegeben:

- COCOSYS V2.4v5
- COCOSYS 3.0 in AC<sup>2</sup> 2019
- COCOSYS 3.0.1 als Teil von AC<sup>2</sup> 2019.1

Die IT-spezifische Kopplung zwischen den AC<sup>2</sup>-Modulen ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS (in AP1, siehe Abschnitt 2.1.1) und die Ergänzung der User-Manuals (in AP5) standen dabei als konkrete Arbeitspunkte im Fokus. Nach QS und Freigabe der Versionen sind entsprechende Download-Pakete (inkl. Installer) erstellt worden und den lizensierten Nutzern auf dem Portal user-codes.grs.de zur Verfügung gestellt worden. Ein Teil der Arbeiten beinhaltetet auch Anpassungen und Abstimmungen zum Installationsprogramm sowie zu einem einheitlichen Erscheinungsbild der COCOSYS und ATHLET-Module in AC<sup>2</sup>. Die Release-Notes enthalten eine umfangreiche Liste der Korrekturen in den Patches. Die Korrekturen sind in der Regel auch in den Hauptzweig der Entwicklung übernommen worden.

# 6.3.3 Verbesserung von Codestrukturen

Hier wurden spezifische Arbeiten durchgeführt, um veraltetes und/oder problematisches Coding oder betreffende Datenstrukturen zu bereinigen. Im Ramen der kontinuierlichen Konsolidierung von COCOSYS wurden mehr als 500 Quellcodedateien vom festen Fortan-Quelltext-Format (Dateinamenerweiterung '\*.f') auf das freie Format (Dateinamenerweiterung '\*.f90') umgestellt.

### 6.4 Qualitätssicherung und Dokumentation

# 6.4.1 QS-Plan für COCOSYS

Die GRS hat zur fachlichen Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen eine neue, übergeordnete Richtlinie für die Entwicklung, Verifizierung und Validierung von Computerprogrammen in der GRS in Kraft gesetzt. Details der Umsetzung dieser Richtlinie werden in einem QS-Plan des jeweiligen Softwareentwicklungsprojektes (SWEP) festgelegt und können vom Charakter der jeweiligen Computerprogramme abhängen. Die Richtlinie orientiert sich an den Definitionen und Vorgaben der ISO 9001 sowie des *Deterministic Safety Analysis for Nuclear Power Plants, IAEA Safety Standards (SSG-2)* der IAEA /IAEA 19b/. Ein entsprechender, detaillierter QS-Plan wurde für COCOSYS in AC<sup>2</sup> ausgearbeitet sowie eine englischsprachige Darstellung der Vorgehensweise bei der GRS zur Qualitätssicherung von COCOSYS (QA-Manual) /ARN 18/. Das QA-Manual wird zusammen mit sonstiger Code-Dokumentation an COCOSYS-Nutzer verteilt.

# 6.4.2 Kontinuierliche Qualitätssicherung der Codeentwicklung

Bei der Arbeit mit Git (vgl. Abschnitt 6.3.1) werden in hohem Maße Abzweigungen vom Hauptentwicklungszweig (Master) eingesetzt. Weiterentwicklungen oder das Beheben von Fehlern werden auf diesen Zweigen durchgeführt und beeinflussen den Hauptentwicklungszweig zunächst nicht. Dadurch behindern auch mögliche Probleme bei Zwischenschritten einer Weiterentwicklung auf einem solchen Zweig die Arbeit der anderen Entwickler erstmal nicht. Erst nach möglicher Kontrolle durch Kollegen und erfolgreichen gelaufenen Tests kann der Entwicklungszweig dann in den Hauptentwicklungszweig überführt werden. Sobald Änderungen an den Programmquellen auf einem solchen Entwicklungszweig übertragen werden, wird der Zweig vom Jenkins-System übersetzt, und es werden ausgewählte Testrechnungen durchgeführt. Eine Rückmeldung bei Fehlern erfolgt via E-Mail und auf der GitLab-Webseite für diesen Zweig, damit dort der Entwickler den Übertrag in den Hauptzweig auslösen oder zurückstellen kann. Analog wird auch der Hauptzweig mit den überführten Änderungen des Entwicklungszweigs zunächst getestet, bevor der endgültige Übertrag durchgeführt wird. Auf diese Weise werden Fehler bei der Entwicklung frühzeitig erkannt, und es wird dafür gesorgt, dass der Hauptzweig immer möglichst fehlerfrei und funktionsfähig ist.

Bei den Tests, die für die Entwicklungszweige durchgeführt werden, handelt es sich um eine Auswahl von Tests kürzerer Laufzeit. Sie enthalten jedoch die wesentlichen

COCOSYS-Module der Thermohydraulik, Spaltprodukttransport, Beton-Schmelze-Wechselwirkung und die Kopplung zu ATHLET bzw. ATHLET-CD. Umfangreichere Tests längerer Laufzeit werden jede Nacht mit dem aktuellen Stand des Hauptentwicklungszweigs automatisch durchgeführt. Darunter ist zum Beispiel ein simuliertes Kernversagen mit ATHLET-CD inklusive Spaltproduktfreisetzung und Austrag des geschmol-Kerns nach COCOSYS mit Berechnung der Beton-Schmelzezenen Wechselwirkung (CCI). Ebenfalls automatisch laufen die Testrechnungen aus dem Regressionstesten (vgl. Abschnitt 6.4.3) an jedem Wochenende. Die im Regressionstest enthaltenen Szenarien reichen von einfacheren Nachrechnungen verschiedenster Experimente zu Thermohydraulik und Spaltprodukttransport bis hin zur Simulation kompletter Anlagen (GKN2, RPMK-1500, WWER-440). Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden Rechenergebnissen mit der aktuellen freigegebenen Version gegenübergestellt (AC<sup>2</sup> 2019.1).

Voraussetzung für das automatische Übersetzen des Codesystems und die Durchführung von Tests ist es, eine möglichst einfache Vorschrift zu haben, die das Übersetzen durchführt. Denn diese Vorschrift muss im Continuous-Integration-System (Jenkins) mit der Weiterentwicklung des Codes mit gepflegt werden. Mit dem bestehenden System aus CMake und GNU-Make besteht unter Linux schon länger so ein System, das sich mit einem einzelnen Kommando übersetzen lässt, welches sich nicht ändert. Mögliche Änderungen der Bauvorschrift sind in den CMake-Definitionsdateien versteckt. Unter Windows ist das nun analog mit einer einzelnen Batch-Datei umgesetzt, die aktuell die Übersetzung mit CMake durchführt; vor Juli 2020 übersetzte sie die Visual-Studio-Dateien mit vielen Einzelkommandos direkt. Für die Durchführung der Standardtests wird eine hierarchische Struktur von Tests gepflegt, die thematisch geordnet sind. Auch diese Tests können durch einfache Kommandos gestartet werden. So führt zum Beispiel bei Arbeiten am CCI-Modul das Kommando *RunTests CCI* alle Tests aus, die dem CCI-Modul zugeordnet sind. Dadurch können die Entwickler die Tests während der Arbeiten schnell zur Kontrolle durchführen.

### 6.4.3 Automatisierung des Regressionstestens

Vor der Veröffentlichung einer COCOSYS-Version, und auch während der Entwicklung, werden Regressionstests durchgeführt. Ein Regressionstest ergänzt die bei jeder Codeänderung automatisch auf einem Jenkins-Server durchgeführten Testläufe. Dabei werden durch ein Python-Skript verschiedene Rechenfälle mit der aktuellen und der vorherigen COCOSYS-Version durchgeführt. Die Ergebnisse der beiden Versionen werden in automatisch generierten Bildgraphiken miteinander und zum Teil mit experimentellen Daten verglichen. Das Skript wurde so angepasst, dass auch die aktuelle COCOSYS-Version unter Windows und Linux verwendet werden kann. Die eigentliche Durchführung und Auswertung des Regressionstests erfolgte in RS1544. Daraus resultierten Rückmeldungen von Problemen und Fehlern, die im Rahmen von RS1561 behoben worden sind. Zum Beispiel fielen unterschiedliche Ergebnisse nach Restarts von Rechnungen auf. Betroffen waren hier die COCOSYS-Module CCI und THY. In diesem Arbeitspunkt wurden die IT-Skripte entwickelt, um das Regressionstesten regelmäßig und automatisiert durchzuführen. In den Tests sind auch Simulationen gesamter Anlagen enthalten, die entsprechend lange Rechenzeiten benötigen. Darum ist es nicht sinnvoll, die Tests bei jeder Codeänderung durchzuführen, die zum Teil mehrmals täglich vorkommen. Daher wird ein wöchentlicher Takt verwendet und die Ergebnisse mit entsprechendem Zeitstempel versehen.

