

**Weiterentwicklung des
AC² Thermohydraulik-
Moduls ATHLET zur
Simulation komplexer,
zweiphasiger
Strömungsphänomene**

Weiterentwicklung des AC² Thermohydraulik- Moduls ATHLET zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene

Abschlussbericht

Philipp Schöffel
Sebastian Buchholz
Norman Dünne
Liancheng Guo
Volker Jacht
Carsten Köllein
Anne Krüssenberg
Jaejin Lee
Georg Lerchl
Tomasz Skorek
Daniel von der Cron
Fabian Weyermann
Andreas Wielenberg
Kin Wing Wong

März 2021

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen RS1565 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

3-Felder-Modell, AC², ATHLET, Entrainment, Kopplung, Kritische Heizflächenbelastung, Softwareentwicklung, Strömungsinstabilität, Strömungskarte, Systemcode, Thermohydraulik, Unsicherheitsanalysen, Wärmetauscher, Wärmeübergangskorrelation

Kurzfassung

Das vom BMWi geförderte Projekt RS1565 zur *Weiterentwicklung des AC² Thermohydraulik-Moduls ATHLET zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene* hatte die Entwicklung und Ertüchtigung von Modellen und Methoden zum Ziel, um den zahlreichen nationalen und internationalen Nutzern von ATHLET ein leistungsstarkes und zuverlässiges Werkzeug für die Durchführung von Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik für bestehende und zukünftige Reaktoren und kerntechnische Einrichtungen zur Verfügung zu stellen.

Im Zentrum des Vorhabens stand die Weiterentwicklung von ATHLET zur Analyse von Leichtwasserreaktoren. Für die detaillierte und realistische Simulation komplexer Strömungsvorgänge im Reaktorkern unter Störfallbedingungen wurde ein 3-Felder-Modell entwickelt und implementiert. Außerdem wurden zahlreiche Teile der bestehenden 2-Fluid-Modellierung erweitert. Neben verbesserten Modellen zur Entrainmentberechnung wurde als zusätzliches Strömungsbild die Ringströmung aufgenommen und durch entsprechende Schließungsgleichungen ergänzt. Zur Sicherheitsbewertung von Forschungsreaktoren wurden die beiden Aspekte der Strömungsinstabilität und des DNB in engen Kühlkanälen näher betrachtet und neue Modelle zur Verdampfung wie auch zur Bestimmung der kritischen Heizflächenbelastung bereitgestellt.

Darüber hinaus wurden zahlreiche neue Modelle implementiert, die den Einsatzbereich von ATHLET erheblich erweitern. So werden zukünftige Programmversionen ein genaueres Wasser-Dampf-Stoffwertpaket enthalten und durch neue Schnittstellen zu externen Stoffwertbibliotheken dem Anwender weitere Arbeitsmedien bieten. Darüber hinaus wurden mit CO und CO₂ zwei neue Gaskomponenten in ATHLET implementiert. Mit Blick auf die Kopplung mit COCOSYS wurde die Schnittstelle an Strukturoberflächen mit Wärmeübergang erweitert. Auch andere externe Programme für neue Einsatzbereiche von ATHLET können hier gekoppelt werden. Für die Anwendung von ATHLET für flüssigmetallgekühlte Reaktoren wurden weitere inhärente Rückwirkungen auf die Neutronenkinetik, die für diese Reaktordesigns charakteristisch sind, implementiert. Zur Simulation passiver Sicherheitssysteme stehen neue Wärmeübergangskorrelationen für die Kondensation in vertikalen Wärmetauscherrohren zur Verfügung. Auch wurde das Programm dahingehend erweitert, von der Reynoldszahl abhängige, nicht konstante Formverlustbeiwerte abzubilden, was u. a. für die genauere Simulation von passiven Systemen von Bedeutung ist, da diese von nur geringen Kräften angetrieben werden.

Im Rahmen des Projekts wurde auch die Zusammenarbeit in internationalen Arbeitsgruppen weiter intensiviert. Neben der Mitarbeit bei FONESYS hat sich die GRS innerhalb verschiedener Arbeitsgruppen der OECD/NEA beteiligt. Hierzu zählten SAPIUM, 3DSYSTH sowie der RBHT-Benchmark. Ein weiterer wichtiger Aspekt des abgelaufenen Projekts betraf die enge Kooperation mit den Programmanwendern und den GRS-externen Programmentwicklern, um deren Erfahrungen in die laufende und zukünftige Programmentwicklung einfließen zu lassen und allen Nutzern zugänglich zu machen. Unter Nutzung aktueller Erkenntnisse aus der Programmvalidierung und -anwendung erfolgte eine kontinuierliche Pflege sämtlicher Programmkomponenten, um ATHLET für neue, sicherheitstechnische Fragestellungen zu ertüchtigen. Dies umfasste bspw. die Simulation der kritischen Ausströmung, die Berechnung der Wärmeströme und ihre Verteilung auf die beiden Phasen bei Filmsieden und gleichzeitiger starker Dampfüberhitzung, die Modellierung der Wiederbenetzung und die Abbildung des Bortransports.

Ein weiteres Projektziel bestand in der ständigen Erhöhung der Anwenderfreundlichkeit des ATHLET-Programms mit besonderem Blick auf komplexe und detaillierte Anlagensimulationen. Um den Benutzer bei der Erstellung der umfangreichen Eingabedaten besser zu unterstützen, wurden neue Methoden zur einfacheren Spezifikation des Reaktorregelsystems, einer asymmetrischen Leistungsverteilung im Reaktorkern sowie von Randbedingungen implementiert. Zur Anwenderunterstützung wurden der ATHLET-Distribution neue Beispieldatensätze und Tutorials hinzugefügt sowie neue Werkzeuge für das Pre- und Postprocessing entwickelt. Darüber hinaus wurde eine neue, für alle Komponenten von AC² einheitliche und plattformunabhängige grafische Benutzeroberfläche erstellt.

Die bestehenden Methoden zur Qualitätssicherung in der Programmentwicklung wurden durch neue Werkzeuge und angepasste Entwicklungsprozesse ausgebaut und weiter an aktuelle, internationale Standards angeglichen. Die Continuous Integration Umgebung für automatisierte Programmtests konnte durch zusätzliche Testdatensätze beständig ergänzt und enger mit der Programmentwicklung verzahnt werden. Erweiterte und qualitätsgesicherte ATHLET-Programmversionen wurden als Bestandteil des AC²-Programmpakets im Rahmen des vorliegenden Projekts freigegeben und zahlreichen Anwendern zur Verfügung gestellt.

Abstract

The project RS1565, funded by the BMWi, on the “*further development of the AC² thermo-hydraulic module ATHLET for simulating complex, two-phase flow phenomena*” aimed to develop and upgrade models and methods to support the numerous national and international users of ATHLET with a powerful and accessible tool for carrying out safety analyses according to the current state of science and technology for existing and future reactors and nuclear facilities.

The focus of the project was put on the further development of ATHLET for the analysis of light water reactors. A 3-field model was developed and implemented for the detailed and realistic simulation of complex flow processes in the reactor core under accidental conditions. In addition, numerous parts of the existing 2-fluid modeling have been extended. In addition to improved models for calculating entrainment, the annular flow was implemented as an additional flow pattern and supplemented by the corresponding closure equations. For the safety assessment of research reactors, the two aspects of flow instability and DNB in narrow cooling channels were examined more closely and new models for evaporation and for determining the critical heat flux were provided.

In addition, numerous new physical models have been implemented, which significantly expand the scope of application of ATHLET. Future program versions will contain a more precise water-steam property package and offer additional working media through new interfaces to external property libraries. In addition, two new gas components, CO and CO₂, have been implemented in ATHLET. With a view to the coupling with COCOSYS, the interface for structural surfaces with heat transfer has been expanded. Other external programs, which could open up new areas of application for ATHLET, can also be linked here. Regarding the simulation of liquid-metal-cooled reactors, further inherent thermal-hydraulic feedbacks on the neutron kinetics were implemented, which are characteristic for these reactor designs. New heat transfer correlations for condensation in vertical heat exchanger tubes are available for the simulation passive safety systems. The program was also expanded to capture non-constant, dependent on the Reynolds number form loss coefficients, which e.g. is important for the more precise simulation of passive systems, since these are driven by only small forces.

Within the project, the cooperation in international working groups was further intensified. In addition to the work within the FONESYS network, GRS has participated in various working groups of the OECD/NEA. These included SAPIUM, 3DSYSTH and the RBHT

benchmark. Another important aspect of the completed project concerned the close cooperation with the program users and the GRS external program developers. This ensures that their experiences are incorporated into the ongoing and future program development and made accessible to all users. Using the latest findings from program validation and application, all program components were continuously maintained to prepare ATHLET for new, nuclear safety-related issues. This included, for example, the simulation of the critical discharge through leaks, the calculation of the heat flows and their distribution to the two phases in film boiling flow regime with simultaneous strong steam overheating, the modeling of the rewetting process and the simulation of the boron transport.

Another aspect of the project aimed at constantly increasing the user-friendliness of the ATHLET program with a special focus on complex and detailed system simulations. In order to better support the user in creating the comprehensive input data, new methods for simpler specification of the reactor control system, of an asymmetric power distribution in the reactor core and of boundary conditions were implemented. New sample data sets and tutorials were added to the ATHLET distribution for user support, and new tools for pre- and post-processing were developed. In addition, a new, platform-independent graphical user interface was created that is uniform for all AC² components.

The existing methods for quality assurance in program development were expanded by new tools and development processes were adapted in alignment with current international standards. The continuous integration environment for automated, regular program testing could be constantly supplemented with additional test data sets as well as more closely linked to the program development. Extended and quality assured ATHLET program versions were released as part of the AC² program package and made available to numerous users via the continuously maintained AC² user area.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	III
1	Einleitung	1
1.1	Das Systemrechenprogramm ATHLET	1
1.2	Wissenschaftliche und Technische Arbeitsziele	3
1.2.1	Ertüchtigung der ATHLET-Modelle zur detaillierten Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene im Kühlsystem nukleartechnischer Anlagen.....	3
1.2.2	Unterstützung der Programmanwender und Verbesserung der Programmhandhabung	4
1.2.3	Qualitätssicherung, Releasemanagement und internationale Zusammenarbeit.....	5
2	Entwicklung eines 3-Felder-Modells	7
2.1	Bilanzgleichungen.....	8
2.1.1	Gleichung für den Massenanteil einer Phase.....	12
2.1.2	Gleichung für die Temperatur einer Phase.....	12
2.1.3	Gleichung für den Druck	18
2.1.4	Gleichung für die Geschwindigkeit einer Phase	21
2.2	Schließungsgleichungen.....	27
2.2.1	Wassermitttriss und Tropfendeposition	27
2.2.2	Verdampfung	29
2.2.3	Kondensation.....	29
2.2.4	Zwischenphasenreibung	30
2.2.5	Wandreibung	31
2.3	Integration in ATHLET	32
2.3.1	Modellaktivierung durch den Benutzer	32
2.3.2	Das Dreifeldermodell in der Startrechnung	32

2.3.3	Tropfenfeld und Zeitintegration (FEBE).....	33
2.3.4	Nicht vorhandene Tropfenphase in der transienten Rechnung.....	33
2.3.5	Kopplung von Zwei- und Dreifelderrechengebieten.....	33
2.4	Verifikation und Validierung	35
2.4.1	Testrechnungen mit Kohärenztest zur Berechnung der Jacobimatrix.....	35
2.4.2	Nachrechnungen von Entrainment-Experimenten an der Harwell- LOTUS-Versuchsanlage	35
2.4.3	Nachrechnungen eines Reflooding-Experiments an der FEBA- Versuchsanlage	44
2.5	Zusammenfassung	45
3	Modellierung von Forschungsreaktoren.....	47
3.1	Simulation von Strömungsinstabilitäten	49
3.2	Kritische Heizflächenbelastung	60
3.2.1	Implementierung der Sudo-Kaminaga-Korrelation	62
3.2.2	Testanwendung auf COSMOS-L Anlage	63
4	Erweiterte Strömungsbildkarten und Schließungs- gleichungen	67
4.1	Ringströmung in vertikaler Geometrie.....	67
4.2	Strömung in horizontalen Rohren	70
4.2.1	Entrainmentmodellierung.....	70
4.2.2	Modifizierte Druckverlustmodellierung	72
4.2.3	Mantilla-Benchmark	75
4.2.4	Laufende Validierung.....	84
4.2.5	Aktuelle Weiterentwicklungen	88
4.3	Zentrale Strömungsbildkarte.....	89
4.3.1	Strömungsbildkarten in ATHLET.....	90
4.3.2	RELAP5/MOD 3.3 Modell	91
4.3.3	Vergleich der Strömungsbildkarten	92
5	Weitere thermohydraulische Modellentwicklungen	97
5.1	Zweiphasenmodellierung.....	97
5.1.1	Wasserspiegelkraft	97

5.1.2	Modellierung bei erscheinender/verschwindender Phase	98
5.1.3	Verbesserte Modellierung der kritischen Ausströmung	99
5.1.4	Strömungssimulation in Verzweigungen	103
5.1.5	3D-Modell	104
5.2	Berücksichtigung Reynoldszahl-abhängiger Formverluste.....	104
5.3	Neue nicht-kondensierende Gase.....	107
5.4	Wärmeübergang.....	109
5.4.1	Vertikale Wärmetauscherrohrbündel.....	109
5.4.2	Weitere Korrelationen für Wärmeübergang und Bündelfaktor	111
5.4.3	Fluid-Referenztemperatur für den zweiphasigen Wärmeübergang	115
5.4.4	Rückkehr vom Übergangssieden zum Blasensieden	115
5.5	Weitere Etablierung von AC ²	116
5.5.1	Kopplung mit COCOSYS	116
5.5.2	Neues Wasser-Dampf-Stoffwertpaket.....	117
5.5.3	Kopplung alternativer Stoffwertbibliotheken	119
6	Modellertüchtigungen und Anwenderfreundlichkeit.....	121
6.1	GCSM – Signalreihenfolge	121
6.1.1	Modell zur optimierten Anordnung der GCSM-Signalreihenfolge im ATHLET-Datensatz.....	121
6.1.2	Vorliegende Struktur des GCSM-Eingabeblocks in ATHLET	121
6.1.3	Modellentwurf	122
6.1.4	Prinzipielle Netzwerkstruktur und Sortiermechanismus.....	124
6.1.5	Anwendung des GCSM-Optimierungsalgorithmus auf realen Datensatz	126
6.2	Neutronenkinetische Rückwirkungen für flüssigmetallgekühlte Reaktoren.....	128
6.3	Modellertüchtigungen und -korrekturen.....	134
6.3.1	Strömungsdruckverluste im Kondensationsmodell.....	134
6.3.2	ECCMIX Modell	135
6.3.3	Bortransportmodell	135
6.3.4	Simulation bei überkritischem Druck.....	136
6.3.5	Separator mit nicht-kondensierbaren Gasen.....	137

6.4	Weitere Programmverbesserungen	137
6.4.1	Asymmetrische Leistungsverteilung im Reaktorkern.....	137
6.4.2	Vorgabe von Randbedingungen mittels TDV	138
6.4.3	Vermeidung von Programmabbrüchen nach Rundungsfehlern bei der Bestimmung der FEBE-Zeitschrittweite.....	139
6.4.4	HTML-Ausgabedaten.....	139
6.5	ATHLET Utilities	140
6.5.1	AIG-2.....	140
6.5.2	Plotting	140
6.5.3	Ausgabedatenformat HDF5	141
6.5.4	AIE	142
6.6	AC ² -Starter-Benutzeroberfläche.....	144
6.7	AC ² Installationspaket.....	145
6.8	Tutorials.....	150
6.9	Zusätzliche Samples.....	150
6.9.1	Generisches WWER-Sample.....	150
6.9.2	Einstiegsdatensätze.....	151
7	Anwenderunterstützung, nationale und internationale Zusammenarbeit.....	153
7.1	Anwenderunterstützung und Erfahrungsrückfluss	153
7.2	Unterstützung der externen Programmentwicklung.....	154
7.3	SAPIUM.....	155
7.3.1	Ausgangssituation	155
7.3.2	„Good practice guide“ für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten	156
7.4	OECD/NEA-RBHT-Benchmark	159
7.5	SOAR zu 3D TH-Systemcodes	169
7.6	FONESYS-Aktivitäten.....	170
8	Qualitätssicherung der Programmentwicklung.....	171
8.1	Etablierung von Softwarestandards	171
8.2	Continuous Integration.....	174

8.3	Refactoring	177
8.4	Programmdokumentation.....	179
8.5	Releasemanagement.....	180
8.6	User Area und Codetransfer	182
9	Zusammenfassung und Ausblick.....	183
9.1	Modellierung komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene im Kühlsystem nukleartechnischer Anlagen	183
9.2	Unterstützung der Programmanwender und Verbesserung der Programmhandhabung	186
9.3	Qualitätssicherung, Releasemanagement und internationale Zusammenarbeit.....	189
9.4	Fazit und Ausblick.....	190
	Literaturverzeichnis.....	193
	Abbildungsverzeichnis.....	209
	Tabellenverzeichnis.....	215

1 Einleitung

Für den Nachweis der Beherrschbarkeit von Transienten, Stör- und Unfällen in Kernkraftwerken dienen insbesondere Rechenprogramme, die nach Stand von Wissenschaft und Technik möglichst realistische, sog. *Best-Estimate* Ergebnisse liefern. Das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) fördert die Entwicklung und Validierung derartiger Programme im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung. Auf dieser Basis entwickelt die GRS das Programmpaket AC², das die drei Simulationsprogramme ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS sowie den interaktiven Analysesimulator ATLAS beinhaltet /WIE 19/.