# 7 Zusammenfassung

In diesem Vorhaben sind gezielte Entwicklungsarbeiten am Rechencode COCOSYS zur verbesserten Simulation von spezifischen Phänomenen in Containments von Leichtwasserreaktoranlagen durchgeführt worden. Die erzielten Modellverbesserungen betreffen physikalische Modelle zu den Phänomenen des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens (im COCOSYS-Modul NewAFP), zur Thermohydraulik (im COCOSYS-Modul THY) und zum Schmelzeverhalten im Containment (im COCOSYS-Modul CCI). Dabei sind Phänomene betrachtet worden, die bei Unfallbedingungen bzw. Bedingungen schwerer Störfälle auftreten, wie auch Phänomene, die beim Betrieb bzw. bei Störfällen relevant sind. Im Rahmen dieser Arbeiten sind sowohl aktuelle wissenschaftliche Erkenntnisse aus der Reaktorsicherheitsforschung zu den Phänomenen als auch der Erfahrungsrückfluss von Anwendern bei der GRS und bei externen Organisationen integriert worden.

Ein wesentlicher Meilenstein dieses Vorhabens stellt die verbesserte Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET bzw. ATHLET-CD dar. In der GRS-Rechenkette AC<sup>2</sup> sind gekoppelte Simulationen mit diesen Einzelcodes nötig, um die Phänomene an der Schnittstelle zwischen den Rechengebieten der Codes bzw. die Wechselwirkungen zwischen Containment und Primärkreis bei der Berechnung von Zuständen im Containment detailliert berücksichtigen zu können. Die Integration der genannten Einzelprogramme in AC<sup>2</sup> erfordert eine Zusammenführung der Strategien für alle drei Codeentwicklungen und eine Harmonisierung bzw. Anpassung des Erscheinungsbildes und der Schnittstellen (zwischen den Einzelcodes sowie zum Anwender) sowie der nötigen Arbeitsschritte für die Weitergabe neuer Versionen des Programmpakets an andere Nutzer. Hierzu sind im Rahmen des Vorhabens wesentliche Beiträge geleistet worden.

Mit den durchgeführten Arbeiten wird gewährleistet, dass COCOSYS für aktuelle und zukünftige Fragestellungen anwendbar ist und die GRS den Stand von W&T weiterhin mitprägen kann.

### Arbeiten zur Kopplung der Rechencodes in AC<sup>2</sup>

Während eines gekoppelten Rechnungslaufs müssen periodisch Daten zwischen den Einzelcodes ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS ausgetauscht werden. Dies regelt die Kopplungsmethode auf der Basis der vordefinierten Schnittstellen in den Rechenprogrammen.

Die Kopplungsmethode spezifiziert, wie Informationen zwischen den einzelnen Programmteilen ausgetauscht werden. Diese Kopplungsmethode muss einerseits der sachgerechten Kopplung von Phänomenen und technischen Prozessen, und andererseits die softwaretechnische Kapselung von Programmeinheiten berücksichtigen. So ist der Eintrag von Spaltprodukten in die Atmosphäre des Containments durch ein Leck im Primärkreis ein sachlicher Kopplungsaspekt zwischen ATHLET-CD (Spaltprodukttransport im Primärkreis) und COCOSYS (Spaltprodukttransport im Containment). Dagegen ist die Kapselung von Daten und ausführbarem Code in Form von vorübersetzten Programm-Bibliotheken und dynamischem Speicher, sowie die softwaretechnische Methode, zu bestimmten Zeiten flexibel Speicherzugriffe zwischen ATHLET-CD und COCOSYS), ein softwaretechnischer Aspekt.

Sowohl die Kopplungsmethode als auch die Schnittstelle müssen so angelegt sein, dass Änderungen hieran, z. B. bei notwendigen Änderungen an der Datenübergabe aufgrund der Weiterentwicklungen von Einzelmodellen, möglichst fehlerfrei und mit geringem Aufwand erfolgen können. Ein Kernpunkt des Vorhabens war die Erstellung einer verbesserten Kopplungsmethode zwischen den Einzelcodes COCOSYS und ATHLET / ATHLET-CD. Die bislang genutzte Software-Technik zur Kopplung war im Hinblick auf die genannten Anforderungen nicht zukunftsfähig. Aus diesen Gründen wurde in diesem Vorhaben eine neue, geeignete Kopplungsmethode zwischen COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD erarbeitet und etabliert.

Alle relevanten sachlichen (bzw. physikalischen) Kopplungen sind nun in AC<sup>2</sup> prinzipiell realisiert. In früheren Programmversionen gab es bei dem Wärmedurchgang von ATHLET-Strukturen der Kühlkreisläufe nach COCOSYS Vereinfachungen: Unter Kenntnis von Druck und Temperatur im angebundenen Containmentraum wurde der Wärmestrom von ATHLET berechnet und in die entsprechende COCOSYS-Zone eingebunden, d. h., dass die containmentseitigen Wärmeübergangsmodelle in COCOSYS, z. B. zur freien Konvektion, zur Berechnung dieser Wärmedurchgänge nicht genutzt werden konnten. In diesem Vorhaben ist die Nutzung der COCOSYS-Wärmeübergangsmodelle sukzessive in den gekoppelten Rechnungen ermöglicht worden. Die Verfügbarmachung aller COCOSYS-Modelle in der Kopplung zu ATHLET soll im Nachfolgevorhaben fertiggestellt werden.

Weiterhin wurde an der Veröffentlichung einer ersten (AC<sup>2</sup>\_v1.0, November 2018) und einer zweiten Version (AC<sup>2</sup> 2019.1, Juli 2020) von AC<sup>2</sup> mitgewirkt, die auf dem

Codeportal der GRS (<u>https://user-codes.grs.de/</u>) für lizensierte Anwender bereitgestellt werden. Es wurde ferner eine Standardisierung der gekoppelten Anwendung der Codes im Rahmen von AC<sup>2</sup> erarbeitet, sodass der Nutzer mit Unterstützung einer graphischen Oberfläche (GUI) mit wenigen Interaktionen eine gekoppelte Rechnung starten kann.

#### Arbeiten am neuen Modul zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten: NewAFP

Die Modelle zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten sind in einem entsprechenden COCOSYS-Modul untergebracht. Seit Anbeginn der COCOSYS-Entwicklung war dieses Modul unter dem Namen AFP (**A**erosol **F**ission **P**roducts) gepflegt und aktualisiert worden. Das Modul AFP besitzt jedoch verschiedene Einschränkungen. Hierzu zählt u. a., dass AFP in verschiedenen Programmteilen bzw. Modellen unterschiedliche Bilanzen für Stoffmengen führt und diese daher nicht einheitlich bzw. konsistent auf allen Ebenen (Molekülen, Elementen oder Isotopen) sind. Ferner erlaubt das Konzept von AFP z. B. nicht die Berücksichtigung unterschiedlicher Randbedingungen auf realen Strukturen in einem Raum für die relevanten Phänomene bei Wärmeübergängen (z. B. Kondensation) und Aerosoltransportprozessen (z. B. Abwaschen von Aerosolen) und Iodchemie. Auch sind inkonsistente Beschreibungen der Geometrien zwischen den Aerosol-, Iod- und Spaltproduktmodellen in AFP und im THY-Modul möglich, die vom Nutzer verhindert werden mussten. Zudem entspricht die Programmierung von einzelnen Programmteilen in AFP nicht mehr dem AC<sup>2</sup>-Standard.

Eine Umstrukturierung des Moduls AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten war bereits Gegenstand von RS1532 /SPE 17/. Basierend auf den Vorarbeiten sind mit Ablauf dieses Vorhabens die meisten relevanten Modelle aus der alten Struktur des AFP-Moduls in die neue Struktur inhaltlich überführt worden. Hierbei zeigte sich, dass die zunächst als Umstrukturierung angedachte Weiterentwicklung den gestellten Anforderungen nicht gerecht werden konnte. sodass eine vollständige Neuprogrammierung des Moduls erforderlich wurde. Aufgrund dieses Sachverhaltes wurde das neue Modul NewAFP genannt. In NewAFP sind auch erweiterte bzw. neue Modelle verfügbar, z. B. für das Abwaschen von unlöslichen Aerosolen von Strukturen, die Wechselwirkung von Silber-Aerosolen mit flüchtigem lod oder das Auswaschen von gasförmigen lodspezies in Sprühsystemen über mehrere Zonen hinweg.

In diesem Vorhaben wurden umfangreiche Einzelarbeiten durchgeführt, um NewAFP im Hinblick auf die benötigte Anwendungstauglichkeit (was z. B. die Stabilität und Belastbarkeit der berechneten Aussagen angeht) auf einen Stand zu bringen, der es ermöglicht, das neue Modul als Vorab- bzw. β-Version an andere Organisationen weiterzugeben, um es für Forschungszwecke einzusetzen.

Mit NewAFP sind bereits erste Analysen von internen und externen Anwendern (z. B. Framatome, KIT) durchgeführt worden. Die Arbeiten sind noch nicht abgeschlossen, da die GRS-Rechenkette hinsichtlich der Berechnung von Nuklidinventaren in Reaktorkernen zurzeit auf den von GRS und PSI gemeinsam entwickelten Rechencode VENTINA umgestellt wird, womit starke Auswirkungen auf die Modelle in NewAFP bzgl. des Isotopenverhaltens verbunden sind.

#### Verbesserungen von thermohydraulischen Einzelmodellen

Die COCOSYS-Modelle zur Thermohydraulik im Containment sind weitgehend validiert. Die hier durchgeführten Arbeiten betreffen verschiedene Einzelphänomene:

In vielen fortschrittlichen Reaktorkonzepten ist als ultimative Wärmesenke die passive Wärmeabfuhr über die Außenwand des Containments vorgesehen. Bei der Simulation der Kühlung einer heißen Struktur mit einem ablaufenden Wasserfilm mit COCOSYS hatte sich in Einzelfällen gezeigt, dass unter siedenden Bedingungen des Wasserfilms und beginnendem Trockenfallen der Oberfläche unrealistisch hohe Wassertemperaturen berechnet werden können. Dieser Aspekt wurde im Vorhaben untersucht. Zur Berechnung der benetzten Fläche durch Wasserfilme auf einer Struktur steht in COCOSYS das von KIT Karlsruhe entwickelte Rivulet-Modell /HUA 15a/ zur Verfügung. Das Modell wurde im Vorhaben RS1579 in einem Datensatz zur Simulation des Wärmeübergangs bei der Containmentaußenkühlung für die WAFT-Anlage angewendet, um möglichen Bedarf für Modellverbesserungen zu identifizieren. In diesem Zusammenhang wurden ergänzende Verbesserungen im Lösungsverfahren für die Ermittlung der Wasserfilmtemperatur erprobt, die aber noch nicht zufriedenstellend sind. Nach Rücksprache mit Experten bei KIT sollen nun die existierenden Modelloptionen zur Simulation von Wasserfilmen (d. h. für Bedingungen bei Verdampfung oder Kondensation) überarbeitet und ihre Einbindung in COCOSYS harmonisiert werden. Diese Verbesserungen sollen im Rahmen des geplanten KIT-Projektes VEKOCO erfolgen.

Bei Auslegungsstörfällen und Unfällen in Kernkraftwerken können im Containment unter bestimmten Bedingungen gasförmige Gegenströmungen, zum Beispiel in engen Strömungsverbindungen zwischen Räumen, auftreten. Deren Einfluss auf die Thermohydraulik im Containment war noch nicht ausreichend untersucht. In diesem Vorhaben sind die wichtigsten Regimes bei einer gasförmigen Gegenströmung identifiziert worden. Darauf aufbauend ist ein neuer Modellansatz, der eine Näherung der physikalischen Einflüsse bei den einzelnen Regimes erlaubt, in COCOSYS implementiert worden. Grundlegende Annahme dieses Ansatzes ist, dass Druckverluste aufgrund von Turbulenzen bei gasförmigen Gegenströmungen in engen Strömungsverbindungen möglich sind. In der Anwendung auf realistische Szenarien in den Versuchsanlagen PANDA und THAI+ wurde die Relevanz dieses Phänomens studiert. Die resultierenden Effekte des neuen Modells wurden dabei numerisch untersucht und offene Modellparameter anhand eines Vergleichs mit einer CFD-Simulation ausgewertet. Mit dem neuen Modellansatz können lokale Strömungsgeschwindigkeiten genauer simuliert werden. Dies kann für lokale Effekte in den Strömungsverbindungen von Bedeutung sein, die von den lokalen Strömungsgeschwindigkeiten beeinflusst werden, wie z. B. das Ablagern bzw. Aufwirbeln von Aerosolen.

Im Lumped-Parameter-Konzept von COCOSYS werden Räume des Containments bzw. von Versuchsanlagen durch Kontrollvolumina (Zonen) abgebildet. Im Nichtgleichgewichts- und DRASYS-Zonenmodell von COCOSYS wurde bislang ein konstantes Gesamtvolumen der Zone angenommen. In der Praxis sind Fragestellungen von Interesse, zur Klärung derer eine prozessabhängige Volumenänderung berücksichtigt werden sollte. Z. B. bewirken in den Nasskondensatoren in WWER-440/213-Anlagen Druckdifferenzen über die 3 mm dünnen Stahlwände eine elastische Verformung und damit Volumenänderungen der anliegenden Zonen, was den Druckaufbau ebenfalls beeinflusst. Daher wurden im Vorhaben Arbeiten durchgeführt, um die Auswirkung einer prozessabhängigen Volumenänderung auf die Thermohydraulik zu berücksichtigen. In relevanten Zonen wird jetzt in COCOSYS das totale Volumen als Integrationsgröße geführt und ist damit prinzipiell in einzelnen oder verbundenen Zonen prozess- oder zeitabhängig veränderbar, was dann bei der Lösung der Differentialgleichungen für den Zonenzustand berücksichtigt wird. Die prinzipielle Möglichkeit der Anderung des totalen Zonenvolumens konnte bereits anhand eines einfachen 2-Zonen-Modells ohne Quellen und Senken gezeigt werden.