Das Systemrechenprogramm ATHLET (**A**nalyse der **T**hermohydraulik von **L**ecks und **T**ransienten) erlaubt hierbei die thermohydraulische Simulation der Kühlsysteme. Das Modul ATHLET-CD (**C**ore **D**egradation) stellt Modelle zur Spaltproduktfreisetzung sowie zur Schädigung und Verlagerung des Reaktorkerns bereit. COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem) dient der Untersuchung der Thermohydraulik und des Spaltproduktverhaltens im Reaktorsicherheitsbehälter. Die Programme ATHLET und COCOSYS erlauben die Simulation von betrieblichen Zuständen und Störfällen in nukleartechnischen Anlagen. Mittels ATHLET-CD erweitert sich das Anwendungsspektrum von AC² auf Unfälle.

AC² bzw. einzelne Module von AC² werden als deterministisches Analysewerkzeug sowohl im Inland als auch im Ausland von etwa 60 Organisationen für Forschungsaktivitäten sowie gutachterliche Tätigkeiten zur Behördenunterstützung in kerntechnischen Genehmigungs- und Aufsichtsverfahren eingesetzt. Wesentliche Zielsetzung des vorliegenden Projekts war die Weiterentwicklung des thermohydraulischen Systemrechenprogramms ATHLET entsprechend dem Fortschritt von Wissenschaft und Technik. Hiermit wird sowohl der GRS wie auch allen anderen nationalen und internationalen Programmanwendern die Möglichkeit gegeben, Sicherheitsanalysen für ein breites Spektrum nukleartechnischer Anlagen und postulierter Stör- und Unfälle durchzuführen, um auf dieser Basis Sicherheitsaussagen zuverlässig treffen und internationale Sicherheitsstandards weiterentwickeln zu können.

1.1 Das Systemrechenprogramm ATHLET

Das thermohydraulische Systemrechenprogramm ATHLET /AUS 19/ besteht aus mehreren grundlegenden Modulen, die der Simulation aller beim Betrieb von Reaktoren

wichtigen Komponenten und auftretenden Phänomenen und Prozessen dienen (Abb. 1.1). Hierzu zählen

- das **Thermofluidodynamikmodul** (TFD) zur Simulation der ein- und zweiphasigen Strömungsvorgänge,
- das **Wärmeleit- und Wärmeübertragungsmodul** (HECU) zur Beschreibung der Wärmeleitung in Strukturen sowie des Wärmeübergangs an das Fluid,
- das **GCSM-Modul** zur Abbildung des Regelsystems und
- das **Neutronenkinetikmodul** zur Berechnung der nuklearen Leistungserzeugung.

Über die Kopplungen zu den verschiedenen Komponenten von AC² hinaus ist ATHLET für umfassende Multiphysik- und detaillierte Multiskalenanalysen mit unterschiedlichen, sowohl von der GRS entwickelten als auch externen Rechenprogrammen gekoppelt. Zur detaillierten Simulation fluiddynamischer Vorgänge existieren Kopplungen zwischen ATHLET und den CFD-Programmen ANSYS-CFD und OpenFOAM sowie dem Unterkanalprogramm COBRA-TF. Es existieren außerdem Schnittstellen zu den GRS 3D-Neutronenkinetik-Codes QUABOX/CUBBOX und TORT-TD. Zusätzlich sind Kopplungen zu BIPR, DYN3D, KIKO3D und PARCS realisiert. Des Weiteren sind strukturmechanische Programme wie TESP-ROD mit ATHLET gekoppelt.

Ein weiterer, integraler Bestandteil des ATHLET-Programmpakets sind verschiedene Softwarewerkzeuge des Pre- und Postprocessings, die den Anwender bei der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung eigener Analysen unterstützen.

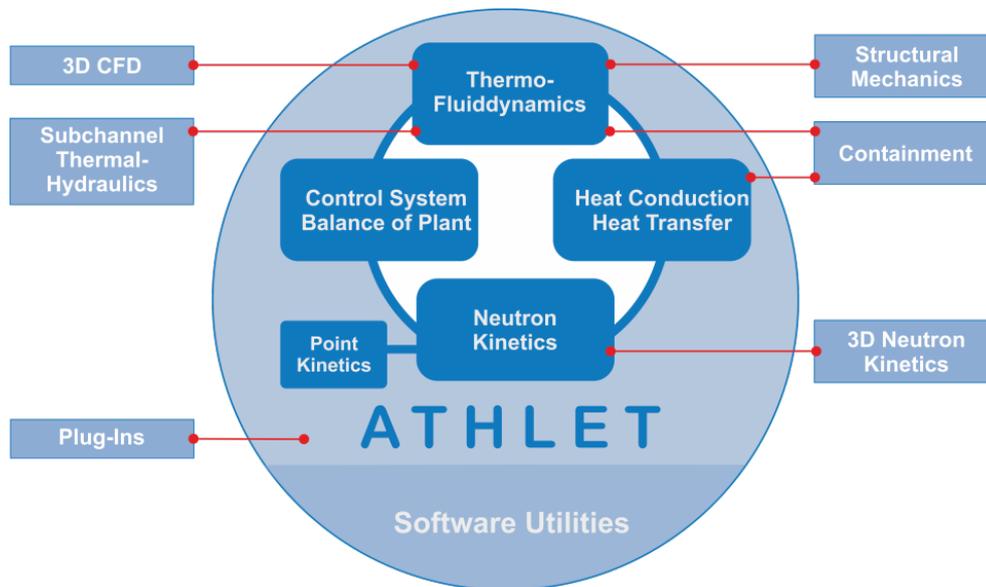


Abb. 1.1 Module des Programms ATHLET und wichtige Kopplungsschnittstellen

1.2 Wissenschaftliche und Technische Arbeitsziele

Übergeordnetes Ziel des vorliegenden Vorhabens ist es, den zahlreichen, im Umgang mit ATHLET geschulten, Anwendern ein **leistungsstarkes, zuverlässiges und anwenderfreundliches Werkzeug** zur Verfügung zu stellen, das die Durchführung von **Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik** für bestehende Reaktoren und kerntechnische Einrichtungen, für zukünftige, fortschrittliche Reaktoren der Generationen III und III+, für innovative Reaktorkonzepte der Generation IV sowie für SMR (Small Modular Reactors) erlaubt. Dieses übergeordnete Ziel gliedert sich in die nachfolgend beschriebenen drei Teilziele (entsprechend den drei wissenschaftlich-technischen Arbeitspaketen des Projekts), die jeweils mit mehreren Einzelzielen unterlegt sind.

1.2.1 Ertüchtigung der ATHLET-Modelle zur detaillierten Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene im Kühlsystem nuklear-technischer Anlagen

Unter dem Teilziel *Ertüchtigung der ATHLET-Modelle zur detaillierten Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene* sind folgende Einzelziele zusammengefasst:

- **Entwicklung eines Mehrfeldermodells:** Die Entwicklungsarbeiten zielen insbesondere auf die realistische Simulation komplexer Strömungsvorgänge im Reaktorkern unter Störfallbedingungen.
- **Verbesserte Modelle zur Simulation von Forschungsreaktoren:** Die durchgeführten Arbeiten hatten vor allem die verbesserte Simulation der thermohydraulischen Instabilität und der kritischen Heizflächenbelastung für Forschungsreaktoren zum Inhalt.
- **Etablierung des 2-Fluid-Modells als Standardmodell der Thermohydraulik:** Für eine genauere Beschreibung der thermohydraulischen Phänomene im Reaktorkühlkreislauf wird die Modellierung insb. des 2-Fluid-Modells kontinuierlich verbessert. Darüber hinaus stellt die sicherheitstechnische Bewertung fortschrittlicher und innovativer Reaktorkonzepte mit passiven Sicherheitssystemen erhöhte Anforderungen an den Detaillierungsgrad der thermohydraulischen Modellierung.
- **Ertüchtigung der bestehenden thermohydraulischen Implementierung,** speziell der Modelle für Zweiphasenströmungen, der Reynoldszahlabhängigkeit von Formverlusten sowie des Wärmeübergangs.
- **Etablierung von AC² zur Simulation des Gesamtsystems:** Die Arbeiten umfassen eine erweiterte, anwenderfreundlichere Kopplung der AC²-Programme ATHLET und COCOSYS sowie die Bereitstellung neuer Stoffwertpakete, die perspektivisch von allen AC²-Programmen genutzt werden sollen.

Die zu dem Teilziel *Ertüchtigung der ATHLET-Modelle zur detaillierten Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene* durchgeführten Arbeiten sind in Arbeitspaket 2 von RS1565 zusammengefasst. Ergebnisse sind in den Kapiteln 2, 3, 1 und 5 dokumentiert.

1.2.2 Unterstützung der Programmanwender und Verbesserung der Programmhandhabung

Unter diesem Teilziel sind folgende Einzelziele zusammengefasst:

- **Modellertüchtigung nach Anwenderrückmeldungen:** Hier standen insbesondere Verbesserungen der Punktkinetik für flüssigmetallgekühlte Reaktoren sowie die Modernisierung des GCSM-Moduls im Vordergrund.

- **Verbesserung der Programmhandhabung und Ausbau der Überwachung des Programmablaufs**
- **Unterstützung der Programmanwendung und externen Programmentwicklung**, z. B. durch Ad-hoc-Entwicklungen, neue Samples und Tutorials
- **Pflege bestehender Softwarewerkzeuge und Entwicklung neuer Tools für AC²**, hier insbesondere Werkzeuge zum Pre- und Postprocessing (AIG, Batchplot, AIED) sowie eine neue Grafische Benutzeroberfläche

Die zu dem Teilziel *Unterstützung der Programmanwender und Verbesserung der Programmhandhabung* durchgeführten Arbeiten sind in Arbeitspaket 1 von RS1565 zusammengefasst. Ergebnisse sind in Kapitel 6 sowie in 7.1 und 7.2 dokumentiert.

1.2.3 Qualitätssicherung, Releasemanagement und internationale Zusammenarbeit

Unter diesem Teilziel sind folgende Einzelziele zusammengefasst:

- **Qualitätssicherung der Programmentwicklung** durch neue Standards und Entwicklungsumgebungen, Releasemanagement sowie kontinuierliches Refactoring
- **Dokumentation der Programmentwicklung**
- **Continuous Integration** mit regelmäßiger Prüfung der Implementierung mittels automatisierter Testrechnungen
- **Mitarbeit in internationalen Gremien und Arbeitsgruppen**, hier der OECD sowie FONESYS
- **Pflege der AC² User Area und Codetransfer**

Die zu den Themen *Qualitätssicherung, Releasemanagement und internationale Zusammenarbeit* durchgeführten Arbeiten sind in Arbeitspaket 3 von RS1565 zusammengefasst. Ergebnisse sind in den Kapiteln 7 und 8 dokumentiert.

2 Entwicklung eines 3-Felder-Modells

Gegenwärtig werden Zweiphasenströmungen in Systemcodes üblicherweise mit einem 2-Fluid-Modell mit phasenseparierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie simuliert /BES 17/. Das bedeutet, dass sechs Erhaltungsgleichungen zu lösen sind: Massen-, Impuls- und Energiebilanz für die flüssige Wasserphase sowie Massen-, Impuls- und Energiebilanz für die Dampfphase. Soweit der Zustand jeder der beiden Phasen durch einen einzigen Satz an Lösungsvariablen hinreichend genau beschrieben werden kann, ist dieser Ansatz zielführend. Es gibt jedoch Strömungssituationen, in denen eine oder auch beide Phasen in verschiedene Anteile separieren, die sich thermohydraulisch unterschiedlich verhalten. In einer Blasenströmung können beispielsweise verschiedene Größenklassen von Dampfblasen vorliegen, die unterschiedliche Kräfte erfahren und sich daher unterschiedlich verhalten. Für den Fall einer Ring-Tropfenströmung besteht die flüssige Phase aus einem kontinuierlichen Anteil an der Wand und einem dispersen Anteil im Strömungsinnen. Es ist anschaulich verständlich, dass sich beide Anteile üblicherweise im mechanischen Ungleichgewicht befinden, im Fall einer stark beheizten (oder gekühlten) Wand liegt auch ein thermisches Ungleichgewicht vor. Sollen derartige Strömungssituationen detailliert berechnet werden, ist ein Mehrfeldermodell erforderlich, bei dem die verschiedenen Anteile einer Phase als unterschiedliche Felder mittels separierter Erhaltungsgleichungen beschrieben werden /BES 17/, /VAL 11/.

Insbesondere mit Blick auf Fragestellungen der Reaktorsicherheit ist das komplexe Strömungsbild der Ring-Tropfenströmung von besonderem Interesse. Dieses tritt bspw. in folgenden Anwendungssituationen auf:

- **Dryout:** Beim Dryout kommt es zum Austrocknen des Flüssigkeitsfilms entlang der Brennstabhüllrohre. Dieser Vorgang wird begleitet von Entrainment und Wiederanlagern von Flüssigkeitstropfen am Hüllrohr.
- **Fluten des Reaktorkerns und Wiederbenetzung der Brennstäbe:** In dieser Situation liegt die flüssige Phase im Kern sowohl kontinuierlich als auch dispers vor. Bei einer Quenchfrontbewegung von oben nach unten entsteht eine entgegengesetzte Strömung von Flüssigkeitsfilm und im Dampf mitgerissenen Tropfen.
- **Normalbetrieb:** Beim Normalbetrieb von Siedewasserreaktoren liegt im Reaktorkern die Flüssigkeitsphase einerseits kontinuierlich und andererseits dispers als Tropfen verschiedener Durchmesser vor.

- **Passive Systeme:** Die Strömung in Heatpipes/Thermosiphons, welche zur Brennelementlagerbeckenkühlung eingesetzt werden sollen, kann die Form einer Ring-Nebel-Strömung mit Gegenströmung der kontinuierlichen Wasserphase an der Rohrwand und der mitgerissenen Wassertropfen im Rohrzentrum aufweisen.

Vor dem Hintergrund der genannten Anwendungssituationen war daher das Ziel dieses Arbeitspunktes, ein Modell in ATHLET zu entwickeln, das eine realistische Simulation dieser Strömungssituationen erlaubt. Ermöglicht wird dies durch ein 3-Felder-Modell, das die kontinuierliche und die disperse Flüssigkeitsphase durch separate Bilanzgleichungen beschreibt. Auf Basis der im Rahmen des Projekts RS1538 durchgeführten Machbarkeitsstudie zur Implementierung eines 3-Felder-Modells in ATHLET /CRO 17/ wurden hierzu die im Folgenden beschriebenen Arbeiten durchgeführt. Wichtig zu erwähnen ist, dass die neu implementierten Schließungsgleichungen für die vollständig disperse Flüssigkeitsphase auch unabhängig vom Vorhandensein eines Wasserfilms genutzt werden können, um eine Tropfenströmung detailliert und genauer als mit einem 2-Fluid-Modell möglich zu simulieren.

2.1 Bilanzgleichungen

Der vorliegende Abschnitt 2.1 enthält mehrere Gleichungen. Prinzipiell sind alle wichtigen Formelzeichen im Text beschrieben oder aus dem Kontext heraus verständlich. Um Missverständnissen vorzubeugen, ist in Tab. 2.1 und Tab. 2.2 eine Nomenklatur (deren Gültigkeitsbereich sich auf Abschnitt 2.1 begrenzt) abgedruckt.

Tab. 2.1 Formelzeichen in Abschnitt 2.1

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
A	Querschnittsfläche	m ²
c	Wärmekapazität	J/(kg*K)
E	Zusammenfassung mehrerer Energie-Terme, vgl. Gl. (2.12)	W
f, \vec{f}	Kraft pro Volumeneinheit	N/m ³
g	Erdbeschleunigung	m/s ²
h	spezifische Enthalpie	J/kg
\bar{I}	Einheitsmatrix	-
m	Masse	kg
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
p	Druck	Pa
\dot{q}	Wärmestrom pro Volumeneinheit	W/m ³
\mathbb{R}	Zusammenfassung mehrerer Energie-Terme, vgl. Gl. (2.13)	W
s	Ortskoordinate in Richtung des Stromfadens	m
S, \vec{S}	externe Quelle	Energiequelle: W/m ³ Impulsquelle: kg/(s ² *m ²)
t	Zeit	s
T	Temperatur	K
u, v, w	kartesische Geschwindigkeitskomponenten	m/s
v	spezifisches Volumen	m ³ /kg
v, \vec{v}	Geschwindigkeit	m/s
V	Volumen	m ³
x	Massenanteil	-
x, y, z	kartesische Ortskoordinaten	m
$\mathbb{Z}_1, \mathbb{Z}_2$	Zusammenfassung mehrerer Terme in der Druckgleichung, vgl. Gln. (2.29) und (2.30)	
α	Volumenanteil	-
γ	Inklinationswinkel	rad
ρ	Dichte	kg/m ³
ψ	Phasenwechsellmassenstrom pro Volumeneinheit	kg/s/m ³
Ψ	Phasenwechsellmassenstrom	kg/s

Tab. 2.2 Subskripte in Abschnitt 2.1

Subskript	Bedeutung
CV	in einem Kontrollvolumen
E	Energie
$fric$	Reibung
i	Phase (Laufvariable)
$i \rightarrow k$	von Phase i nach Phase k gerichtet (beschreibt Phasenwechselvorgänge)
in	einströmende Junction
$intf$	Zwischenphasenfläche
I	Impuls
k	Phase
ki	Phase k in der Nähe der Zwischenphasenfläche
l	Flüssigkeitsphase (liquid)
m	Mischungs-
n	Anzahl aller simulierten Phasen
out	ausströmende Junction
p	bei konstantem Druck
s	Komponente in Richtung des Stromfadens
$total$	total, Gemisch-
T	bei konstanter Temperatur
v	Dampfphase (vapor)
$w \rightarrow k$	von der Wand nach Phase k gerichtet
x	Komponente in x -Richtung

Ausgehend von den phasenseparierten Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls für die drei Phasen gasförmig, flüssig-kontinuierlich und flüssig-dispers (das Tropfenfeld) wurden Bilanzgleichungen für neun ATHLET-Lösungsvariablen hergeleitet /CRO 20a/. Die Herleitungen sind analog zu denjenigen für das 6-Gleichungs-Modell, vgl. /LOY 90/ und /LER 98/. Die neun Lösungsvariablen sind in Tab. 2.3 in ATHLET-Notation eingetragen.