Geflutete Raumbereiche bzw. Wasserpools können in COCOSYS mit dem Nichtgleichgewichtszonenmodell simuliert werden. In diesem Modell kann eine Zone teilweise mit Wasser gefüllt sein (Sumpf oder Wasserpool), welches nicht im thermischen Gleichgewicht mit der Atmosphäre steht. Der Wasserstand in einer Zone kann sich über spezielle Strömungsverbindungen mit Nachbarräumen (bzw. Zonen) ausgleichen. Wenn ein komplettes Auffüllen von Raumbereichen mit Wasser berücksichtigt werden soll, kann dies mit Hilfe einer weitergehenden Unterteilung der Kontrollvolumina im Bereich des Wassers unter Nutzung der Strömungsverbindungen des ATM\_FULL-Typs simuliert werden. Über ATM\_FULL-Verbindungen wird sowohl Gas als auch Wasser zwischen COCOSYS-Zonen transportiert. In diesem Arbeitspaket wurden verschiedene Korrekturen und Verbesserungen zur Simulation von Raumflutungen durchgeführt. Ergänzt wurden z. B. die automatische Berechnung der charakteristischen Länge und die korrekte Aufteilung von segmentierten Flächen (d. h. in Bezug auf die Aufteilung von Flächenanteilen einer Struktur über und unter Wasser) bei veränderlichem Wasserspiegel für die Ermittlung von Wärmeübergangskoeffizienten in den verschieden Wärmeübergangsmodellen in COCOSYS. Ferner wurden Verbesserungen in der Ermittlung (Detektion) von gefüllten Zonen und der weiteren numerischen Behandlung dieses Zonenzustandes durchgeführt.

#### Modellverbesserungen zur Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens

Bei einem Kernschmelzunfall kann nach Versagen des RDB Kernschmelze ins Containment ausgetragen werden. Die Wechselwirkung dieser Ex-Vessel-Kernschmelze mit Strukturen wird mit dem COCOSYS-Modul CCI (Corium-Concrete-Interaction) simuliert. Dieses besteht im Kern aus einer gemeinsam mit IRSN erarbeiteten Version des Rechencodes MEDICIS /NEA 17a/ zur Simulation von Schmelze-Beton-Wechselwirkungen (MCCI). Das Modul ist im Rahmen von Benchmarks und Code-Vergleichen vielfach untersucht und validiert worden. In diesem Arbeitspaket sind mögliche Rückwirkungen aus aktuellen Fortschritten im internationalen Kenntnisstand (u. a. zu neuen Daten für Schmelze-Beton-Wechselwirkung mit basaltischem Beton wie im KKW Fukushima Daiichi) auf den Modellstand im CCI-Modul ausgewertet worden. Verbesserungen am Modellstand erfolgten vor allem auf der Basis von Rückflüssen aus einzelnen Anwendungen, in denen Einzelprobleme unter bestimmten Randbedingungen aufgetreten waren (z. B. zur Datenkommunikation zwischen CCI- und anderen Modulen in COCOSYS).

Weiterhin wurden Arbeiten durchgeführt, um zukünftig in Unfallsimulationen mit COCOSYS eine sogenannte Schüttbettkonfiguration zu berücksichtigen. Die durchgeführten Arbeiten schaffen eine Modellbasis, um die Vorgänge nach Eintrag von Kernschmelze in wassergefüllte Räume im Containment zu berücksichtigen, die zu einer ausreichenden Fragmentierung der kompakten Kernschmelze führen können. Mit dem mechanistischen Rechencode COCOMO /BUC 16/, der zur Simulation der Entstehung und Kühlung eines Schüttbettes aus Schmelzepartikeln beim IKE Universität Stuttgart entwickelt wird, wurde eine Matrix von repräsentativen Rechenfällen und -ergebnissen erzeugt, die die zu erwartenden Anfangsbedingungen bei möglichen

Schüttbettszenarien in einer Reaktoranlage näherungsweise abdeckt. Der für COCOSYS verfolgte Modellansatz sieht vor, dass nach der Charakterisierung des Schüttbettes (wie z. B. Höhe des Schüttbettes, Porosität, Partikelgrößen etc.) die Kühlbarkeit des Schüttbettes auf Basis dieser Ergebnismatrix ausgewertet wird. Im Falle der positiven Beurteilung der Schüttbettkühlbarkeit soll die Kühlung der Ex-Vessel-Schmelze in Form einer Schüttbett-Konfiguration zukünftig weiter in COCOSYS simuliert werden können. Die Arbeiten sollen im nachfolgenden Projekt mit der Ergänzung einer entsprechenden Schüttbettcharakterisierung im Modellumfang des CCI-Moduls fortgeführt werden.

Für die Betrachtung der Rückhaltung einer kompakten Kernschmelze im Containment im Rahmen eines Core-Catcher-Konzeptes (wie beim EPR oder beim WWER-1200) mit Kühlung der Schmelze durch Wasser nach Flutung von Kühlkanälen an Seitenwänden / Boden und freier Oberfläche der Schmelze wurde im Vorhaben ein generisches Modell in COCOSYS entwickelt und implementiert. Dieses wird zurzeit im COCOSYS-Validierungsvorhaben RS1579 erprobt. Verbesserungsbedarf wurde bereits für die Berücksichtigung von Siedevorgängen an heißen Strukturen unter Wasser identifiziert. Geeignete Modellverbesserungen zu diesem Phänomen sollen in einem separaten Vorhaben erarbeitet werden.

Für die Analyse von Schmelzeausbreitungen steht COCOSYS-Nutzern das separate Modell LAVA zur Verfügung. Der gültige Anwendungsbereich umfasst aber nicht alle möglichen Randbedingungen. Daher kann LAVA nicht für jeden Fall von Schmelzeausbreitungsvorgängen als generelles Analysewerkzeug zur standardmäßigen Anbindung an COCOSYS verwendet werden. Stattdessen ist basierend auf Vorarbeiten in /SPE 12/ ein auf theoretischen Grundlagen basierendes Diagnoseverfahren für Schmelzeausbreitungsvorgänge in COCOSYS eingebaut worden. Die Diagnose beruht auf den entkoppelt betrachteten, konkurrierenden Prozessen Ausbreitung und Erstarrung. Es werden bewährte, theoretische Näherungen für die Berechnung einer zeitabhängigen Position der Schmelzefront im Ausbreitungsraum verwendet und eine mittlere Höhe des Schmelzevolumens im Ausbreitungsraum unter der Annahme abgeschätzt, dass sich die Schmelze nicht abkühlt. Dies wird mit der zeitlich zunehmenden Krustendicke verglichen, die durch den Einfluss der Abkühlung entsteht. Es wird angenommen, dass die isotherm gerechnete Ausbreitung gestoppt wird, sobald diese Krustendicke einen kritischen Anteil an der mittleren Schmelzehöhe erreicht hat bzw. diesen übersteigt. Am Beispiel des Experimentes ECOKATS-1 wurde gezeigt, dass für die Bewertung der Ausbreitungseffizienz eine signifikante Unsicherheit zu berücksichtigen ist. Für die

Verwendung des Kriteriums in COCOSYS wird basierend auf empirischen Auswertungen von Experimenten mit Schmelzeausbreitung ein Referenzwert sowie ein entsprechender Unsicherheitsbereich empfohlen.

# Querschnittsaktivitäten

In dem Vorhaben erfolgte ein intensiver fachlicher Austausch mit internationalen Experten und Arbeitsgruppen zu den fachlichen Einzelzielsetzungen des Vorhabens. Es wurde an relevanten Arbeitsgruppen von IAEA, OECD, NUGENIA mitgewirkt und an internationalen Fachkonferenzen teilgenommen.

In Abhängigkeit des Entwicklungsfortschritts werden allen COCOSYS- bzw. AC<sup>2</sup>-Anwendern regelmäßig neue, validierte Programmversionen über ein Web-Portal zur Verfügung gestellt. Zahlreiche Rückflüsse von internen und externen Anwendern wurden zeitnah ausgewertet und mögliche Verbesserungen von COCOSYS geprüft.

Mit dedizierten Arbeiten und Techniken wurden die Vorgaben der GRS für die Qualitätssicherung bei der Codeentwicklung im Vorhaben umgesetzt. Dies umfasst z. B. die Nutzung aktueller Methoden und Tools des Softwaremanagements, die durch den in 2020 erfolgten Umstieg zum Softwaremanagementsystem GitLab verfügbar geworden sind, wie auch den Ausbau der regelmäßigen Überprüfung des Codeentwicklungsfortschrittes im Rahmen einer Continuous-Integration-Methodik (CI) sowie durch das Regressionstesten. Da COCOSYS als Modul des Programmpakets AC<sup>2</sup> zur Verfügung gestellt wird, rückt hierbei auch die gekoppelte Anwendung stärker ins Blickfeld.

# Ausblick

Die in diesem Vorhaben vorgenommenen Arbeiten zur Weiterentwicklung von COCOSYS und zur Integration von COCOSYS in AC<sup>2</sup> haben wesentlich dazu beigetragen, dass Anwender innerhalb und außerhalb der GRS Zustände und Vorgänge in Containments von Leichtwasserreaktoren umfassend und nach neusten wissenschaftlichen Erkenntnissen untersuchen und bewerten können. Dabei wurden weitere Arbeitspunkte und Verbesserungspotentiale identifiziert, die im Rahmen eines Nachfolgevorhabens bearbeitet werden sollen. Die aus Sicht der GRS wichtigsten Arbeitspunkte sind wie folgt:

Nachdem in diesem Vorhaben damit begonnen wurde, die Nutzung der COCOSYS-Wärmeübergangsmodelle sukzessive in den gekoppelten

Rechnungen zu ermöglichen, soll dies in einem nächsten Schritt für alle übrigen Modelle umgesetzt werden.

- Im Bereich der Thermohydraulik gibt es hinsichtlich der adäquaten Berücksichtigung heißer Strukturen (unter Wasser) sowie des Wärmeübergangs an Strukturen, deren Geometrie von einfachen Platten bzw. Zylindern abweicht, weiteren Entwicklungsbedarf. Ferner soll ein Modell erstellt werden, mit dem der Wärmeübergang an der Außenseite der Wärmetauscherrohre von Gebäudekondensatoren die relevanten Regimes (Konvektion, diffusionskontrollierte Kondensation, Wärmeleitung durch die Wasserhaut) für sowohl horizontale als auch vertikale Rohre/Rohrbündel berechnet werden kann.
- Das bereits bei der GRS und externen Partnern verwendete Modul NewAFP zur Untersuchung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens enthält Modell-Neuentwicklungen, z. B. für das Abwaschen von unlöslichen Aerosolen von Strukturen, die Wechselwirkung von Silber-Aerosolen mit flüchtigem Iod oder das Auswaschen von gasförmigen Iodspezies in Sprühsystemen über Zonengrenzen hinweg. In Nachrechnungen von Einzel-Effekt-Versuchen zeigen diese Modelle zwar großes Potential, sollten aber in ihrer Wechselwirkung mit anderen Effekten, z. B. in der Nachrechnung von Integral-Experimenten bzw. Anlagenanwendungen noch weiter untersucht werden.
- Im Hinblick auf das Ex-Vessel-Schmelzeverhalten und aufbauend auf den vorhandenen Rechendaten zur Dryout-Wärmestromdichte in Ex-Vessel-Schüttbetten erscheint es zielführend, in COCOSYS ein ablauffähiges Modell zu integrieren, um in Unfallsimulationen eine sogenannte Schüttbettkonfiguration als Alternative zur nicht kühlbaren MCCI-Konfiguration zeitabhängig simulieren zu können.

# Literaturverzeichnis

- /AEA 96/ AEA Technology (Hrsg.): Multiple Pressure Tube Rupture/Cavity Overpressure, Final report of Task Group 2.8, RBMK Safety Review, Second Phase, TACIS RBMK2/TG2/Issue 2, EC contract WW 93.06/01.02/B007. 1996.
- /ALS 04/ Alsmeyer, H., Cron, T., Foit, J. J., Messemer, G., Schmidt Stiefel, S., Häfner, W., Kriszio, H.: Test Report of the Melt Spreading Tests
   ECOKATS-V1 and ECOKATS-1, ECOSTAR Project Report. Hrsg.: Forschungszentrum Karlsruhe (FZK), SAM-ECOSTAR-D15, 2004.
- /AME 99/ Amerstein, V.: Stress Analysis Report (Deliverable 3.2), Project PH 2.13/95
   Bubble Condenser Experimental Qualification. Hrsg.: VUEZ, BC-D-VU-EA -0008: Levice, Slovakia, 1999.
- /ARE 03/ AREVA GmbH (AREVA) (Hrsg.): SWR 1000 An Advanced Boiling Water Reactor with Passive Safety Features. 2003.
- /ARN 18/ Arndt, S., Spengler, C., Reinke, N., Sonnenkalb, M.: COCOSYS 3.0 Quality Assurance Handbook. Hrsg.: Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): K
  öln, 2018.
- /ARN 19/ Arndt, S., Band, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G., Brückner, N.: COCOSYS 3.0.1 User Manual. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 1, Rev. 54, Juni 2019.
- /AUS 19/ Austregesilo, H., Bals, C., Langenfeld, A., Lerchl, G., Schöffel, P. J., Skorek, T., Cron, D. von der, Weyermann, F.: ATHLET 3.2 Models and Methods. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-1/Vol. 4 Rev. 5, Februar 2019.
- /BAK 14/ Bakalov, I.: Feasibility of simulating the processes in a core catcher for new NPPs with WWER reactors with the MEDICIS module, Technical Note, Bericht zum Vorhaben 3611R01504. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-3611R01504–13/2014, 2014.

- /BAK 18/ Bakalov, I., Spengler, C., Foit, J.: Interpretation of the VULCANO VBES-U5 test applying the MCCI Model in COCOSYS. In: CEA (Hrsg.): SAFEST Final Seminar on Severe Accident Experimental Research. Cadarache Castle, France, 10. - 12. Dezember 2018, 2018.
- /BAK 20/ Bakalov, I., Spengler, C.: Interpretation of SSM test series by the CCI module in COCOSYS, Technical Note, Bericht zum Vorhaben RS1579. Hrsg.:
   Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS):
   Köln, 2020.
- /BUC 16/ Buck, M., Pohlner, G.: Ex-Vessel Debris Bed Formation and Coolability Challenges and Chances for Severe Accident Mitigation. In: ANS (Hrsg.): International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP) 2016. San Francisco, California, 2016.
- /BUC 17/ Buck, M., Pohlner, G., Trometer, A.: Analyse schwerer Störfälle in Leichtwasserreaktoren zur Evaluierung und Optimierung von Severe-Accident-Maßnahmen, Teilprojekt WASA-BOSS-C (BMBF 02NUK028C) im Verbundprojekt WASA-BOSS: Weiterentwicklung und Anwendung von Severe Accident Codes – Bewertung und Optimierung von Störfallmaßnahmen. Hrsg.: Universität Stuttgart, IKE (IKE), IKE 2-169, 2017.
- /BUC 18/ Buchholz, S., Mull, T., Wagner, T., Hristov, H., Gehr, R., Kaczmarkiewicz, N., Bonfigli, G., Sporn, M., Schuster, C., Schäfer, F., Schleicher, E.: EASY Integrale experimentelle und analytische Nachweise der Beherrschbarkeit von Auslegungsstörfällen allein mit passiven Systemen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-, Nr. 527: Köln, August 2018.
- /CHE 66/ Chen, J. C.: Correlation for Boiling Heat Transfer to Saturated Fluids in Convective Flow. Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. (Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development), Bd. 5, Nr. 3, S. 322–329, DOI 10.1021/i260019a023, 1966.
- /CHE 19/ Chen, Y., Ma, W.: Development of surrogate model for debris bed coolability analysis. In: ANS (Hrsg.): NURETH-18, International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Portland, Oregon, 2019.