Tab. 2.3 Die neun Lösungsvariablen für das Dreifeldermodell in ATHLET-Notation

Phase \ Lösungsvariable	Massenanteil	Temperatur	Geschwindigkeit * Querschnittsfläche	Druck
gasförmig	XQM	TV	WVAJ	–
flüssig-dispers	XD	TD	WDAJ	–
flüssig-kontinuierlich	–	TL	WLAJ	–
alle	–	–	–	PRESS

Wie man sieht, ist der Massenanteil X_L der flüssig-kontinuierlichen Phase keine Lösungsvariable, da er sich aus der algebraischen Beziehung

$$X_{QM} + X_D + X_L = 1.0 \quad (2.1)$$

ergibt. Der Druck P_{PRESS} wird für alle drei Felder als gleich angenommen. Dies ist eine in Systemcodes übliche Vereinfachung, gleichwohl insbesondere aufgrund der Oberflächenspannung in stabilen Tropfen ein leicht erhöhter Druck gegenüber dem umgebenden Dampf vorliegt /AVD 16/.

Die ursprünglichen Erhaltungsgleichungen sind partielle Differentialgleichungen, welche durch eine Ortsdiskretisierung mittels Finite-Volume-Verfahren auf versetztem Gitter zu gewöhnlichen Differentialgleichungen vereinfacht werden. Die Lösungsvariablen (= Bilanzgrößen) für die Kontrollvolumen (Control Volumes = CVs) sind Massenanteile, Temperaturen und der Druck. Die Lösungsvariablen auf den zu den CVs versetzt angeordneten Leitungen (Junctions) sind die Bewegungsterme Geschwindigkeit * Querschnittsfläche.

In den folgenden Unterkapiteln sind die Herleitungen der Differentialgleichungen der CV-Bilanzgrößen wie in /CRO 20a/ beschrieben. Das verwendete Subskript k bezeichnet dabei eine der drei o. g. Phasen, während n für die Anzahl aller Phasen steht – beim Dreifeldermodell ist also $n = 3$.

2.1.1 Gleichung für den Massenanteil einer Phase

Ausgehend von der Massenbilanz mit der Überlegung, dass die lokale zeitliche Änderung der Masse in einem Bilanzvolumen den Flüssen über die Oberfläche desselben zuzüglich/abzüglich der „produzierten“/„verlorenen“ Masse aufgrund von Phasenwechselfvorgängen entspricht:

$$\frac{\partial m_k}{\partial t} = \dot{m}_{k,in} - \dot{m}_{k,out} + \sum_{i=1}^n (\Psi_{i \rightarrow k} - \Psi_{k \rightarrow i}) \quad (2.2)$$

folgt mit

$$x_k = \frac{m_k}{\sum_{i=1}^n m_i} \quad (2.3)$$

unter Berücksichtigung der Quotientenregel für das Differenzieren:

$$\frac{\partial x_k}{\partial t} = \frac{\frac{\partial m_k}{\partial t} \cdot \sum_{i=1}^n (m_i) - m_k \cdot \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial m_i}{\partial t} \right)}{\left(\sum_{i=1}^n m_i \right)^2} \quad (2.4)$$

Wie weiter oben bereits bemerkt wurde, wird diese Differentialgleichung nur für die Dampf- und die Tropfenphase gelöst.

2.1.2 Gleichung für die Temperatur einer Phase

Die Differentialgleichung der Temperatur wird aus der Energiegleichung hergeleitet.

Ausgehend von der in /AUS 19/ gewählten Formulierung der Energieerhaltung kann nach Addition beider Seiten der Gleichung mit $p \cdot \partial \alpha_k / \partial t$ in integraler Schreibweise notiert werden

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[m_k \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) \right] - \frac{m_k}{\rho_k} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} + \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{out} \\ - \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{in} = \mathbb{R}_{Ek} \end{aligned} \quad (2.5)$$

wobei \mathbb{R}_{Ek} die Terme auf der rechten Seite der Energiebilanz für Phase k zusammenfasst (Hubarbeit, Wärmeströme, etc.).

Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass die gewählte Form der Energiegleichung, also der Ausgangspunkt der folgenden Diskussion, auf der Annahme $p_k = p_{intf} = p$ beruht. Tatsächlich ist die Annahme nicht korrekt – aufgrund der Ungleichheit der verschiedenen Druckterme ergibt sich eine „Wasserspiegelkraft“ in der Impulsgleichung, vgl. /CRO 20b/; auch in der Energiegleichung würden bei deren Berücksichtigung hydrostatische Druckterme auftreten. Der Einfluss dieser Terme auf die Temperaturen der Phasen wird aufgrund der genannten Annahme vernachlässigt.

Für die Geschwindigkeiten v_k ist zu beachten, dass es sich um die Geschwindigkeiten auf den jeweiligen Junctions $v_k|_{in}$ und $v_k|_{out}$ bzw. um die Geschwindigkeit im Kontrollvolumen ($v_{k,CV}$ in der lokalen Zeitableitung) handelt. $v_{k,CV}$ muss approximiert werden; die verwendete Vorschrift hierzu wird weiter unten beschrieben. Analog hierzu (nur umgekehrt) verhält es sich bei den Enthalpien: Zur Bestimmung der Enthalpien auf den Junctions, $h_k|_{in}$ und $h_k|_{out}$, wird eine Upwind-Interpolation verwendet (in ATHLET „Donor-Cell-Verfahren“ genannt).

Mit

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left[m_k \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) \right] \\
 &= \frac{\partial m_k}{\partial t} \cdot \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) + m_k \frac{\partial h_k}{\partial t} + m_k \frac{\partial \left(\frac{v_{k,CV}^2}{2} \right)}{\partial t} \\
 &= \frac{\partial m_k}{\partial t} \cdot \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) + m_k \frac{\partial h_k}{\partial t} \\
 &+ m_k v_{k,CV} \frac{\partial (v_{k,CV})}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

folgt aus Gl. (2.5):

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial m_k}{\partial t} \cdot \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) + m_k \frac{\partial h_k}{\partial t} + m_k v_{k,CV} \frac{\partial (v_{k,CV})}{\partial t} - \frac{m_k}{\rho_k} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\
 &+ \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{out} - \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{in} = \mathbb{R}_{Ek}
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Mit der totalen Ableitung der Enthalpie als Funktion der Zustandsgrößen und Lösungsvariablen T_k und p folgt für die lokale Zeitableitung $\partial h_k / \partial t$ ¹:

$$\frac{\partial h_k}{\partial t} = \frac{\partial h_k}{\partial T_k} \Big|_p \cdot \frac{\partial T_k}{\partial t} + \frac{\partial h_k}{\partial p} \Big|_{T_k} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.8}$$

Mit der Definition der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck:

$$c_{p,k} := \frac{\partial h_k}{\partial T_k} \Big|_p \tag{2.9}$$

¹ Die Bezeichnung der totalen Ableitung der Enthalpie mit ∂h statt dh ist hier etwas unglücklich und dem Umstand geschuldet, dass es um die *lokale* (nicht substantielle) Zeitableitung $\partial h / \partial t$ geht.

folgt aus Gl. (2.7) nach Einsetzen von Gln. (2.8) und (2.9):

$$\begin{aligned}
m_k c_{p,k} \frac{\partial T_k}{\partial t} &= \mathbb{R}_{Ek} - \frac{\partial m_k}{\partial t} \cdot \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) - m_k \cdot \frac{\partial h_k}{\partial p} \Big|_{T_k} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\
&\quad - m_k v_{k,CV} \frac{\partial(v_{k,CV})}{\partial t} + \frac{m_k}{\rho_k} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \\
&\quad + \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{in} - \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{out}
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Und nach Division durch $m_k c_{p,k}$:

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} = \frac{1}{c_{p,k}} \cdot \frac{E_k}{m_k} + \frac{1}{c_{p,k}} \cdot \left(\frac{1}{\rho_k} - \frac{\partial h_k}{\partial p} \Big|_{T_k} \right) \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.11}$$

Gl. (2.11) ist die Differentialgleichung für die Temperatur einer Phase k . Der Ausdruck E_k bedeutet

$$\begin{aligned}
E_k &= \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{in} - \dot{m}_k \left(h_k + \frac{v_k^2}{2} \right) \Big|_{out} - \frac{\partial m_k}{\partial t} \\
&\quad \cdot \left(h_k + \frac{v_{k,CV}^2}{2} \right) - m_k v_{k,CV} \frac{\partial(v_{k,CV})}{\partial t} + \mathbb{R}_{Ek}
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Und der Ausdruck \mathbb{R}_{Ek} bezeichnet die rechte Seite der ursprünglichen Energieerhaltungsgleichung:

$$\begin{aligned}
\mathbb{R}_{Ek} &= \int \dot{q}_{w \rightarrow k} dV + \sum_{i=1}^n \left(\int \dot{q}_{i \rightarrow k} dV - \int \dot{q}_{k \rightarrow i} dV \right) \\
&\quad + \sum_{i=1}^n \left[\int \psi_{i \rightarrow k} \left(h_i + \frac{1}{2} \vec{v}_i \cdot \vec{v}_i \right) dV \right. \\
&\quad \left. - \int \psi_{k \rightarrow i} \left(h_k + \frac{1}{2} \vec{v}_k \cdot \vec{v}_k \right) dV \right] + \int S_{E,k} dV
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Wie man sieht, sind im obigen Ausdruck für \mathbb{R}_{Ek} verschiedene Terme nicht berücksichtigt: Hubarbeit, Schlepparbeit, Dissipation, Beschleunigungsarbeit des virtuellen Massenterms. Die Terme, welche in Gl. (2.13) berücksichtigt werden, sind:

- Wandwärmestrom
- Wärmeströme durch die Phasengrenzflächen
- Ströme von Enthalpie und kinetischer Energie aufgrund von Phasenwechsel
- Externe Energiequellen (z. B. Pumpen)

Arbeiten aufgrund von Druckkräften, welche sowohl auf die CV-Oberfläche als auch an den Phasengrenzen wirken, sind über den Term $\partial p/\partial t$ in Gl. (2.11) berücksichtigt.

Wie weiter oben vermerkt, muss die Geschwindigkeit im Kontrollvolumen, $v_{k,CV}$ in Gl. (2.12), interpoliert werden. In ATHLET wird hierzu der gesamte Massenstrom (= Gemischmassenstrom) in einer Zone mit dem arithmetischen Mittel der ein- und ausströmenden Massen gleichgesetzt:

$$\dot{m}_{total,CV} = \rho_{total,CV} \cdot v_{total,CV} \cdot A_{CV} = \frac{\dot{m}_{total,in} + \dot{m}_{total,out}}{2} \quad (2.14)$$

Aufgelöst nach der Geschwindigkeit ergibt sich:

$$v_{total,CV} = \frac{1}{2 \cdot \rho_{total,CV} \cdot A_{CV}} (\dot{m}_{total,in} + \dot{m}_{total,out}) \quad (2.15)$$

Unter der (meist vereinfachenden) Annahme, dass die Strömung in einem CV homogen ist (d. h. es existiert kein Phasenschlupf, somit ist $v_{k,CV} = v_{total,CV}$), lässt sich die Mischungsdichte schreiben als:

$$\rho_{total,CV} = \rho_m = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \quad (2.16)$$

Somit lautet der Ausdruck für $v_{k,CV}$:

$$v_{k,CV} = \frac{1}{2 \cdot A_{CV}} \left(\frac{\dot{m}_{total,in}}{\rho_m} + \frac{\dot{m}_{total,out}}{\rho_m} \right) \quad (2.17)$$

In Gl. (2.12) wird auch die Zeitableitung von $v_{k,CV}$ benötigt. Da A_{CV} zeitlich konstant ist, müssen nur die Ausdrücke in den Klammern abgeleitet werden. Für $\dot{m}_{total,in}$ gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\dot{m}_{total,in}}{\rho_m} \right) &= \frac{\frac{\partial \dot{m}_{total,in}}{\partial t} \rho_m - \dot{m}_{total,in} \frac{\partial \rho_m}{\partial t}}{\rho_m^2} \\ &= \frac{1}{\rho_m} \left(\frac{\partial \dot{m}_{total,in}}{\partial t} - \frac{\dot{m}_{total,in}}{\rho_m} \frac{\partial \rho_m}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Wobei man den Subtrahenden in Gl. (2.18) (ohne $\dot{m}_{total,in}$) mit der o.g. Definition der Mischungsdichte schreiben kann als:

$$\frac{1}{\rho_m} \frac{\partial \rho_m}{\partial t} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i \right) \quad (2.19)$$

und nach Erweitern mit dem zeitlich konstanten Volumen V/V , $V(t) = const.:$

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^n V \alpha_i \rho_i} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n V \alpha_i \rho_i \right) = \frac{1}{\sum_{i=1}^n m_i} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n m_i \right) \quad (2.20)$$

Mit $i = 1 \dots n$ sind wie bisher die verschiedenen Phasen bezeichnet. m_i ist also die Masse der Phase i im Kontrollvolumen.

Einsetzen der rechten Seite von Gl. (2.20) in Gl. (2.18) und analoges Vorgehen für $\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\dot{m}_{total,out}}{\rho_m} \right)$ führt zu (vgl. Gl. (2.17)):

$$\frac{\partial v_{k,CV}}{\partial t} = \frac{1}{2 \cdot A_{CV} \cdot \rho_m} \left(\frac{\partial \dot{m}_{total,in}}{\partial t} + \frac{\partial \dot{m}_{total,out}}{\partial t} - \frac{\dot{m}_{total,in} + \dot{m}_{total,out}}{\sum_{i=1}^n m_i} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{\partial m_i}{\partial t} \right) \quad (2.21)$$

Anmerkung: Die Gleichungen (2.17) und (2.21) werden zur Approximation von $v_{k,CV}$ und dessen Ableitung in Gl. (2.12) benutzt. Gemäß der obigen Herleitung muss die – wie bereits gesagt, meist vereinfachende – Annahme einer homogenen Strömung getroffen werden. Evtl. böte sich für zukünftige ATHLET-Versionen eine Approximation von $v_{k,CV}$ an, welche direkt die unterschiedlichen Phasengeschwindigkeiten berücksichtigt, z. B.

$$v_{k,CV} = \frac{v_{k,in} + v_{k,out}}{2} \quad (2.22)$$

Eine Vermutung darüber, aus welchem Grund die Gemischmassenströme in die Approximation von $v_{k,CV}$ einfließen, ist, dass es zu der Zeit, als die ATHLET-Version mit zwei Energiegleichungen abgeleitet und implementiert wurde, nur einen Mischungsimpuls und damit keine separat berechneten Phasengeschwindigkeiten gab. Der Beitrag der kinetischen Energie zur Gesamtenergie ist bei üblichen ATHLET-Anwendungen jedoch vernachlässigbar, so dass die konkrete Wahl einer Interpolation der Phasengeschwindigkeiten voraussichtlich keinen nennenswerten Einfluss auf das Simulationsergebnis haben wird. Dieser Aspekt wurde daher im Rahmen der Implementierung des 3-Felder-Modells bisher nicht weiter untersucht.

2.1.3 Gleichung für den Druck

Die Gleichung für den Druck leitet sich von der Forderung ab, dass ein Bilanzvolumen zeitlich konstant bleibt:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial V_i}{\partial t} = 0 \quad (2.23)$$

Mit

$$\frac{\partial V_k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k V) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{V_k}{V} V \right) = \frac{\partial}{\partial t} (m_k v_k) \quad (2.24)$$

– v_k ist hier das spezifische Volumen der Phase k – folgt:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial t} (m_i v_i) = 0 \quad (2.25)$$

Mit Anwendung der Kettenregel und Ausdrücken des totalen Differentials des spezifischen Volumens als Funktion der Zustandsgrößen und Lösungsvariablen T_k und p folgt:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \left(v_i \frac{\partial m_i}{\partial t} + m_i \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \\ = \sum_{i=1}^n \left[v_i \frac{\partial m_i}{\partial t} + m_i \left(\left. \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right|_p \cdot \frac{\partial T_i}{\partial t} + \left. \frac{\partial v_i}{\partial p} \right|_{T_i} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \right) \right] \\ = 0 \end{aligned} \quad (2.26)$$

Einsetzen der Differentialgleichung für die Phasentemperaturen T_i , Gl. (2.11), führt zu:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^n \left(v_i \frac{\partial m_i}{\partial t} \right) + \sum_{i=1}^n m_i \\
& \quad \cdot \left\{ \left. \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right|_p \cdot \left[\frac{1}{c_{p,i}} \cdot \frac{E_i}{m_i} + \frac{1}{c_{p,i}} \cdot \left(v_i - \left. \frac{\partial h_i}{\partial p} \right|_{T_i} \right) \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \right] \right. \\
& \quad \left. + \left. \frac{\partial v_i}{\partial p} \right|_{T_i} \cdot \frac{\partial p}{\partial t} \right\} \\
& = \sum_{i=1}^n \left(v_i \frac{\partial m_i}{\partial t} + \left. \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right|_p \cdot \frac{E_i}{c_{p,i}} \right) \\
& \quad + \left\{ \sum_{i=1}^n m_i \cdot \left[\left. \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right|_p \cdot \frac{1}{c_{p,i}} \cdot \left(v_i - \left. \frac{\partial h_i}{\partial p} \right|_{T_i} \right) + \left. \frac{\partial v_i}{\partial p} \right|_{T_i} \right] \right\} \\
& \quad \cdot \frac{\partial p}{\partial t} = 0
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Mit dem Einsetzen der Differentialgleichung für die Phasentemperaturen wird auch die Vereinfachung gleicher Phasendrucke (auch an der Zwischenphasenfläche) $p_k = p_{intf} = p$ in die Druckgleichung übernommen und somit der Einfluss der „Wasserspiegelkraft“ vernachlässigt.