- /COL 72/ Collier, J. G.: Convective boiling and condensation. 421 S, ISBN 9780070844025, McGraw-Hill: London, 1972.
- /DEL 17/ Del Corno, A., Morandi, S., Cavallari, A., Parozzi, F.: PASSAM WP3.1: RSE experimental studies on the effect of hydrodynamics on aerosol retention in pool scrubbing systems. Ricerca sul Sistema Energetico – RSE, PASSAM-EXIST-T20, 2017.
- /DU 20/ Du, K., Hu, P., Hu, Z.: Numerical Investigation of Water Film Evaporation with the Countercurrent Air in the Asymmetric Heating Rectangular Channel for Passive Containment Cooling System. Science and Technology of Nuclear Installations, Bd. 2020, S. 1–17, DOI 10.1155/2020/5924325, 2020.
- /FAR 10a/ Farmer, M. T., Lomperski, S., Kilsdonk, D. J., Aeschlimann, R. W.: OECD MCCI-2 Project, Final Report. Hrsg.: Argonne National Laboratory (ANL), OECD/MCCI-2010-TR07, 2010.
- /FAR 10b/ Farmer, M. T., Aeschlimann, R. W., Kilsdonk, D., Lomperski, S.: Category 2: Water-Cooled Basemat (WCB-1) Test Investigating Core Melt Stabilization Using a Water-Cooled Surface, MCCI Seminar 2010. In: OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): MCCI - Seminar. CEA, Cadarache, France, 01.01.2010 00:00:00 - 2010, 2010.
- /FIS 10/ Fischer, M., Henning, A., Surmann, R.: The Core Melt Stabilization Systems of ARVEA NP's EPR and ATMEA1 Reactor, Presentation. In: OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): MCCI - Seminar. CEA, Cadarache, France, 01.01.2010 00:00:00 - 2010, 2010.
- /FOI 14/ Foit, J. J.: MCCI of a metal and oxide melt with reinforced siliceous concrete in MOCKA experiments. In: ASME (Hrsg.): 22th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE). Prague, 2014.
- /FOI 19/ Foit, J. J., Cron, T., Fluhrer, B.: Melt/Concrete Interface Temperature Relevant to MCCI Process. In: ÚJV Řež: ERMSAR2019, The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR 2019, Prague, Czech Republic, 18. 20. März 2019, 2019.

- /FRE 16/ Freitag, M., Schmidt, E., Gupta, S., Colombet, M., Kühnel, A., Laufenberg,
   B. von: Commissioning test of the Two Vessel Configuration, Test TH-27.
   Becker Technologies GmbH, 1501455-FB/TR-TH27, März 2016.
- /GRS 20/ Gesellschaft f
  ür Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): AC<sup>2</sup>
   Overview. Erreichbar unter "https://user-codes.grs.de/AC2", Stand von 2020.
- /HUA 15a/ Huang, X., Cheng, X., Klein-Heßling, W.: Evaluation of Passive Containment Cooling with an Advanced Water Film Model In a Lumped-Parameter Code. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): NURETH-16, 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Chicago, 2015, 2015.
- /HUA 15b/ Huang, X.: Study on Water Film Cooling for PWR's Passive Containment Cooling System. 127 S., 2015.
- /IAEA 96/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): Report of a Consultants Meeting on Guidelines for WWER 440/213 Con-tainment Evaluation, TC Project RER/9/035. IAEA/TA-2488, WWER-SC-170: Wien, 1996.
- /IAEA 19a/ International Atomic Energy Agency (IAEA) (Hrsg.): Status and Evaluation of Severe Accident Simulation Codes for Water Cooled Reactors. Vienna, 9. 12. Oktober 2017, IAEA-TECDOC-, Bd. 1872, 87 S., ISBN 978-92-0-102919-5, IAEA: Vienna, 2019.
- /IAEA 19b/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Deterministic Safety Analysis for Nuclear Power Plants, Specific Safety Guide. IAEA Safety Standards Series, SSG-2 (Rev. 1), ISBN 978-92-0-102119-9, IAEA, 2019.
- /ILI 19/ Iliev, D.: New developments in the thermal hydraulic module THY of the COCOSYS program, part of the AC 2 software package: turbulence in gaseous countercurrent flows. Kerntechnik, Bd. 84, Nr. 5, S. 453–466, DOI 10.3139/124.190078, 2019.

- /KAS 20/ Kashuai, D., Po, H., Zhen, H.: Numerical Investigation of Water Film Evaporation with the Countercurrent Air in the Asymmetric Heating Rectangular Channel for Passive Containment Cooling System. Science and Technology of Nuclear Installations, Volume 2020, 2020.
- /KLE 17/ Klein-Hessling, W., Sonnenkalb, M., Zemitis, A., Iliev, O., Steiner, K.: Application of a coupled CFD/LP code approach for containment simulations of a konvoi type PWR plant. In: ANS (Hrsg.): NURETH-17, 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Xi'an, China, 2017.
- /KLO 19/ Kloos, M.: SUSA Version 4.2, User's Guide and Tutorial. GRS-P-5 Vol. 1 Rev. 5, Juni 2019.
- /LEI 17/ Leininger, S.: Experimentelle Untersuchungen der Kühlbarkeit prototypischer Schüttungskonfigurationen unter dem Aspekt der Reaktorsicherheit, Dissertation. Universität Stuttgart, IKE (IKE), 2017.
- /LIP 82/ Lipinski, R.: A Model for Boiling and Dryout in Particle Beds. U.S. Nuclear Regulatory Commission (NRC), NUREG-CR-2646; SAND82-0765, 198 S., 1982.
- /MAR 22/ Marchetto, C., Ha, K. S., Herranz, L. E., Hirose, Y., Jankowski, T., Lee, Y., Nowack, H., Pellegrini, M., Sun, X.: Overview and main outcomes of the pool scrubbing lumped-parameter code benchmark on hydrodynamic aspects in IPRESCA project, Submitted for publication. In: ANS (Hrsg.): NURETH-19, International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Brussels, 2022.
- /MEL 99/ Melikhov, V.: Quick Look Report, Test No.: 5, VVER 440-213 Bubble Condenser Experimental Qualification, Task 2 TH and FSI Tests, Project PH 2.13/95: Bubble Condenser Experimental Qualification. Hrsg.: EREC Electrogorsk, BC-D-ER-SI-0024, 1999.
- /NEA 03/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): Answers to remaining questions on Bubbler Condenser - Activity Report of the OECD NEA Bubbler-Condenser Steering Group. NEA/CSNI/R(2003)12, 2003.

- /NEA 17a/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): State-of-the-Art Report on Molten Corium Concrete Interaction and Ex-Vessel Molten Core Coolability. OECD/NEA: Paris, 2017.
- /NEA 17b/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): Safety Research Opportunities Post-Fukushima, Initial Report of the Senior Expert Group. 2017.
- /NEA 20/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): NEA Reduction Of Severe Accident Uncertainties (ROSAU) Project. Erreichbar unter https://www.oecd-nea.org/ jointproj/rosau.html, abgerufen am 8. Mai 2020.
- /OECD 12/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): OECD/SETH-2 Project PANDA and MISTRA Experiments Final Summary Report: Investigation of Key Issues for the Simulation of Thermal-hydraulic Conditions in Water Reactor Containmen. NEA/CSNI/R(2012)5, April 2012.
- /OWC 91/ Owczarski, P. C., Burk, K. W.: SPARC-90: A code for calculating fission product capture in suppression pools. DOI 10.2172/6120360, 1991.
- /PEL 20/ Pellegrini, M., Herranz, L., Sonnenkalb, M., Lind, T., Maruyama, Y., Dolganov, K., Morreale, A., Bixler, N., Gauntt, R. O., Sevon, T., Jaquemain, D., Journeau, C., Song, J. H., Nishi, J., Mizokami, S.: Main Findings, Remaining Uncertainties and Lessons Learned from the OECD/NEA BSAF Project. Nuclear Technology, Bd. 2020, 2020.
- /POH 18/ Po, H.: 答复: 发送电子邮件: Evaporation test, Boiling test. E-mail from SJTU (Po Hu) to GRS (S. Arndt), June 26, 2018 with attach-ments "Boiling test\_rev2\_SJTU.docx" and "Evaporation test\_rev2\_SJTU.docx", 2018.
- /REI 19/ Reinke, N., Arndt, S., Bakalov, I., Beck, S., Buchholz, S., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Iliev, D., Nowack, H., Spengler, C., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Validierung & Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, Bd. 551, 436 S., ISBN 978-3-947685-36-3: Köln, 2019.

- /ROH 52/ Rohsenow, W. M.: A method of correlating heat transfer data for surface boiling of liquids. Transactions of the Americal Society of Mechanical Engineers, Nr. 74, S. 969–976, 1952.
- /SCH 15/ Schwarz, S., Sonnenkalb, M.: Bericht zum Vorhaben: "Analyse der Belastung von Gleitdruckventuriwäschern in SHBVentingsystemen von DWR-Konvoi und SWR-72 bei Unfällen". Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-, Nr. 3791, 212 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, August 2015.
- /SCH 18/ Schöffel, P. J., Herb, J., Langenfeld, A., Lerchl, G., Skorek, T., Cron, D. von der: Rechenmethodenentwicklung für Reaktorsicherheitsanalysen mit dem Systemcode ATHLET. GRS-, Bd. 497, 252 S., ISBN 978-3-946607-82-3, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, November 2018.
- /SPE 04/ Spengler, C., Allelein, H.-J., Foit, J.-J., Alsmeyer, H., Spindler, B., Veteau, J.-M., Artnik, J., Fischer, M.: Blind Benchmark Calculations for Melt Spreading in the ECOSTAR Project. In: ANS (Hrsg.): 2004 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP 2004). Pittsburgh, 2004.
- /SPE 10/ Spengler, C.: A Fast Running Method for Predicting the Efficiency of Core Melt Spreading for Application in ASTEC. In: Kerntechnische Gesellschaft e.V. (KTG) (Hrsg.): Jahrestagung Kerntechnik 2010. Berlin, 2010.
- /SPE 12/ Spengler, C., Arndt, J., Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eckel, J., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Pelzer, M., Reinke, N., Sievers, J., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-3654: Köln, 2012.

- /SPE 17/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung von Modellen für Stör- oder Unfallabläufe im Sicherheitsbehälter, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), ISBN 978-3-946607-67-0: Köln, 2017.
- /SPE 18/ Spengler, C., Bakalov, I., Reinke, N., Sonnenkalb, M.: Uncertainty and Sensitivity Analyses in Support of Model Development and Validation of the Containment Module COCOSYS of the AC<sup>2</sup> Code Application for Molten Corium/Concrete Interaction (MCCI). In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 14. 18. Oktober 2018, 2018.
- /THE 11/ Theler, G., Freis, D.: Theoretical critical heat flux prediction based on nonequilibrium thermodynamics considerations of the subcooled boiling phenomenon. Mecánica Computacional, XXX, S. 1713–1732, 2011.
- /WAL 02/ Walter, D., Schaffrath, A.: Berechnung des Notkondensators des Integralreaktors CAREM. Hrsg.: Forschungszentrum Rossendorf, FZR-351, 2002.
- /WAN 19/ Wang, F., Cheng, X.: Modeling approach of flowing condensate coverage rate on inclined wall for aerosol wash down. Nuclear Engineering and Design, Bd. 355, S. 110349, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110349, 2019.
- /WAN 20a/ Wang, J., Li, X., Allison, C., Hohorst, J. (Hrsg.): Nuclear power plant design and analysis codes, Development, validation, and application. Woodhead Publishing series in energy, 1 volume, ISBN 9780128181904, Woodhead Publishing: Oxford, 2020.
- /WAN 20b/ Wang, F., Cheng, X.: Extension and validation of aerosol wash-down model on inclined wall. Annals of Nuclear Energy, Bd. 2020, 2020.
- /WAN 21/ Wang, F., Cheng, X., Gupta, S.: COCOSYS analysis on aerosol washdown of THAI-AW3 experiment and generic containment. Annals of Nuclear Energy, Bd. 153, S. 108076, DOI 10.1016/j.anucene.2020.108076, 2021.

- /WEB 13/ Weber, G.: Ein COCOSYS-Modell für Metallfaser-Ventingfilter und Nachrechnung der ACE-Versuche AA19 und AA20. Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-, Nr. 3727, 90 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, September 2013.
- /WEY 19/ Weyermann, F., Spengler, C., Schöffel, P. J., Buchholz, S., Steinhoff, T., Sonnenkalb, M., Wielenberg, A., Schaffrath, A.: Development of AC<sup>2</sup> for the simulation of advanced reactor design of Generation 3/3+ and light water cooled SMRs. Kerntechnik, Bd. 84, Nr. 5, S. 357–366, DOI 10.3139/124.190068, 2019.
- /ZHA 12/ Zhang, S., Miassoedov, A., Liao, Y., Ruggieri, J. M., Shen, F., Gaus-Liu, X.: ALISA project. Access to large infrastructures for severe accidents in Europe and in China. 2012.
- /ZVO 19/ Zvonarev, Y., Semchenkov, Y.: Strategy of Corium Localization for VVERs under Severe Accident Conditions, Presentation. In: ÚJV Řež:
   ERMSAR2019, The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research. ERMSAR 2019, Prague, Czech Republic, 18. 20. März 2019, 2019.

# Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Durchführung einer gekoppelten Rechnung von ATHLET-CD und COCOSYS mithilfe der graphischen Benutzeroberfläche von AC <sup>2</sup>	.7
Abb. 2.2	Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der von COCOSYS empfangenen Masse (Stand von 2018)	14
Abb. 2.3	Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der von COCOSYS empfangenen Masse, aktueller Stand	16
Abb. 2.4	Schematischer Aufbau der Wärmekopplung eines ATHLET-HCO und einer COCOSYS-Struktur	19
Abb. 2.5	Eingabedaten der Struktur-HCO-Kopplung für COCOSYS und ATHLET.	20
Abb. 2.6	Vergleich des Wärmestroms zweier Rechnungen derselben Konfiguration mit HCO-Struktur-Kopplung im ATHLETCD_DRV (DrvStruc) und ATHLET-COCOSYS-PLUGIN mit HCO-Zonen- Kopplung (PlgnZone)	21
Abb. 2.7	Notkondensator im KERENA (Rohrbündel im Flutbecken)	22
Abb. 2.8	RDB-Außenkühlung bei KERENA /ARE 03/	23
Abb. 2.9	Allgemeine Siedekurve nach Nukiyama für den Zusammenhang zwischen Wärmestromdichte an der Heizfläche und dem Temperaturunterschied zwischen Heizfläche T <sub>w</sub> und Siedetemperatur des Wassers T <sub>s</sub> bei atmosphärischem Druck /THE 11/	25
Abb. 2.10	Beispiel-Geometrie für die Untersuchung des Siedens: Geometrie A mit Lüftung	28
Abb. 2.11	Beispiel-Geometrie für die Untersuchung des Siedens: Geometrie B ohne Lüftung	28
Abb. 2.12	Nodalisierung der Beispiel-Geometrie in COCOSYS	29
Abb. 2.13	Energieeinspeisung in die Boden-Platte	30
Abb. 2.14	Durchschnittliche Wassermasse in den unteren Zonen in Beispiel A	30
Abb. 2.15	Durchschnittliche Wassermasse in den unteren Zonen in Beispiel B	31
Abb. 2.16	Atmosphärischer Druck in Geometrie A	32
Abb. 2.17	Atmosphärischer Druck in Geometrie B	32
Abb. 2.18	Wassertemperatur in den unteren Zonen der Geometrie A	33