Gleichung (2.27) aufgelöst nach $\partial p / \partial t$ ergibt die DGL für den Druck:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\mathbb{Z}_1}{\mathbb{Z}_2} \tag{2.28}$$

mit

$$\mathbb{Z}_1 = \sum_{i=1}^n \left(v_i \frac{\partial m_i}{\partial t} + \left. \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \right|_p \cdot \frac{E_i}{c_{p,i}} \right) \tag{2.29}$$

und

$$\mathbb{Z}_2 = \sum_{i=1}^n m_i \cdot \left[\frac{\partial v_i}{\partial p} \Big|_{T_i} + \frac{1}{c_{p,i}} \cdot \frac{\partial v_i}{\partial T_i} \Big|_p \cdot \left(v_i - \frac{\partial h_i}{\partial p} \Big|_{T_i} \right) \right] \quad (2.30)$$

2.1.4 Gleichung für die Geschwindigkeit einer Phase

Die Gleichung für die Geschwindigkeit einer Phase k (multipliziert mit der Querschnittsfläche) ergibt sich aus der Impulsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k \otimes \vec{v}_k) \\ = p_{intf} \nabla \alpha_k + \vec{f}_{fric,intf} + \alpha_k \rho_k \vec{g} - \nabla \cdot (\alpha_k p \vec{I}) \\ + \vec{f}_{fric,k} + \sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} \vec{v}_i - \psi_{k \rightarrow i} \vec{v}_k) + \vec{S}_{I,k} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Der Operator „ \otimes “ bezeichnet das dyadische Produkt; \vec{I} ist die Einheitsmatrix. Die Terme auf der rechten Seite bedeuten:

- $p_{intf} \nabla \alpha_k \rightarrow$ Druckkräfte an den Zwischenphasenflächen. Bei mehr als zwei Phasen existieren mehrere Zwischenphasenflächen, so dass der Ausdruck fragwürdig erscheint. Es wird jedoch vereinfacht angenommen, dass p_{intf} innerhalb eines Bilanzvolumens für alle Zwischenphasenflächen gleich groß ist, wodurch der gewählte Ausdruck gültig ist.
- $\vec{f}_{fric,intf} \rightarrow$ volumetrische Scherkräfte an den Zwischenphasenflächen in N/m^3
- $\alpha_k \rho_k \vec{g} \rightarrow$ Gravitationskraft
- $\nabla \cdot (\alpha_k p \vec{I}) \rightarrow$ Druckkraft auf die Phase k an der Oberfläche des Bilanzvolumens
- $\vec{f}_{fric,k} \rightarrow$ volumetrische Reibungskräfte innerhalb der Phase k in N/m^3 (enthält sowohl molekulare als auch turbulente Viskositätseffekte). Dieser Term wird später zerlegt in:
 - Scherkräfte aufgrund unterschiedlicher Geschwindigkeiten der Phase k in benachbarten Junctions (ähnlich dem 2D/3D-Modell)

- Wandreibungseffekte (wird im 2D/3D-Modell sowie im „normalen“ 1D-ATHLET verwendet). Die makroskopische „Wandreibung“ lässt sich unter Verwendung der No-Slip-Bedingung an der Wand auf Viskositätseffekte im Fluid zurückführen.
- $\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} \vec{v}_i - \psi_{k \rightarrow i} \vec{v}_k) \rightarrow$ Impulsänderung aufgrund von Phasenwechsellvorgängen
- $\vec{S}_{I,k} \rightarrow$ äußere Kräfte

Weitere Kräfte (wie z. B. die virtuelle Massenkraft) werden in ATHLET vernachlässigt und sind auch in Gl. (2.31) nicht enthalten. Die Water-Level-Force ist der Einfachheit halber in der obigen Formulierung ebenfalls vernachlässigt worden. Sie ist jedoch in der ATHLET-Implementierung enthalten, vgl. Abschnitt 5.

Unter der Annahme $p_{intf} = p$ lautet die eindimensionale Formulierung von Gl. (2.31):

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k \vec{v}_k) \\
& = -\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} + f_{fric,intf,x} - \alpha_k \rho_k g \cdot \sin(\gamma) + f_{fric,k,x} \\
& \quad + \sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} u_i - \psi_{k \rightarrow i} u_k) + S_{I,k,x}
\end{aligned} \tag{2.32}$$

Die linke Seite der Gleichung kann umgeschrieben werden zu:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(\alpha_k \rho_k u_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k u_k \vec{v}_k) \\
& = u_k \frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \frac{\partial u_k}{\partial t} + u_k \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) \\
& \quad + \alpha_k \rho_k \vec{v}_k \cdot \nabla u_k
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Subtrahieren des Produkts aus der eindimensionalen Kontinuitätsgleichung für Phase k (vgl. Gleichung (2.2)) und der Geschwindigkeitskomponente u_k liefert:

$$\begin{aligned}
& u_k \frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \frac{\partial u_k}{\partial t} + u_k \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) + \alpha_k \rho_k \vec{v}_k \cdot \nabla u_k \\
& - u_k \left[\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) \right. \\
& \left. - \sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} - \psi_{k \rightarrow i}) \right] \\
& = \alpha_k \rho_k \frac{\partial u_k}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \vec{v}_k \cdot \nabla u_k \\
& + u_k \left[\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} - \psi_{k \rightarrow i}) \right]
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Erweitern des Terms mit der Zeitableitung in Gl. (2.34) mit der Querschnittsfläche der Junction, A , wobei diese zeitlich konstant ist ($\partial A / \partial t = 0$), liefert:

$$\begin{aligned}
& \frac{\alpha_k \rho_k}{A} \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} + \alpha_k \rho_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \\ w_k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial u_k}{\partial x} \\ \frac{\partial u_k}{\partial y} \\ \frac{\partial u_k}{\partial z} \end{pmatrix} + u_k \left[\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} - \psi_{k \rightarrow i}) \right] \\
& = \frac{\alpha_k \rho_k}{A} \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} \\
& + \alpha_k \rho_k \left(u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} + v_k \frac{\partial u_k}{\partial y} + w_k \frac{\partial u_k}{\partial z} \right) \\
& + u_k \left[\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} - \psi_{k \rightarrow i}) \right]
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Die Terme $v_k \cdot \partial u_k / \partial y$ und $w_k \cdot \partial u_k / \partial z$ sind genau die in /SCH 11/ beschriebenen „gemischten Momentum-Flux-Beiträge“; sie sind im Folgenden der Einfachheit halber vernachlässigt. Ersetzt man die linke Seite von Gl. (2.32) mit der so vereinfachten rechten Seite von Gl. (2.35) und dividiert durch α_k , so erhält man:

$$\begin{aligned}
& \frac{\rho_k}{A} \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} + \rho_k u_k \frac{\partial u_k}{\partial x} \\
& = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{f_{fric,intf,x}}{\alpha_k} - \rho_k g \cdot \sin(\gamma) + \frac{f_{fric,k,x}}{\alpha_k} \\
& + \frac{1}{\alpha_k} \left[\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} u_i - \psi_{k \rightarrow i} u_k) \right] \\
& - \frac{u_k}{\alpha_k} \left[\sum_{i=1}^n (\psi_{i \rightarrow k} - \psi_{k \rightarrow i}) \right] + \frac{S_{I,k,x}}{\alpha_k}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Diese Gleichung entspricht den in /AUS 19/, Kapitel 2.3.2 – „Momentum Balances“, beschriebenen Gleichungen für vapor und liquid. Unter der Annahme, dass sich der Volumenstrom einer Phase k entlang einer Junction nicht ändert

$$\int_{(s)} \frac{\rho_k}{A} \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} ds = \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} \int_{(s)} \frac{\rho_k}{A} ds \tag{2.37}$$

kann man Gl. (2.36) über die Länge einer Junction integrieren, so dass aus der partiellen DGL eine gewöhnliche wird. Auflösen nach $\partial(u_k A)/\partial t$ liefert schließlich die Lösungsgleichungen für WLAJ, WVAJ und WDAJ:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(u_k A)}{\partial t} = & \frac{1}{\int_{(s)} \frac{\rho_k}{A} ds} \left[- \int_{(s)} \rho_k u_k \frac{\partial u_k}{\partial s} ds - \int_{(s)} \frac{\partial p}{\partial s} ds \right. \\
& + \int_{(s)} \frac{f_{fric,intf,s}}{\alpha_k} ds - g \int_{(s)} \rho_k \cdot \sin(\gamma) ds \\
& + \int_{(s)} \frac{f_{fric,k,s}}{\alpha_k} ds \\
& + \sum_{i=1}^n \left(\int_{(s)} \frac{\psi_{i \rightarrow k} u_i}{\alpha_k} ds - \int_{(s)} \frac{\psi_{k \rightarrow i} u_k}{\alpha_k} ds \right) \\
& - \sum_{i=1}^n \left(\int_{(s)} \frac{\psi_{i \rightarrow k} u_k}{\alpha_k} ds - \int_{(s)} \frac{\psi_{k \rightarrow i} u_k}{\alpha_k} ds \right) \\
& \left. + \int_{(s)} \frac{S_{I,k,s}}{\alpha_k} ds \right] \tag{2.38}
\end{aligned}$$

Bemerkung: Hierbei wird das eindimensionale Integral von kartesischen Koordinaten (x) in ein Wegintegral entlang der Strecke s umformuliert. s entspricht in dem 1D-Rechenprogramm ATHLET bspw. einem Stück einer Rohrleitung. Sollte s nicht geradlinig sein (z. B. ein Krümmer), treten zusätzliche Beschleunigungsbeiträge auf, die für eine Umlenkung der Strömung sorgen. Die hierbei entstehenden Strömungsverluste werden in ATHLET durch Formverluste (Quellterm auf der rechten Seite von (2.38)) mittels Anwendereingaben im Eingabedatensatz modelliert.

Nach kleineren Umformungen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(u_k A)}{\partial t} = & \frac{1}{\int_{(s)} \frac{\rho_k}{A} ds} \left[-\frac{1}{2} \int_{(s)} \rho_k \frac{\partial u_k^2}{\partial s} ds - \int_{(s)} \frac{\partial p}{\partial s} ds \right. \\
 & + \int_{(s)} \frac{f_{fric,intf,s}}{\alpha_k} ds - g \int_{(s)} \rho_k \cdot \sin(\gamma) ds \\
 & + \int_{(s)} \frac{f_{fric,k,s}}{\alpha_k} ds \\
 & + \sum_{i=1}^n \left(\int_{(s)} \frac{\psi_{i \rightarrow k} u_i}{\alpha_k} ds - \int_{(s)} \frac{\psi_{i \rightarrow k} u_k}{\alpha_k} ds \right) \\
 & \left. + \int_{(s)} \frac{S_{I,k,s}}{\alpha_k} ds \right] \tag{2.39}
 \end{aligned}$$

Gl. (2.39) in Pseudo-ATHLET-Variablen für die Phase k geschrieben:

$$\begin{aligned}
 DWKAJ = & \frac{1}{A1HROK} (DPMFKJ + DPZON + DPIFKJ + DPDZJ \\
 & + DPF RKJ + DPEVKJ + DPPUK) \tag{2.40}
 \end{aligned}$$

Die einzelnen Terme in Gl. (2.40) bedeuten:

- DWKAJ: Zeitableitung von Geschwindigkeit * Querschnittsfläche
- A1HROK: Trägheitsterm
- DPMFKJ: Momentum-Flux-Term
- DPZON: Integrierter Druckgradient über die Junction
- DPIFKJ: Zwischenphasenreibung
- DPDZJ: Hydrostatischer Druckterm
- DPF RKJ: Wandreibung

- $DPEVKJ$: Impulsänderung aufgrund von Phasenwechselfvorgängen (Verdampfung, Kondensation, Tropfenmitriss, Tropfenablagerung)
- $DPPUK$: Druckerhöhung durch Pumpe

Während die meisten der o.g. Terme für ein Mehrfeldermodell analog zu denjenigen des 2-Felder-Modells (= 6-Gleichungs-Modells) gebildet werden können, müssen die Formulierungen für die Wandreibung und die Zwischenphasenreibung sowie die Terme, welche den Einfluss von Phasenwechselfvorgängen beschreiben, für das Dreifeldermodell erweitert werden. Die im Rahmen des Vorhabens hierfür neu implementierten Schließungsgleichungen sind im folgenden Abschnitt beschrieben.

2.2 Schließungsgleichungen

In Rahmen der Entwicklung des 3-Felder-Modells wurde das physikalische Modell in ATHLET um Schließungsgleichungen für das Tropfenfeld und ein gleichzeitig vorliegendes kontinuierliches Flüssigkeitsfeld erweitert. Die Schließungsgleichungen basieren soweit möglich auf den Schließungsgleichungen des 2-Fluid-Modells, um einerseits die für das 2-Fluid-Modell bereits vorhandene Validierung zu nutzen und andererseits einen stetigen Übergang bei Entstehen bzw. Verschwinden der Tropfenphase sicherzustellen. Die Schließungsgleichungen für die Massenbilanz wurden der Literatur entnommen. Die Schließungsgleichungen für die Energie- und Impulsbilanzen wurden überwiegend auf der Basis von bestehenden ATHLET-Modellen der 2-Fluid-Version entwickelt.

2.2.1 Wassermitttriss und Tropfendeposition

Auf der Basis der durchgeführten Literaturrecherche wurden Schließungsgleichungen für die Massenbilanzen der beiden flüssigen Felder ausgewählt. Die implementierten Korrelationen für Wassermitttriss und Tropfendeposition wurden in Harwell in Rahmen der Erstellung eines Programms für die Simulation von Ring-Tropfen-Strömung entwickelt /HEW 90/.

Die Tropfendeposition S_d wird dargestellt als

$$S_d = k_d \cdot C \quad (2.41)$$

mit k_d dem Depositionsmassentransfer-Koeffizienten (m/s) und C der mittleren Tropfenkonzentration in der Gasphase (kg/m^3)

$$C = (\alpha_d \cdot \rho_l) / (\alpha_d + \alpha_g) = (\alpha_d \cdot \rho_l) / (1 - \alpha_l) \quad (2.42)$$

Der Depositionsmassentransfer-Koeffizient ist definiert als

$$k_d = \left(\frac{\rho_v \cdot D_h}{\sigma} \right)^{0,5} = \begin{cases} 0,18 & \text{für } \frac{C}{\rho_v} \leq 0,3 \\ 0,083 \cdot \left(\frac{C}{\rho_v} \right)^{0,65} & \text{für } \frac{C}{\rho_v} > 0,3 \end{cases} \quad (2.43)$$

mit σ als der Oberflächenspannung. Die Korrelation für die Wassermittsrissrate ist eine Funktion der kritischen Reynolds-Zahl für den Beginn des Wassermittsrisses (Onset of Entrainment):

$$S_e = 5,75 \cdot 10^{-5} \cdot \alpha_v \cdot \rho_v \cdot w_v \cdot (Re_l - Re_{OE})^2 \cdot (\eta^2_l / D_h) \cdot \sigma \cdot (\rho_l / \rho_v^2)^{0,316} \quad (2.44)$$

$$\text{mit } Re_{OE} = \exp \left(5,8504 + 0,4249 \left(\frac{\eta_v}{\eta_l} \right) \left(\frac{\rho_l}{\rho_v} \right)^{0,5} \right),$$

wobei η die dynamische Viskosität (kg/m/s) und Re_l die Reynolds-Zahl für den Wasserfilm ist.

Die Korrelationen für Deposition und Entrainment sind für Wasser-Dampf und Wasser-Luft-Strömungen bei verschiedenen Drücken und Geschwindigkeiten validiert worden. Die Korrelation für Deposition wurde in einem weiten Druckbereich zwischen 1,4 bar und 179 bar geprüft /HEW 90/, /LAN 10/. Beide Korrelationen wurden nach Angaben der Entwickler für Rohrgeometrie entwickelt, sind aber auch für Bündel- und Annulus-Geometrie gültig, vorausgesetzt der hydraulische Durchmesser ist korrekt definiert.

2.2.2 Verdampfung

Zur Simulation der Verdampfung wird die aus dem 2-Fluid-Modell stammende Verdampfungsrate als Basis genommen und im Bereich der Ring-Tropfen-Strömung auf die disperse und die kontinuierliche Phase (Liquid-Film) verteilt. In dem Verdampfungsmodell der 2-Fluid-Version wird die Verdampfungsrate als Summe der Verdampfung von Blasen und Tropfen berechnet. Die Verdampfungsrate aus Tropfen bildet hierbei die gesamte Verdampfung bei hohen Dampfvolumengehalten. In dem Verdampfungsmodell für die 3-Felder-Version wird nun die Verdampfungsrate der Tropfen zwischen Wasserfilm und Tropfenfeld aufgeteilt, als Funktion des Tropfenanteils $E_d = \frac{m_d}{m_d+m_f}$:

Gemäß /AUS 19/ ist somit die Verdampfungsrate für die Tropfen

$$\Gamma_{eva,d} = \frac{2}{h_{lv}} \cdot \Delta T_d \cdot (6 \cdot \rho_v \cdot c_{p,v} \cdot k_v \cdot U_d \cdot n_d \cdot \alpha \cdot E_d)^{0,5}$$

und für den Film

$$\Gamma_{eva,f} = \frac{2}{h_{lv}} \cdot \Delta T_f \cdot (6 \cdot \rho_v \cdot c_{p,v} \cdot k_v \cdot U_d \cdot n_d \cdot \alpha \cdot (1 - E_d))^{0,5}$$

wobei U_d die Tropfenrelativgeschwindigkeit, n_d die Tropfendichte ($1/m^3$), $\Delta T_d = T_d - T_{sat}$ und $\Delta T_f = T_f - T_{sat}$ ist.

2.2.3 Kondensation

Aus dem Kondensationsmodells des 2-Fluid-Modells /AUS 19/, das strömungsformbasiert ist, konnte die Kondensationsrate für die disperse Strömung (Tropfen) separiert und als Kondensationsrate für das Tropfenfeld des 3-Felder-Modells genutzt werden:

$$\Gamma_{con} = \Gamma_{con,d} + \Gamma_{con,f}$$

mit

$$\Gamma_{con,d} = (htc_d \cdot A_{i,d} \cdot \Delta T_d) / h_{lv}$$

$$\Gamma_{con,f} = (htc_f \cdot A_{i,f} \cdot \Delta T_f) / h_{lv}$$

für die Kondensation an den Wassertropfen bzw. an der kontinuierlichen Wasserphase (Film). A_i bezeichnet die Zwischenphasenfläche. Die Wärmeübergangskoeffizienten für Direktkondensation an Tropfen und Dampf berechnen sich zu:

$$htc_d = const \cdot (\lambda_l \cdot \rho_l \cdot c_{p,l})^{0,5} \cdot \left(\frac{\varepsilon_d}{\nu_l}\right)^{0,25}$$

$$htc_f = const \cdot (\lambda_l \cdot \rho_l \cdot c_{p,l})^{0,5} \cdot \left(\frac{\varepsilon_f}{\nu_l}\right)^{0,25}$$

mit λ_l dem Wärmeleitkoeffizient von Wasser, ν_l der Wasserviskosität und ε der Dissipationsrate der kinetischen Energie (m^2/s^2) für die Tropfen bzw. den Film. Die Dissipationsraten und die Zwischenphasenflächen werden unter Berücksichtigung der Charakteristik der vorliegenden Strömungsform berechnet /SKO 20a/.

2.2.4 Zwischenphasenreibung

Die Zwischenphasenreibung zwischen den Feldern des 3-Felder-Modells wurde aus den Korrelationen für das 2-Fluid-Modell abgeleitet. Da in dem 2-Fluid-Modell die Zwischenphasenreibung für die Liquidphase in Form von Tropfen bereits separat berücksichtigt wird /AUS 19/, wurde diese Korrelation für den Zwischenphasenreibungskoeffizienten $C_{i,disp}$ des dispers vorliegenden Tropfenfeldes übernommen. Für hohe Dampfvolumentgehalte wird angenommen, dass die neben der Tropfenphase vorhandene kontinuierliche Flüssigkeitsphase als Film vorliegt. Für die Zwischenphasenreibung bei Filmströmung wurde hierfür eine Korrelation nach /LIL 88/ implementiert, die, wie zahlreiche andere Korrelationen aus der Literatur, auf der Korrelation nach Wallis /WAL 69/ basiert:

$$C_{i,ann} = 0,01(1 + 0,75(1 - \alpha)) \frac{\rho_v}{D_h}$$

Mit dem Verteilungsparameter E_{an} wird für die Wasserphase ein Übergang vom Zwischenphasenreibungskoeffizienten des 2-Fluid-Modells $C_{i,flood}$ hin zum Zwischenphasenreibungskoeffizienten der Ringströmung $C_{i,ann}$ vorgenommen:

$$C_{i,non-disp} = C_{i,flood}(1 - E_{an}) + C_{i,ann}E_{an}$$

Der Verteilungsparameter für den Ringströmungsbereich E_{an} ist hierbei wie folgt definiert:

- $E_{an} = 0,0$ für $\alpha < 0,8$
- $E_{an} = (0,85 - \alpha) \cdot 20$ für $0,8 < \alpha < 0,85$
- $E_{an} = 1,0$ für $0,85 < \alpha < 1,0$

2.2.5 Wandreibung

Im ATHLET wird die gesamte Wandreibung für ein zweiphasiges Gemisch mittels eines Zweiphasenmultiplikators berechnet /AUS 19/. Die für das 2-Fluid-Modell notwendige Verteilung der Wandreibung auf die beiden Phasen Wasser ($\Delta p_{F,L}$) und Dampf ($\Delta p_{F,V}$) erfolgt entsprechend den volumetrischen Phasengehalten. Dies ist für die meisten Strömungsbilder eine gute Näherung (siehe auch Kapitel 4.1). Für das 3-Felder-Modell muss die gesamte Wandreibung nun auf drei Felder verteilt werden. Für den Bereich der Ringströmung, die für höhere Dampfvolumentehalte $\alpha > 0,75$ auftritt, wird die Wandreibung dem kontinuierlichen Wasseranteil (Film) zugeordnet. Für die Aufteilung der Wandreibung zwischen den Phasen wird ein Verteilungsparameter E_{na} (*non-annular*) verwendet. Der Verteilungsparameter ist wie folgt definiert:

- $E_{na} = 1,0$ für $\alpha < 0,75$
- $E_{na} = (0,85 - \alpha) \cdot 10$ für $0,75 < \alpha < 0,85$
- $E_{na} = 0,0$ für $0,85 < \alpha < 0,95$
- $E_{na} = (\alpha - 0,95) \cdot 20$ für $0,95 < \alpha$

Die Wandreibung wird den verschiedenen Feldern folgendermaßen zugeordnet. Für die Dampfphase ist

$$\Delta p'_{F,V} = \Delta p_{F,V} \cdot E_{na}$$

und für die kontinuierliche Wasserphase

$$\Delta p'_{F,L} = \Delta p_{F,L}(1 - E_{na} \cdot E_d) + \Delta p_{F,V} \cdot (1 - E_{na})$$

und für das Tropfenfeld

$$\Delta p'_{F,d} = \Delta p_{F,L} \cdot E_{na} \cdot E_d$$

Damit wirkt für den Bereich der Ringströmung die gesamte Wandreibung auf das kontinuierliche Flüssigkeitsfeld (Film).

2.3 Integration in ATHLET

2.3.1 Modellaktivierung durch den Benutzer

Die Entwicklungsarbeiten zum Dreifeldermodell fanden bisher in einem eigenen Entwicklungszweig unter Git – d. h. nicht in der Hauptentwicklungslinie – statt. Bei Verwendung des entsprechenden Executables kann der Benutzer das Modell über den Eingabeparameter `IARTO = 3` für ausgewählte thermofluiddynamische Objekte (TFOs) aktivieren.

Neben den dynamisch simulierten TFOs existieren in ATHLET Objekte zur Festlegung der thermohydraulischen Randbedingungen: Fills zur Vorgabe einer Massen- und Enthalpiestrom-Randbedingung sowie Time-Dependent-Volumes (TDVs) zur Vorgabe einer Druck- bzw. Enthalpie-Randbedingung. Die Komponente „Fill“ wurde so erweitert, dass sie Tropfen sowohl in das thermofluiddynamische System einspeisen als auch aus diesem abziehen kann. Für den Fall des Einspeisens kann der Benutzer durch entsprechende Vorgaben einen reinen Tropfenmassenstrom über das Fill in das System transportieren; beim Abziehen von Fluid aus dem System über ein Fill setzt sich der abtransportierte Massenstrom hingegen aus einem Gemisch aus Tropfen, Dampf und kontinuierlicher flüssiger Phase zusammen – abhängig von der Gemischzusammensetzung an der Abzugsstelle. Eine Erweiterung der TDVs, so dass diese ein Tropfen/Dampf-Gemisch enthalten können, ist zukünftig geplant.

2.3.2 Das Dreifeldermodell in der Startrechnung

Wie das 5- und 6-Gleichungs-Modell ist auch das Dreifeldermodell während der ATHLET-Startrechnung nicht aktiv, da die Startrechnung auf Grundlage des 4-Gleichungs-Modells ausgeführt wird. Zu Beginn der transienten Rechnung werden die Lösungsvariablen `WVAJ` und `WLAJ` wie in /LER 98/ beschrieben initialisiert. Die Lösungsvariablen der Tropfenphase werden sodann mit den Lösungsvariablen der kontinuierlichen flüssigen Phase gleich- oder zu Null gesetzt:

$$WDAJ = WLAJ$$

$$TD = TL \quad (2.45)$$

$$XD = 0.0$$

2.3.3 Tropfenfeld und Zeitintegration (FEBE)

Die Bilanzgleichungen des Tropfenfeldes werden bei der numerischen Berechnung der Jacobimatrix und somit bei der impliziten Zeitintegration vollständig berücksichtigt.

2.3.4 Nicht vorhandene Tropfenphase in der transienten Rechnung

Wenn während der transienten Rechnung in einem mit $IARTO = 3$ deklarierten TFO keine Tropfenphase vorhanden ist – z. B. weil eine eher „ruhige“ Dampf-/Wasserströmung vorliegt –, beträgt XD selbstverständlich Null und TD und $WDAJ$ werden, wie bei der Initialisierung nach der Startrechnung, mit den entsprechenden Werten der kontinuierlichen flüssigen Phase belegt. Für die Zeitintegration mit FEBE werden die Differentialgleichungen des Tropfenfeldes bislang nicht dynamisch (de-)aktiviert, wie es gegenwärtig z. B. für das Dampfgebiet beim Übergang von ein- auf zweiphasige Strömung realisiert ist.

2.3.5 Kopplung von Zwei- und Dreifelderrechengebieten

Da der Einsatz des Dreifeldermodells in einer Simulation aufgrund der zusätzlichen Erhaltungsgleichungen mit zusätzlichem numerischem Aufwand verbunden ist, empfiehlt es sich, das Modell nur dort zu aktivieren, wo ein Mehrwert zu erwarten ist – also in Gebieten mit ausgeprägter Tropfenströmung. Wenn man das Dreifeldermodell beispielsweise in einer Simulation zum Fluten des Reaktorkerns mit Wiederbenetzung der Brennstäbe einsetzen möchte, ist es sinnvoll, das Modell nur im Kern zu aktivieren und die übrigen Kreislaufkomponenten (kalter und heißer Strang, Dampferzeuger-U-Rohre etc.) mit dem 5- bzw. 6-Gleichungs-Modell zu rechnen. Hierdurch entstehen Schnittstellen zwischen dem Dreifelder-Rechengebiet und dem Rechengebiet für das 5- bzw. 6-Gleichungs-Modell. In der gegenwärtigen Implementierung ist eine Schnittstelle zwischen Dreifeldermodell und 6-Gleichungs-Modell realisiert, nicht jedoch zwischen Dreifeldermodell und 5-Gleichungs-Modell.

Die Kopplung von Dreifelder- und 6-Gleichungsrechengebiet geschieht über eine Dreifelder-Junction zwischen 6-Gleichungs- und einem Dreifelder-Kontrollvolumen. Wenn zwei Pipe-Objekte aus den verschiedenen Rechengebieten miteinander verkettet werden, verwendet ATHLET automatisch immer die Dreifelder-Junction an der Schnittstelle, vgl. Abb. 2.1. Die an der Kopplungsstelle möglicherweise ebenfalls vorhandene 6-Gleichungs-Junction wird für die Zeitintegration automatisch abgeschaltet.

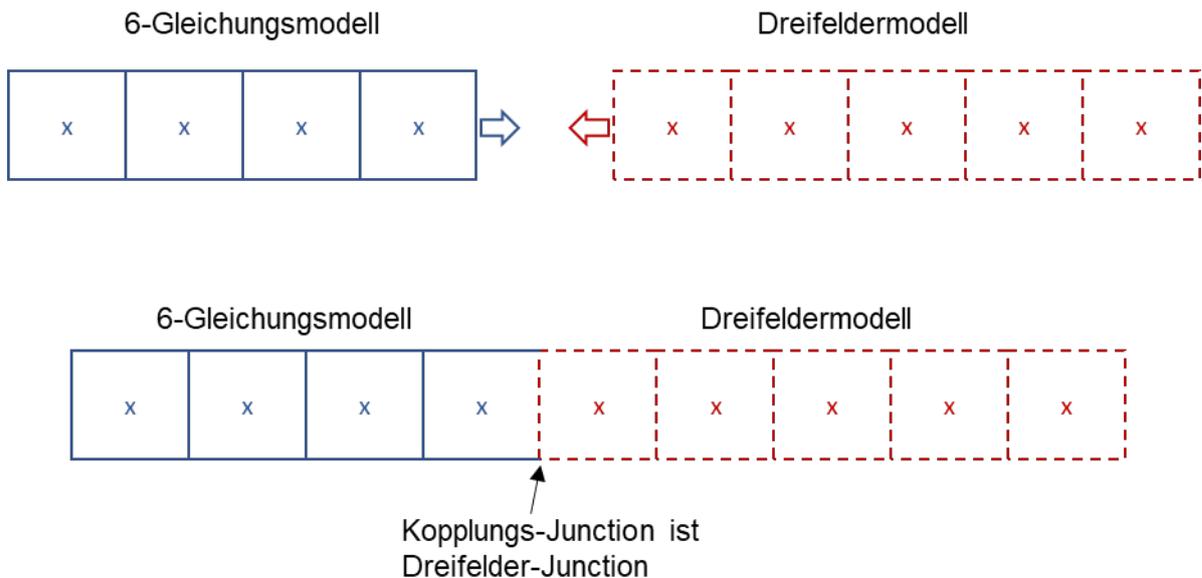


Abb. 2.1 Kopplung eines 6-Gleichungs-Pipes mit einem Dreifelder-Pipe.
 Oben: Vor der Kopplung; Unten: Nach der Kopplung. Die Kopplungs-Junction zwischen beiden Rechengebieten ist die Dreifelder-Junction.

Im Falle einer vom Dreifelder- in das 6-Gleichungsrechengebiet gerichteten Strömung werden jeweils die Massen-, Impuls- und Energieströme der beiden flüssigen Phasen (Tropfen und flüssig kontinuierlich) addiert, so dass kein Fehler in den Erhaltungsgrößen entsteht. Weitere das Fluid charakterisierende Größen, wie z. B. die Temperatur oder die Geschwindigkeit, werden aus den Erhaltungsgrößen abgeleitet.

Im Fall einer Strömung vom 6-Gleichungs- in das Dreifelderrechengebiet wird die vereinfachende Annahme getroffen, dass die Kopplungs-Junction ausschließlich Dampf und kontinuierliche Flüssigkeit, aber keine Tropfen, transportiert. D. h. Masse, Energie und Impuls der flüssigen Phase (6-Gl.-Modell) werden komplett der kontinuierlichen flüssigen Phase (Dreifeldermodell) zugeschlagen. Dieses Verfahren wird derzeit auch dann angewendet, wenn ATHLET im gekoppelten 6-Gleichungs-Kontrollvolumen mittels algebraischer Korrelationen Tropfenmitriss (sog. Entrainment) berechnet.

In den durchgeführten Simulationen lief die Kopplung von Zwei- und Dreifelderrechengebieten stabil. Als Modellverbesserung ist für das Nachfolgevorhaben geplant, die mit dem 6-Gleichungs-Modell algebraisch berechnete Entrainmentrate beim Massen-, Energie- und Impulstransport in das Dreifelder-Rechengebiet zu berücksichtigen. Ein alternativer Ansatz, die Kopplungsschnittstelle über eine 6-Gleichungs-Junction zu realisieren und die Entrainmentrate zu berücksichtigen, ist in /SKO 20b/ beschrieben.

2.4 Verifikation und Validierung

Die Modellerweiterungen wurden bisher anhand weniger Test- und Validierungsrechnungen überprüft. Die Ergebnisse wurden mit experimentellen Daten sowie mit Rechnungen mit dem 6-Gleichungs-Modell verglichen.

2.4.1 Testrechnungen mit Kohärenztest zur Berechnung der Jacobimatrix

In ATHLET wird ein implizites Zeitintegrationsverfahren mit numerischer Bestimmung der Jacobimatrix verwendet. Die Strukturinformation der Jacobimatrix speist sich aus dem Aufbau des Netzwerks aus Control Volumes und Junctions. Die Information, dass diese bei aktiviertem Dreifeldermodell zusätzliche Lösungsvariablen für das Tropfenfeld enthalten, muss für die numerische Berechnung der Jacobimatrix entsprechend bereitgestellt werden. Um zu überprüfen, ob die Strukturinformationen korrekt bereitgestellt werden, wurden verschiedene Datensätze mit aktiviertem Kohärenztest /STE 20/ simuliert. Hierdurch konnten fehlerhaft übertragene Strukturinformationen aufgedeckt und korrigiert werden. Im aktuellen Stand des Dreifeldermodells scheinen sämtliche Strukturinformationen korrekt bereitgestellt zu werden.

Über die vorgenannten Testrechnungen hinausgehend wurden zur Modellverifikation verschiedene kleinere Datensätze simuliert, um die Funktionstüchtigkeit einzelner Modellteile zu testen, beispielsweise ein einfacher Datensatz mit Fill-Komponenten, um zu überprüfen, ob das Fill je nach Benutzervorgabe Dampf, flüssiges Wasser oder ein Dampf-Tropfen-Gemisch einspeist.

2.4.2 Nachrechnungen von Entrainment-Experimenten an der Harwell-LOTUS-Versuchsanlage

Die Validierung des 3-Felder-Modells anhand des Harwell-LOTUS-Experiments wurde durchgeführt, um das 3-Felder-Modell bei Ringströmung im vertikalen Rohr zu

untersuchen, insbesondere hinsichtlich der angewandten Korrelation zur Entrainment-berechnung.

Die Harwell-LOTUS-Versuchsanlage für Luft/Wasser Tests /HEW 87/ ist in Abb. 2.2 schematisch dargestellt. Abb. 2.2 zeigt ebenfalls die Nodalisierung der Anlage in der Simulation. Das wassergefüllte, zylindrische Rohr der Länge 19,58 m wurde durch das TFO CHANNEL mit 39 CV abgebildet. Das Branch PH-BOUND diente als Druckrandbedingung am Auslass. Das TFO FILLG am unteren Ende diente zur Gaseinspeisung. Die Anfangs- und Randbedingungen sind in Tab. 2.4 aufgeführt.

Tab. 2.5 zeigt den quantitativen Vergleich verschiedener Versuche bei unterschiedlichen Gasmassenströmen und Strömungsregimen im vertikalen Rohr zwischen 2-Fluid- und 3-Felder-Modell sowie die experimentellen Daten. Die Strömungsregime umfassten die Blasen-, Schwall-, Übergangs-, und Ringströmung. Aus der Tabelle ist ersichtlich, dass der berechnete Druckgradient bei Ringströmung von dem 3-Felder-Modell leicht unterschätzt wird.