Abb. 2.19	Wassertemperatur in den unteren Zonen der Geometrie B	33
Abb. 2.20	Zeitlicher Verlauf der von ATHLET bilanzierten, ausgetragenen und der von COCOSYS empfangenen Masse (Stand von 2018)	35
Abb. 2.21	Aufteilung der Nachzerfallsleistung auf Athlet-Strukturen	36
Abb. 2.22	Graphische Benutzeroberfläche AC <sup>2</sup> 2019.1	38
Abb. 3.1	Hierarchischer Aufbau des neu entwickelten Speziesbaums	44
Abb. 3.2	Schematische Zeichnung des SCRUPOS-Experiments	53
Abb. 3.3	Dekontaminationsfaktor für I2 und RI in Abhängigkeit der Poolhöhe	56
Abb. 3.4	Dekontaminationseffizienz für gasförmige Spezies I <sub>2</sub> und RI als Funktion der Zeit im Vergleich zu Aerosolen	56
Abb. 3.5	Vergleich der I <sub>2</sub> -Konzentration im Sumpf und in den Gasbläschen ohne und mit berücksichtigtem Massentransfer (MT) an der Pooloberfläche	57
Abb. 3.6	ACE AA19 und AA20 Nodalisierung aus /WEB 13/	59
Abb. 3.7	Aerosolbilanz in Testrechnung	63
Abb. 3.8	Nachzerfallsleistung in Testrechnung	63
Abb. 3.9	Geschwindigkeiten in Testrechnung	64
Abb. 3.10	Temperaturen in Testrechnung	64
Abb. 4.1	COCOSYS-Modell der Stahlplatte der WAFT Anlage, Strukturen S10 bis S0 und der Auffangrinne WDBS sowie die Modellierung der Wasserbespeisung zur Simulation des PCCS	69
Abb. 4.2	COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung mit Rivulet-Modell, Bedeckungsgrad der Stahlplatte (hier Struktur S4)	71
Abb. 4.3	COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung ohne und mit Rivulet- Modell, Dicke des Wasserfilms entlang der Stahlplatte	71
Abb. 4.4	COCOSYS, WAFT Experiment 3-S, Rechnung ohne und mit Rivulet- Modell, Wärmeabfuhr von der Stahlplatte	72
Abb. 4.5	Einfluss der Zeitschrittweite auf den berechneten Bedeckungsgrad in COCOSYS, org = Begrenzung der Zeitschrittweite auf 4,5 s, dt = maximale Zeitschrittweite 50 s	74
Abb. 4.6	WAFT-Anlage, Wasserfilmtemperatur entlang der Platte – ohne Temperaturbegrenzung	77

Abb. 4.7	WAFT-Anlage, Wasserfilmtemperatur entlang der Platte – mit Temperaturbegrenzung	.77
Abb. 4.8	WAFT-Anlage, Wasserfilmdicke entlang der Platte – ohne Temperaturbegrenzung	.78
Abb. 4.9	WAFT-Anlage, Wasserfilmdicke entlang der Platte – mit Temperaturbegrenzung	.78
Abb. 4.10	COCOSYS-Nodalisierung für den Versuch THAI-TH-27 /FRE 16/	.79
Abb. 4.11	COCOSYS-Nodalisierung für den Versuch PANDA-SETH-4.1 /OECD 12/	. 80
Abb. 4.12	Schematische Abbildung einer Gegenströmung	. 82
Abb. 4.13	Abhängigkeit von $\zeta^{turb}$ von $Re^{rel}$	. 83
Abb. 4.14	Parallele Geschwindigkeiten im oberen Verbindungsrohr im TH-27- Versuch. Rot: Strömung im oberen Teil des Rohres; grün: Strömung im unteren Teil des Rohres; ohne $\zeta^{turb}$ (links) und mit $\zeta^{turb}_{max}$ =4 (rechts)	. 84
Abb. 4.15	Durchschnittliche Geschwindigkeiten, errechnet mit CFX, mit COCOSYS ohne $\zeta^{turb}$ und mit COCOSYS mit $\zeta^{turb}_{max}$ =0,25	. 85
Abb. 4.16	Schema der BC V-213-Anlage (links) /NEA 03/ und eines Nako- Segments (rechts) /AME 99/	. 88
Abb. 4.17	EREC BC V-213, Test Nr. 5, Bearbeitung der Messwerte zur Wandverformung	. 88
Abb. 4.18	Testrechnung, Volumenänderung als Funktion der Zeit	. 90
Abb. 4.19	Testrechnung, Einfluss der Volumenänderung auf den Zonendruck	. 90
Abb. 5.1	Geometrische Konfiguration eines Schüttbettes (a) mit eindimensionaler Zuströmung und einheitlicher Schüttbetthöhe (zylinderförmig), und eines Schüttbettes (b) mit mehrdimensionaler Zuströmung und variabler Schüttbetthöhe (kegelförmig) /CHE 19/	100
Abb. 5.2	COCOMO-Rechengitter für den gerechneten Referenzfall einer Schüttbettkonfiguration, rot: Schüttbett, dunkelblau: Wasserpool, hellblau: Gasraum	103
Abb. 5.3	Kumulative Verteilungsfunktion der COCOMO-Rechenfälle bezogen auf die spezifische Dryout-Wärmestromdichte	106
Abb. 5.4	Auswertung der Korrelationskoeffizienten für die Dryout- Wärmestromdichte in Abhängigkeit von Schüttbettparametern	107

Abb. 5.5	Prinzipskizze eines Core-Catchers beim WWER-1200 /ZVO 19/ 109
Abb. 5.6	Prinzipskizze des Core-Catchers beim EPR /FIS 10/ 109
Abb. 5.7	Schematischer Überblick über beteiligte Einheiten im Core-Catcher- Modell
Abb. 5.8	Definition der inneren Schnittstelle zwischen Kernschmelze und Opfermaterial in Form einer 2D-Punkteschar ( <i>r</i> , <i>z</i> )
Abb. 5.9	Axialsymmetrische Segmentierung der Core-Catcher-Seiten- und - Bodenplatte
Abb. 5.10	Resultierende Geometrie von Opfermaterial und Core-Catcher- Innenfläche
Abb. 5.11	Zeitliche Entwicklung der Kontaktflächen117
Abb. 5.12	Zeitliche Einwicklung des Geometriefaktors $f_{geom}(t)$
Abb. 5.13	Zeitabhängige Einwicklung der 2D-Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial (für $f_{geom} = 1$ )
Abb. 5.14	Oxidationsgrad in Abhängigkeit des gewählten Geometriefaktors $f_{\mbox{\scriptsize geom}}$ 120
Abb. 5.15	Leistungsbilanz für $f_{geom} = 1$
Abb. 5.16	Berechnete Temperatur des vermischten Schmelzepools mit Variation von $f_{\text{geom}} \dots $
Abb. 5.17	Berechnete Temperatur des stratifizierten Schmelzepools im Unterschied zum vermischten Fall (beide für $f_{geom} = 1$ )
Abb. 5.18	Mit dem vereinfachten Immobilisierungs-Kriterium prognostizierte Schmelzeausbreitungen (blaue Kurven) für ECOKATS-1 in Abhängigkeit des Parameters f <sub>crit</sub> im Vergleich zum Experiment (orange)
Abb. 5.19	Einfluss der Krusten-Wärmeleitfähigkeit auf die berechnete Ausbreitungsfläche bei festem Referenzwert des Immobilisierungskriteriums $f_{crit} = 0,3$
Abb. 5.20	Beispielhafte 3D-Darstellung der berechneten Schmelzeausbreitung in einer WWER-1000-Anlage

# Tabellenverzeichnis

Tab. 5.1	Einflussparameter für die Simulation der Schüttbettkonfiguration mit COCOMO	104
Tab. 5.2	Dryout-Wärmestromdichte q <sup>"2D</sup> in Abhängigkeit aufgeführter Einflussparameter für 20 aus 100 Variationsrechnungen mit COCOMO-3D	105
Tab. 5.3	Selbstähnliche Näherungslösungen für den Radius einer schwerkraftgetriebenen Ausbreitung auf einer Fläche /SPE 10/	124
Tab. 5.4	Vorfaktoren für die theoretischen Näherungslösungen	124
Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

Schwertnergasse 1 50667 Köln Telefon +49 221 2068-0 Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum Boltzmannstraße 14 **85748 Garching b. München** Telefon +49 89 32004-0 Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200 **10719 Berlin** Telefon +49 30 88589-0 Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4 **38122 Braunschweig** Telefon +49 531 8012-0 Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de