Abb. 2.4 bis Abb. 2.12 zeigen den Vergleich von Dampfgehalt und Massenstrom am Auslass des Rohrs für 3-Felder- und 2-Fluid-Modell. Die Diskrepanz tritt hauptsächlich im Fall der Ringströmung auf. In anderen Strömungsregimen stimmen die Ergebnisse gut überein, was auf eine korrekte Implementierung des 3-Felder-Modells hinweist. In der Blasen-, Schwall-, Übergangsströmungen dauerte es ungefähr 20 Sekunden, bis der stationäre Zustand erreicht war. Danach wurden alle Parameter konstant. Mit dem Massendurchsatz 0,0686 kg/s befindet sich die Strömung in dem Übergangsbereich zur Ringströmung. Mit zunehmender Gaseinlassrate trat in der Strömung ein leicht oszillierender Zustand auf (Abb. 2.9 und Abb. 2.11). Zusätzlich waren die Dampfgehalte für die beiden Ringströmungsfälle für das 3-Felder-Modell etwas größer als die in der 2-Fluid-Modell-Berechnung.

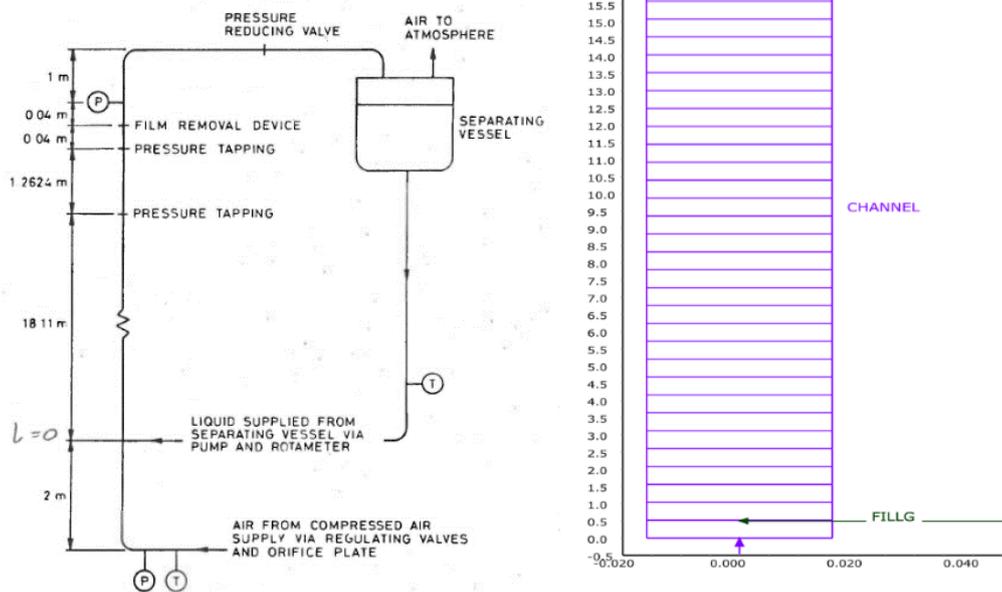


Abb. 2.2 Schematische Darstellung der Harwell-LOTUS-Versuchsanlage /HEW 87/ und die Nodalisierung des Simulationsgebiets

Tab. 2.4 Anfangs- und Randbedingungen sowie Stoffeigenschaften

Flüssigkeitsmassenstromdichte ($\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$)	297,1
Druck (kPa)	239
Flüssigkeitsdichte (kg/m^3)	998,5
Gasdichte (kg/m^3)	2,9
Flüssigkeitsviskosität (Ns/m^2)	0,001
Gasviskosität (Ns/m^2)	0,000018
Oberflächenspannung (N/m)	0,0726

Tab. 2.5 Vergleich verschiedener Versuche mit unterschiedlichen Strömungsregimen

Gasmas- senstrom (kg/s)	Strömungsregime bzw. Dampfvolumengehalt (-)			Druckverlust (Pa/m)		
	Experi- ment	3-Feld	2-Fluid	Experi- ment	3-Feld	2-Fluid
0,00234	Blasen	0,34	0,34	9489,0	5455,7	5155,9
0,0053	Schwall	0,49	0,49	3388,0	3920,2	3709,1
0,0137	Über- gang	0,64	0,63	2754,0	2837,1	2932,0
0,0686	Ring	0,99	0,98	4485,0	1005,6	2327,2
0,114	Ring	0,99	0,99	4972,0	2352,1	4742,6

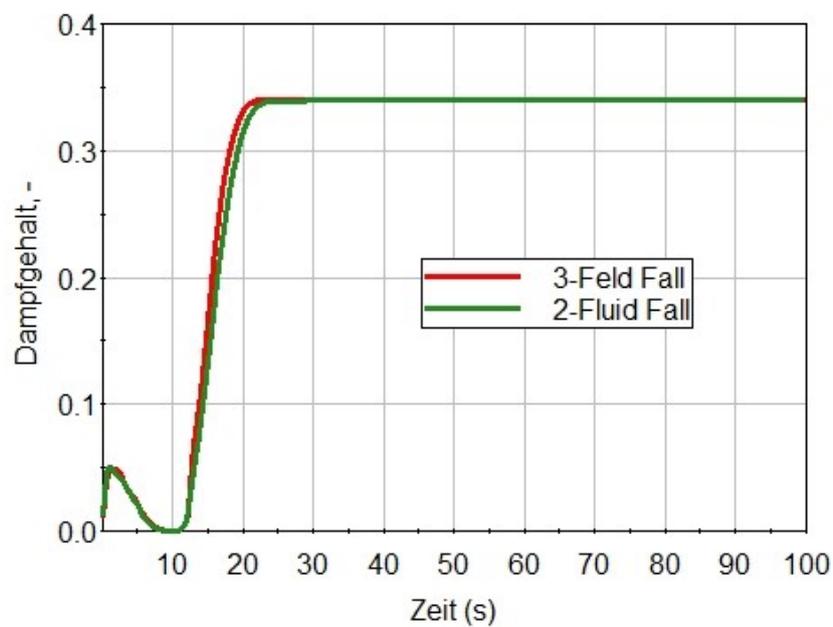


Abb. 2.3 Dampfgehalt am Auslass bei Blasenströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,00234 kg/s

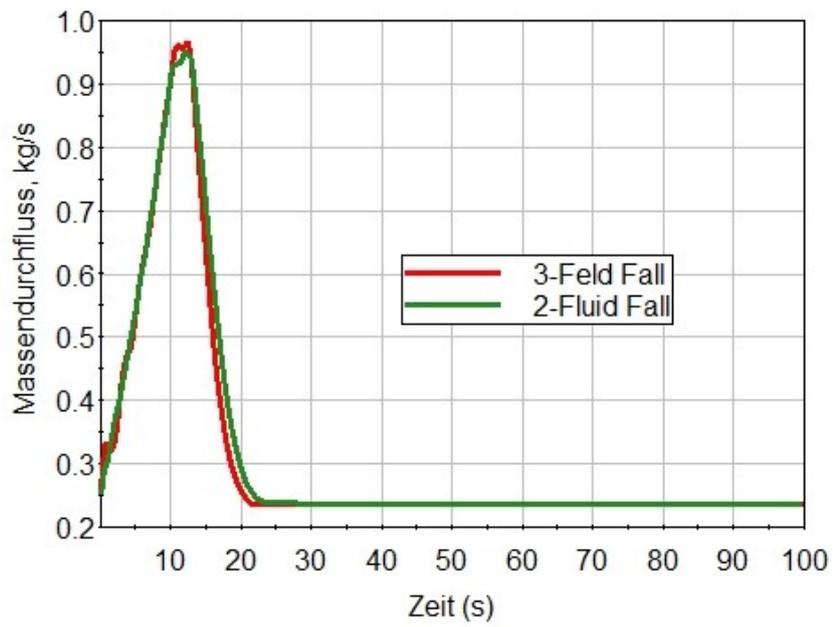


Abb. 2.4 Massenstrom am Auslass bei Blasenströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,00234 kg/s

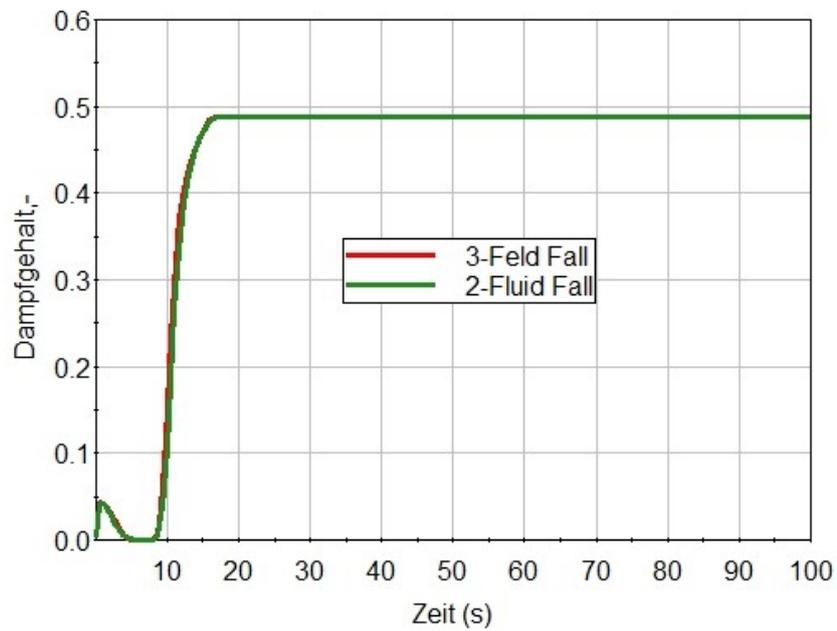


Abb. 2.5 Dampfgehalt am Auslass bei Schwallströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0053 kg/s

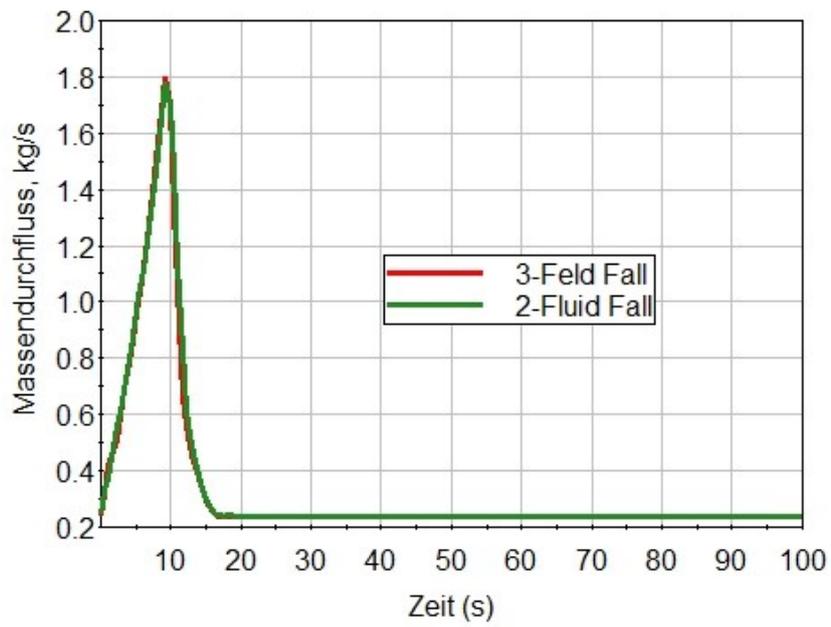


Abb. 2.6 Massenstrom am Auslass bei Schwallströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0053 kg/s

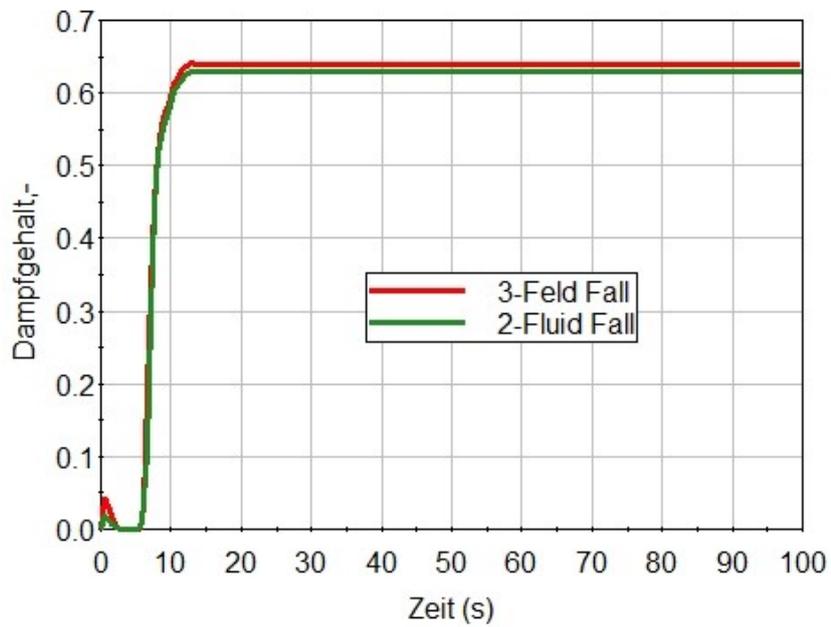


Abb. 2.7 Dampfgehalt am Auslass bei Übergangsströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0137 kg/s

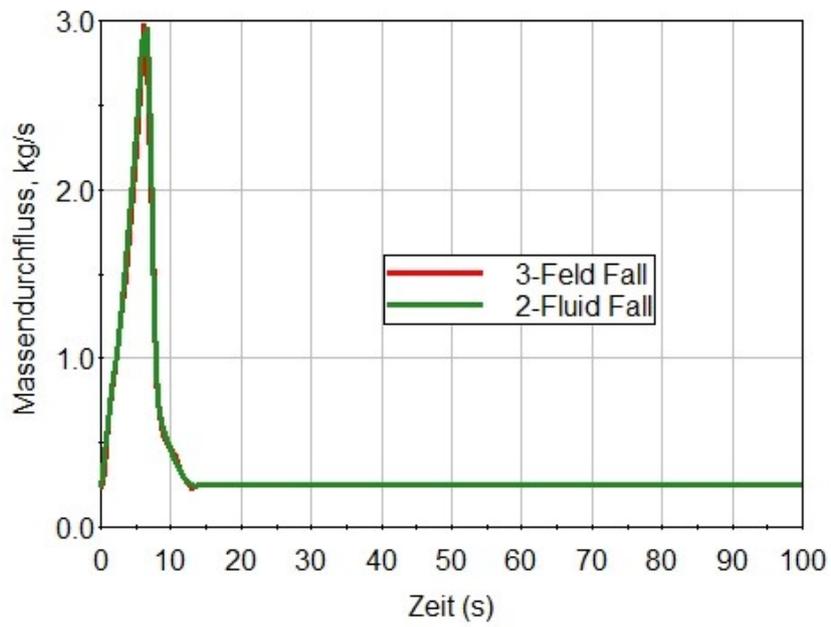


Abb. 2.8 Massenstrom am Auslass bei Übergangsströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0137 kg/s

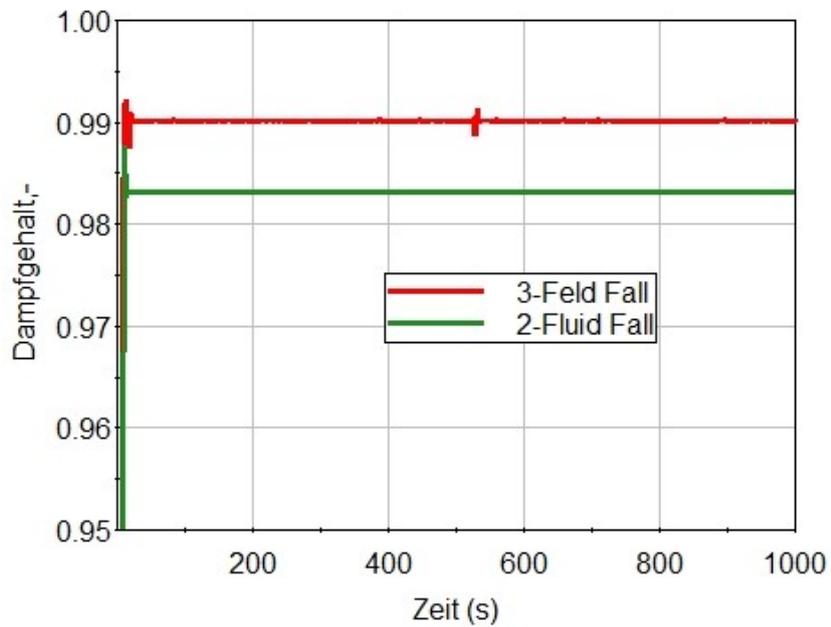


Abb. 2.9 Dampfgehalt am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s

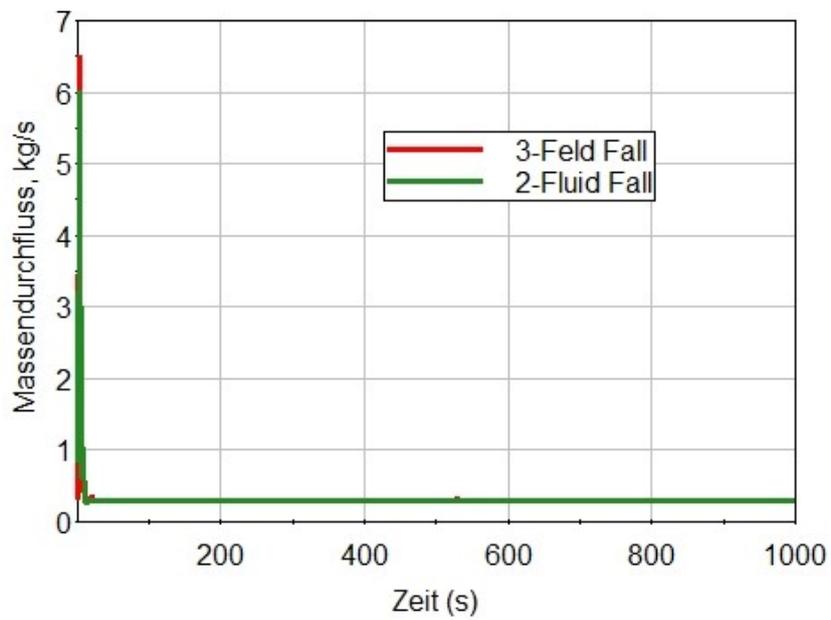


Abb. 2.10 Massenstrom am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s

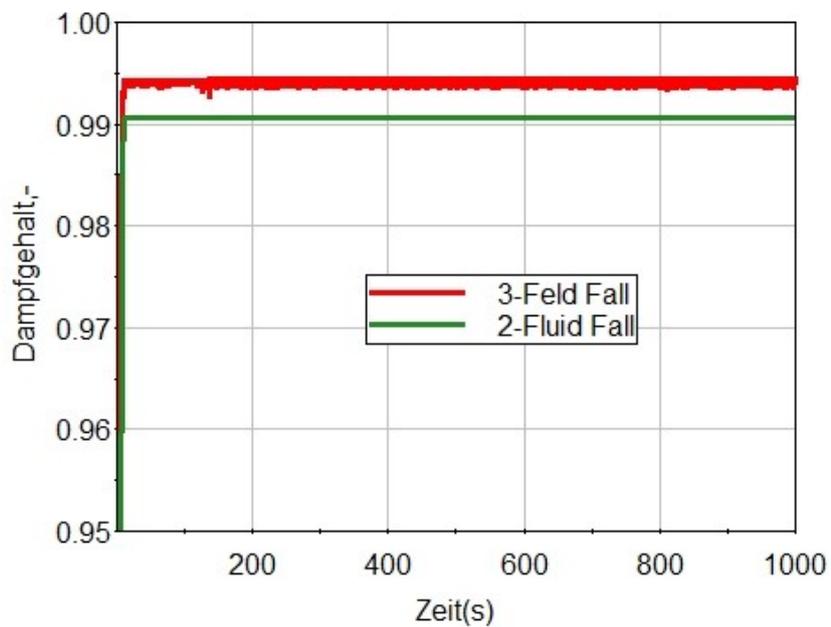


Abb. 2.11 Dampfgehalt am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0114 kg/s

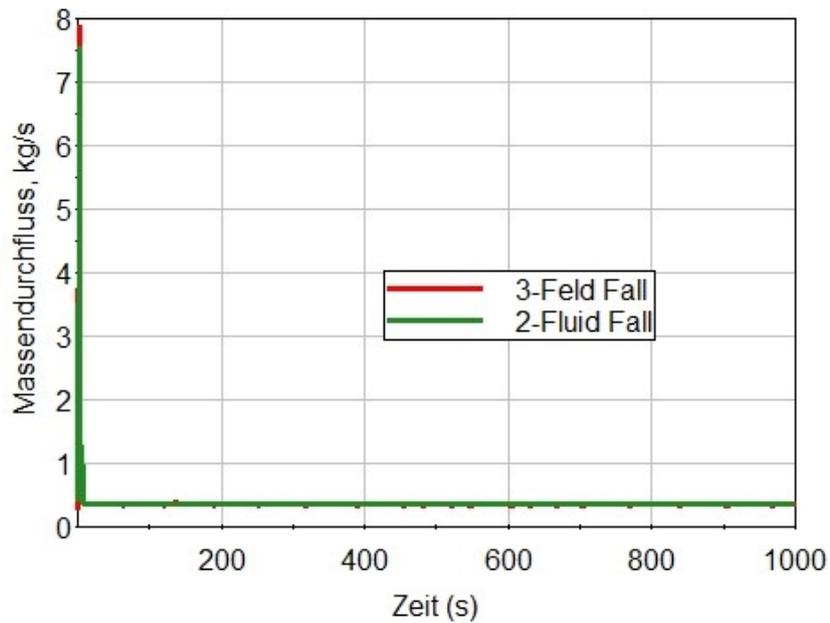


Abb. 2.12 Massenstrom am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0114 kg/s

Als weiterer Parameter wurde der Entrainmentanteil, also der Massenanteil der Tropfen an der gesamten Wasserphase, untersucht. Hierbei ist zu beachten, dass der Entrainmentanteil im 2-Fluid-Modell eine Leitungsgröße und im 3-Felder-Modell eine Kontrollvolumenvariable ist. Daher wurden die 3-Felder-Modell-Ergebnisse in Leitungsgrößen durch geeignete Mittelung über die beiden benachbarten CV umgerechnet. Abb. 2.13 und Abb. 2.14 zeigen für zwei Versuche den Entrainmentanteil am Auslass. Es ist ersichtlich, dass die Werte der 3-Felderberechnung größer als die Ergebnisse des Experiments und des 2-Fluid-Modells sind, gleichwohl auch das 2-Fluid-Modell den Entrainmentanteil für den kleineren Gasmassenstrom etwas überschätzt. Eine endgültige Bewertung der Ergebnisse für das Entrainment ist an dieser Stelle jedoch schwierig, da keine experimentellen Vergleichsdaten für den Dampfvolumenteil vorliegen. Beide ATHLET-Modelle, 2-Fluid- und 3-Felder-Modell, berechnen hohe Dampfvolumenteil von 0,98 bis 0,99. Da im Experiment von einer Ringströmung berichtet wird (mit signifikantem Entrainment, Abb. 2.14), erscheinen die berechneten Werte für den Dampfvolumenteil als sehr hoch. Damit verliert auch der Vergleich der Entrainmentraten an Aussagekraft. Weitere Experimente mit zusätzlichen Messwerten müssen zukünftig nachgerechnet werden, um die Leistungsfähigkeit der für das 3-Felder-Modell implementierten Modellterme im Detail bewerten und nachweisen zu können.

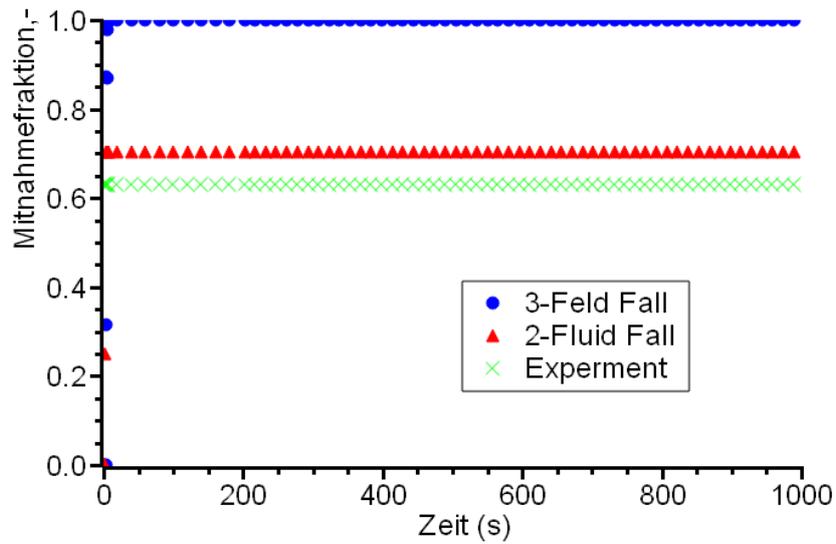


Abb. 2.13 Entrainmentanteil am Auslass bei Ringströmung und einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s

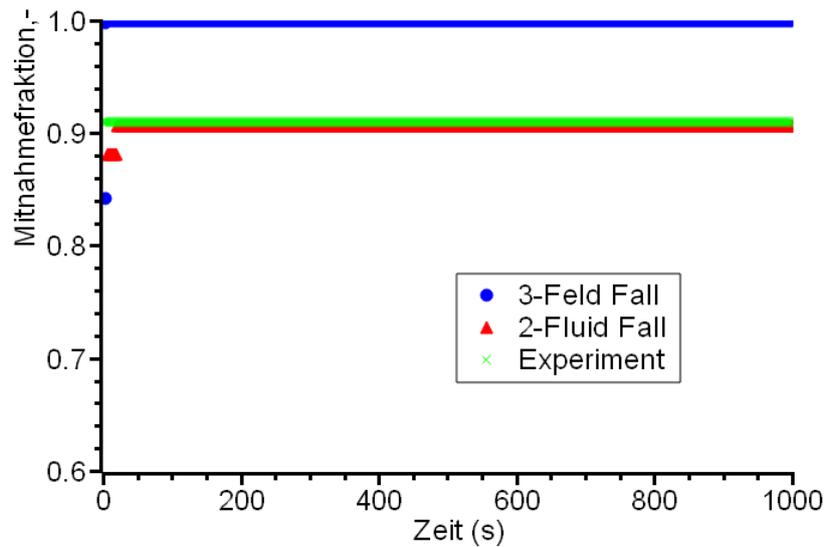


Abb. 2.14 Entrainmentanteil am Auslass bei Ringströmung und einer Gaseinlassrate von 0,114 kg/s

2.4.3 Nachrechnungen eines Reflooding-Experiments an der FEBA-Versuchsanlage

Zur Validierung der bisherigen Arbeiten zum Dreifeldermodell sollte ein an der FEBA-Versuchsanlage durchgeführtes Reflooding-Experiment nachgerechnet /SKO 12/, /SKO 14/ /SKO 13/ werden. Ziel der Nachrechnung sollte sein, die

Simulationsergebnisse mit 2M- und Dreifeldermodell gegenüberzustellen und mit den Experimentalwerten zu vergleichen. Durch die Verwendung der Tropfenphase als Transportgröße wurde eine höhere Genauigkeit der Rechenergebnisse bei aktiviertem Dreifeldermodell erwartet.

Tatsächlich haben die FEBA-Nachrechnungen dazu beigetragen, einige Schwächen der Implementierung des Dreifeldermodells aufzudecken, welche größtenteils auch verbessert werden konnten. Ein gegenwärtig noch offener, im Rahmen der FEBA-Nachrechnungen aufgedeckter Punkt ist, dass die Massen- und Energieaustauschrate zwischen den verschiedenen Phasen (also verursacht durch Kondensation, Verdampfung, Tropfenmitriss oder -ablagerung) begrenzt werden muss, wenn eine vom Austausch betroffene Phase nicht existiert; dieser Arbeitsschritt konnte im Rahmen des Vorhabens noch nicht fertiggestellt werden. Bevor dieser Punkt nicht bearbeitet ist, kann das Dreifeldermodell jedoch nicht anhand der FEBA-Experimente validiert werden.

2.5 Zusammenfassung

Die Erhaltungsgleichungen des 3-Felder-Modells einschließlich der erforderlichen Schließungsbeziehungen sowie einer Anpassung des numerischen Lösungsverfahrens an die Anforderungen der zusätzlichen Gleichungen und Lösungsvariablen konnten in ATHLET implementiert werden. Erste Ergebnisse von Test- und Validierungsrechnungen haben einerseits gezeigt, dass das 3-Felder-Modell eine Ring-Tropfenströmung simulieren kann, dass andererseits jedoch noch verschiedene Ertüchtigungen am Modell vorgenommen werden müssen.

Der zunächst wichtigste Schritt zur Ertüchtigung des Dreifeldermodells ist die Implementierung der in Abschnitt 2.4.3 angesprochenen Begrenzung der Massen- und Energieaustauschrate zwischen den verschiedenen Phasen. Eine solche Begrenzung muss in die Routine zur Berechnung der Massen- und Energiebilanz eingepflegt werden und ist notwendig, um zu verhindern, dass der Massenanteil einer Phase aufgrund der berechneten Austauschraten kleiner als Null wird.

Zwar existieren bereits solche Begrenzungsfunktionen in den Routinen, welche im Zusammenhang mit der Zeitintegration stehen, allerdings haben die FEBA-Simulationen gezeigt, dass auch in den Modelltermen (also vor der Gleichungslösung) eine Begrenzung notwendig ist. Für das 6-Gleichungs-Modell liegen entsprechende Programmabschnitte bereits vor, für das 3-Felder-Modell müssen entsprechende Algorithmen

definiert und anschließend implementiert werden. Durch die dritte Phase gibt es im Vergleich zum 6-Gleichungs-Modell einen zusätzlichen Freiheitsgrad, welcher die Definition eines solchen Begrenzungsalgorithmus erschwert. Es wurden bereits Arbeiten zu diesem Punkt durchgeführt, allerdings liegt gegenwärtig kein sinnvoll lauffähiger Begrenzer vor. Die Bearbeitung dieses Problems soll zu einer Verbesserung der numerischen Stabilität des Codes führen (weniger Oszillationen und größere Zeitschrittweiten, da abwegige Werte für die Lösungsvariablen x_{QM} und x_D bereits modellseitig behandelt werden und nicht erst in den Integrationsroutinen).

In den durchgeführten Rechnungen hat sich gezeigt, dass das Entrainment bei Einsatz des 3-Felder-Modells überschätzt wird. Daher soll insbesondere die Modellierung der Entrainment- und Depositionsrate anhand weiterer Daten aus der Literatur auf ihre Vorhersagefähigkeit im Rahmen ihres Gültigkeitsbereichs überprüft werden. Zusätzlich wurden teilweise Oszillationen beobachtet, die sich in erhöhten Simulationszeiten und kleineren Zeitschrittweiten widerspiegeln. Da dies insbesondere bei hohem Entrainmentanteil auftrat, sind beide genannten Probleme möglicherweise miteinander verknüpft (und hängen möglicherweise mit der oben beschriebenen, fehlenden Begrenzung zusammen).

Nachdem die angestrebten Verbesserungen implementiert sind, sollen diese anhand bestehender Datensätze getestet werden. Darüber hinaus sollen vereinzelt Erweiterungen der Implementierung vorgenommen werden, um das Modell zu konsolidieren und für ein breites Spektrum an Anwendungsfällen insbesondere mit Blick auf den Reaktorkern anzupassen. Diese Arbeiten sollen im Rahmen des Nachfolgevorhabens fortgeführt werden.

3 Modellierung von Forschungsreaktoren

Die thermohydraulischen Bedingungen in Forschungsreaktoren unterscheiden sich in vielerlei Hinsicht von den herkömmlichen, wasserbasierten Leistungsreaktoren (d. h. DWR und SWR). Charakteristisch (gleichwohl nicht für jedes Design gültig) sind:

- Niedriger Druck, typischerweise zwischen 1 und 10 bar
- Mittlere bis hohe Wärmestromdichten von 500 W/cm² und mehr
- Hohe Kerneintritts- und Kernaustrittsunterkühlung von 100 K und mehr
- Hohe Kühlmittelgeschwindigkeiten (15 m/s und mehr)
- Im Betrieb Durchströmung des Kerns von oben nach unten (designabhängig)
- Beim Übergang zum Naturumlauf Strömungsumkehr mit vorübergehend sehr geringen Massenstromdichten im Kern (designabhängig)
- Plattenförmige Brennelemente mit sehr engen, rechteckigen Kühlkanälen: Plattenabstand ca. 2 mm (designabhängig)

Die Verwendung von plattenförmigen, durch schmale Kühlkanäle separierte Brennelemente ermöglicht ein höheres Verhältnis von Wärmeübertragungsfläche zu Kühlmittelvolumen. Die dargestellten Betriebsbedingungen, die z. B. auch für den FRM-II in München zutreffen, machen deutlich, dass die Gültigkeit der für Leistungsreaktoren validierten Modellgleichungen für Forschungsreaktoren nicht unmittelbar vorausgesetzt werden kann. Aufgrund der rechteckigen Kanalgeometrie sind auch die für Rohre oder Bündel abgeleiteten Korrelationen nicht unmittelbar auf Forschungsreaktoren übertragbar. Dies gilt z. B. für die Korrelationen für den kritischen Wärmestrom (CHF). Die Westinghouse W-3-Korrelation wurde wie die meisten CHF-Korrelationen in ATHLET zur Bestimmung des CHF in DWR oder SWR-Kernen implementiert und validiert /AUS 19/. Bisher wurde in ATHLET die Mirshak-Korrelation /MIR 59/ für die Berechnung von CHF in Forschungsreaktoren empfohlen. Allerdings basiert diese auf einer sehr geringen Datenbasis mit kleiner Bandbreite an Strömungsbedingungen. Daneben kann auch die Look-up-Table von Groeneveld /GRO 07/ genutzt werden, die auf einer sehr breiten Datenbasis beruht und einen weiten Gültigkeitsbereich hinsichtlich Druck, Massenstromdichte und hydraulischem Durchmesser aufweist. Bisher mit ATHLET z. B. bei Versuchsnachrechnungen zur COSMOS-L Anlage (KIT) erzielte Ergebnisse legen jedoch die Vermutung nahe, dass weder Mirshak noch Groeneveld den CHF bei niedrigem

Druck zutreffend vorhersagen können. Dieses Ergebnis wird von weiteren Untersuchungen aus der Literatur gestützt /SUD 93/, /GHI 16a/ und zeigt Weiterentwicklungsbedarf auf.

Darüber hinaus treten in Forschungsreaktoren aufgrund des Designs mit thermohydraulisch isolierten, kompakten Kühlkanalanordnungen besondere Strömungsphänomene auf, die von hoher sicherheitstechnischer Relevanz sind. Hierzu zählen Strömungsinstabilitäten vom Typ der Ledinegg-Instabilität, die eine Folge der steigenden zweiphasigen Druckverluste bei einer im Störfallverlauf abnehmenden Massenstromdichte sind. Eine Verringerung des Massenstroms führt zu einem plötzlichen Anstieg der Dampferzeugung, wodurch es zu einer Kühlkanalblockade und damit zu einem plötzlichen Anstieg des Zweiphasendruckabfalls kommen kann (Onset of Flow Instabilities – OFI). Diese thermohydraulische Instabilität tritt bei niedrigen Systemdrücken (< 20 bar) bereits weit unterhalb der Sättigungstemperatur des Fluids im unterkühlten Siedebereich auf, wenn die Plattentemperaturen in Störfallsituationen die Sättigungstemperatur des Kühlmittels übersteigen und es zu lokaler Dampfblasenbildung kommt. Um die Sicherheit von Forschungsreaktoren mit ATHLET zuverlässig bewerten zu können, müssen derartige Vorgänge realistisch simuliert werden.

Vor diesem Hintergrund wurde ATHLET in den folgenden zwei Bereichen validiert und verbessert:

- Für die Simulation der Strömungsinstabilität wurden die THTL Strömungsinstabilitätsexperimente /SIM 94/ als Testfälle verwendet, um die aktuelle Leistungsfähigkeit von ATHLET zu beurteilen. Im Rahmen der Validierung wurde ein Fehler im Kondensationsmodell aus der vorherigen Programmversion entdeckt und in der aktuellen Entwicklungsversion korrigiert (siehe Kapitel 6.3.1). Nach der Korrektur zeigt das Ergebnis eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Mit der Modifikation des Verdampfungsmodells und der Implementierung einer neuen Korrelation für den Blasendurchmesser liefert die ATHLET-Entwicklungsversion eine konservative Vorhersage für OFI und erfasst den experimentellen Trend in sehr guter Übereinstimmung.
- Für die Berechnung des kritischen Wärmestroms wurde eine neue, für die Anwendung in Forschungsreaktoren vorgeschlagene Korrelation in ATHLET implementiert, nämlich die Sudo-Kaminaga-Korrelation /KAM 98/. Diese Korrelation wurde auf Basis von Experimenten bei niedrigem Druck und mit engem, rechteckigem Kühlkanal abgeleitet. Zwei Varianten der Sudo-Kaminaga-Korrelation werden dem Benutzer in ATHLET zur Verfügung gestellt. Die integrale und die lokale Version der

Sudo-Kaminaga-Korrelation, die über einen Eingabeparameter ($ICHF=11$ bzw. $ICHF=12$) aktiviert werden können.

Programmänderungen und Validierungsergebnisse sind in den nachfolgenden Kapiteln beschrieben.

3.1 Simulation von Strömungsinstabilitäten

Die Strömungsinstabilität ist ein komplizierter thermohydraulischer Prozess mit gegenseitiger Wechselwirkung von Oberflächenverdampfung, Grenzflächenkondensation und Driftgeschwindigkeit zwischen Dampf und Flüssigkeit. Auf Basis von Sensitivitätsuntersuchungen wird die Dampf- und Flüssigkeitsdriftgeschwindigkeit als weniger einflussreiche Größe eingeschätzt, deren aktuelle Modellierung als angemessen für Niederdruckbedingungen angesehen werden kann. Eine Änderung der Modellierung der Driftgeschwindigkeit führte zu keiner signifikanten Änderung des Simulationsergebnisses, bspw. für die unten beschriebenen THTL-Versuche. Weitere Arbeiten konzentrieren sich daher vor allem auf die Wandverdampfung und die Kondensation im Bulk.

Um den aktuellen Status von ATHLET bei der Vorhersage von Strömungsinstabilitäten zu ermitteln, wurde das THTL-Experiment simuliert. Die Teststrecke bei THTL ist ein enger, rechteckiger Kanal mit halbrundem Abschluss an den beiden schmalen Seiten (siehe Abb. 3.1), der von oben nach unten durchströmt wird. Die Versuche beginnen mit einem relativ hohen Massenstrom, und die Strömungsinstabilität wird durch eine kontinuierliche Verringerung des Massenstroms angesteuert. Im Experiment werden der Druckabfall zwischen dem oberen und unteren Kanalende, die Auslassunterkühlung und der Einlassmassenstrom gemessen. Nicht gemessen wird der Dampfvolumentgehalt. Der Betriebsdruck liegt bei 17 bar. Die Spaltweite und die Breite des Strömungskanals betragen 2,54 mm und 12,7 mm, bei einer beheizten Länge von 0,507 m.

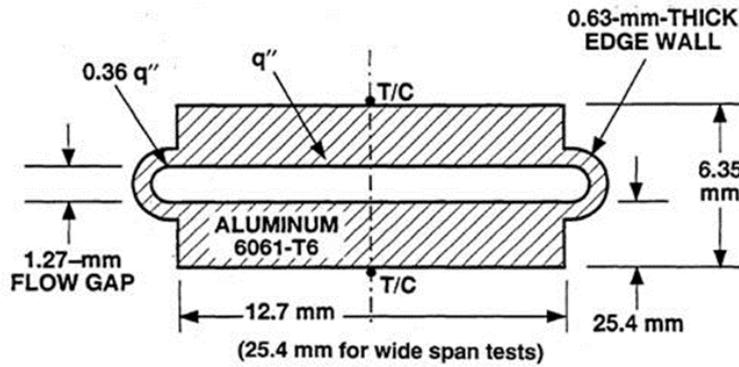


Abb. 3.1 Schematische Darstellung der THTL-Teststrecke /SIM 94/

Wie Abb. 3.2 verdeutlicht, konnte bei der Nachrechnung des THTL-Experiments einerseits eine gute Übereinstimmung für die Fälle mit niedrigem Wärmestrom und andererseits ein tendenziell nicht konservatives Ergebnis für die Fälle mit hohem Wärmestrom erzielt werden. Dieses Ergebnis ist in guter Übereinstimmung mit den früheren Simulationen der GRS /LER 07a/, die vor der umfangreichen Restrukturierung des Kondensationsmodells im Jahr 2016 erfolgt waren. Nichtsdestotrotz gibt es einige Ungenauigkeiten in der Vorhersage des Beginns der Strömungsinstabilität, und das gibt Raum für Verbesserungen im Verdampfungs- und Kondensationsmodell.

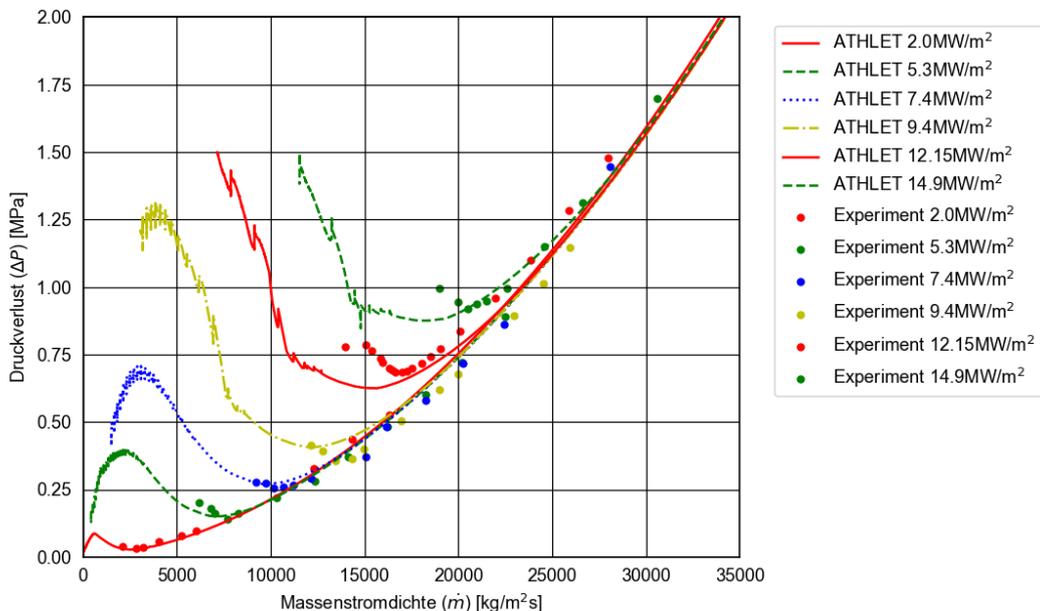


Abb. 3.2 Vergleich der ATHLET-Vorhersage mit den experimentellen Daten der THTL-Anlage /WON 20a/

Tab. 3.1 Relative Fehler zwischen Experiment und Simulation bei OFI /WON 20a/

Wärmestromdichte [MW/m ²]	2,0	5,3	7,4	9,4	12,15	14,9
Druckverlust [MPa]	-18 %	6,33 %	8,8 %	12,8 %	-4,4 %	-4,75 %
Massenstromdichte [kg/m ² s]	2,04 %	-2,5 %	-3 %	-10,3 %	-6,4 %	-11,4 %
Austrittstemperatur [°C]	6,2 %	9,7 %	9,1 %	16,3 %	9,6 %	15,2 %

Bei hohem Druck sind die Grenzflächenkondensation und die Verdampfung physikalisch und numerisch einfacher zu handhaben als bei niedrigem Druck, da das Dichteverhältnis zwischen Dampf und Wasser größer (näher 1) ist. Um mit Blick auf Forschungsreaktoren die Phänomene der Verdampfung und Kondensation weiter zu untersuchen und ATHLET zu validieren, wird daher nachfolgend das Experiment von Zeitoun verwendet /ZEI 94/, das bei niedrigem Druck und geringer, aufwärts gerichteter Massenstromdichte in einem beheizten Rohr durchgeführt wurde. Bei den Nachrechnungen mit ATHLET wurde die zur Erhöhung der numerischen Stabilität standardmäßig aktivierte Reduzierung der Verdampfungs- bzw. Kondensationsrate bei niedrigem Druck ausgeschaltet (Inputparameter $IGAM=1$). Somit wird mit den von den Modellen tatsächlich berechneten Übergangsraten gearbeitet, schließlich steht bei der vorliegenden Untersuchung weniger die numerische Stabilität als vielmehr die physikalische Genauigkeit im Vordergrund. Für ATHLET 3.2 zeigt sich eine signifikante Überschätzung des Dampfvolumentils vom Anfang bis zum Ende des Rohres. Dies ist auf eine Vereinfachung bei der Berechnung des Blasendurchmessers und damit der Phasengrenzfläche zurückzuführen. Der Blasendurchmesser der Blasenströmung (D_b) in ATHLET 3.2 wird wie folgt berechnet,

$$D_b = X_{turb} D_{turb} + (1 - X_{turb}) D_{non-turb}, \quad (3.1)$$

$$D_{turb} = \frac{1}{\epsilon_b^{0.4}} \left(\frac{\sigma}{\rho_l} \right)^{0.6} \left(\frac{\rho_l}{\rho_v} \right)^{0.2} \quad (3.2)$$

$$D_{non-turb} = \frac{7.5 \sigma}{\rho_l V_r^2}, \quad (3.3)$$

$$X_{turb} = \frac{\epsilon_{turb}}{76.0 \left(\frac{\sigma}{\rho_l}\right)^{0.25} \left(\frac{\rho_l}{\rho_v}\right)^{1.25}} \quad (3.4)$$

Hierin ist X_{turb} ein Wichtungsfaktor für den Turbulenzeinfluss; D_{turb} und $D_{non-turb}$ sind Blasendurchmesser unter turbulenten und laminaren Bedingungen; σ ist die Oberflächenspannung; ρ_l und ρ_v sind Dichten der Flüssigkeit und des Dampfes; ϵ ist die turbulente Dissipationsrate (berechnet in Abhängigkeit des Strömungsregimes); V_r ist die Relativgeschwindigkeit zwischen Flüssigkeit und Dampf.

Damit ist der vorhandene, minimale Blasendurchmesser für die Niederdruckbedingung zu groß, und ATHLET verwendet diesen Durchmesser zur Berechnung aller Grenzflächenkondensationsprozesse. Der minimale Blasendurchmesser wird berechnet als

$$C_{B,min} = \left(\frac{6\alpha}{1.0 \times 10^5 \pi}\right)^{0.333} \quad (3.5)$$

Der minimale Blasendurchmesser liegt bei ca. 12,5 mm für einen Dampfanteil von 0,1, was für die Niederdruckbedingung zu groß und nicht geeignet ist. In der konkreten Umsetzung ist der Blasendurchmesser auf den hydraulischen Durchmesser begrenzt. Er führt zu einer deutlichen Überschätzung und damit zu einem Fehler in der Grenzflächenkondensationsrate. Für die folgende Diskussion gibt es zwei Ideen für eine mögliche Modifikation in ATHLET, um den unterkühlten Niederdruck-Siedeprozess genauer zu simulieren.

Modifikation des Kondensationsmodells

Zunächst wird das bisherige Modell der Grenzflächenkondensation von ATHLET als geeignet für Niederdruck angenommen (mit der Option `IGAM=1`, wie oben beschrieben). Die Änderung besteht dann darin, die Ünal-Korrelation zur Berechnung des Blasendurchmessers anzuwenden und somit den minimalen Blasendurchmesser im Direktkondensationsmodell von ATHLET an die Niederdruckbedingungen anzupassen. Ergänzend hierzu wird ein neues Niederdruck-Kondensationsmodells, nämlich die Akiyama-Korrelation, als alternative Methode zur Berechnung der Grenzflächenkondensation

implementiert. Die Akiyama-Korrelation /AKI 73/ verwendet den Ansatz der Kondensations-Nusselt-Zahl (Nu):

$$Nu_{cond} = 0.37 Re_b^{0.6} Pr^{0.333}. \quad (3.6)$$

Re_b und Pr sind Blasen-Reynolds- und Flüssigkeits-Prandtl-Zahl. Die Akiyama-Korrelation wurde aus Experimenten mit leicht unterkühltem Wasser, Ethanol und Tetrachlorkohlenstoff unter Atmosphärendruck mit einer Unterkühlung von 2 bis 50 °C abgeleitet. Die Berechnung der Blasen-Reynoldszahl (Re_b) verfolgt den Ansatz, dass die charakteristische Länge von der turbulenten Reynoldszahl abhängt /AVD 16/. Für die turbulenten Reynoldszahlen zwischen 10000 und 30000 wird eine lineare Interpolation durchgeführt:

$$Re_b = \begin{cases} \frac{\rho_l |w_l| D_b}{\mu_l} & \text{für } Re_l < 10000 \\ \frac{\rho_l |w_l| D}{\mu_l} & \text{für } Re_l > 30000 \end{cases} \quad (3.7)$$

mit w_l als Flüssigkeitgeschwindigkeit. Die Kondensationsrate wird dann berechnet als:

$$\dot{m}_{kond} = - \frac{Nu_{Aki} a_{int} \lambda_l (T_s - T_l)}{D_b (h_{vs} - h_{ls})}, \quad (3.8)$$

a_{int} ist die Zwischenphasenflächendichte. Die Akiyama-Korrelation wird zusammen mit dem Ünal-Modell zur Berechnung des Blasendurchmessers verwendet. Die in /HAI 94/ erwähnte Näherungsformel wird hierbei zur Berechnung des Blasendurchmessers als Alternative zur original Ünal-Veröffentlichung genutzt /ÜNA 76/.

$$D_B = 2.42 \times 10^5 \frac{p^{0.709} A}{\sqrt{bk}} \quad (3.9)$$

$$A = \frac{T_w - T_s}{2\rho_v h_{ev}} \left(\frac{\lambda_s \rho_s C_{p,s}}{\pi} \right)^{1/2} \quad (3.10)$$

$$b = \frac{T_s - T_l}{2} \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_l} \right) \quad (3.11)$$

$$k = \begin{cases} \left(\frac{w_l}{0.61} \right)^{0.47} & \text{für } w_l > 0.61 \\ 1 & \text{für } w_l < 0.61 \end{cases} \quad (3.12)$$

Hierin sind p der Druck; T_w , T_l und T_s die Wand-, Flüssigkeits- bzw. Sättigungstemperatur; λ_s , ρ_s , $C_{p,s}$ Wärmeleitfähigkeit, Dichte und spezifische Wärmekapazität des Strukturmaterials.

Die Ünal-Korrelation wurde aus Experimenten im Bereich von 0,1 bis 17,7 MPa und mit einem Wärmestrom von 0,47 bis 10,64 MW/m² abgeleitet. Die Ünal-Korrelation berücksichtigt die thermischen Eigenschaften der beheizten Festkörperoberfläche, λ_s , ρ_s , $C_{p,s}$.

Modifikation der Verteilung des Wandwärmestroms

Entsprechend früherer Analysen aus der Literatur mittels RELAP und CFX /TU 02/, die gezeigt haben, dass die Implementierung eines Partitionierungsmodells für den Wandwärmestrom zu einer signifikanten Verbesserung des unterkühlten Niederdrucksiedens führen kann, wird in ATHLET ein empirisches Wandwärmestrompartitionierungsmodell implementiert.

Im Wandwärmestrompartitionierungsmodell wird der Oberflächenwärmestrom detailliert modelliert. Aus den mikroskaligen Phänomenen der Keimbildungsdichte, der Blasenablösefrequenz und der Wartezeit bis zur Wiederbenetzung können drei separate Beiträge des Wärmeübergangs, die turbulente Konvektion, die Verdampfung sowie der sogenannte Quenching-Wärmestrom konstruiert werden, ohne eine spezielle Siedekorrelation (z. B. nach Chen) zu verwenden. Der Vorteil des Wandwärmestromverteilungsmodells ist, dass der Verdampfungswärmestrom, der maßgeblich den Dampf volumengehalt mitbestimmt, direkt aus dem Beitrag des Verdampfungswärmestroms bestimmt werden kann. In der aktuellen Implementierung in ATHLET wird dieser Beitrag vermutlich überschätzt. Näherungsweise ist der gesamte mikroskopische Wärmeübergangskoeffizient aus der Chen-Korrelation für die Oberflächenverdampfung verantwortlich. Für weitere Informationen siehe /WAR 06/, /BAS 05/, /GU 17/.

Auch wenn im Rahmen der bisherigen Entwicklung /WON 21/ noch kein Wandwärmestrompartitionierungsmodell in ATHLET implementiert wurde, so kann aber das bestehende Modell in einem ähnlichen Sinne angepasst werden. In der bisherigen Implementierung wird der Verdampfungswärmestrom einfach mit der Annahme berechnet, dass der gesamte mikroskopische Teil der Chen-Korrelation für den Oberflächenverdampfungsprozess verantwortlich ist. Nichtsdestotrotz geht ein gewisser Teil des Verdampfungswärmestroms in den Quenching-Wärmestrom ein. Wenn die Blasen die beheizte Oberfläche verlassen, strömt kältere (nicht überhitzte) Flüssigkeit aus dem Bulk nach. Nun ist ein zusätzlicher Wärmestrom erforderlich, um die Flüssigkeit wieder aufzuheizen, so dass eine zweite Blase wachsen kann und der Prozess weitergeht. Die Menge des Wärmestroms, die zu diesem Prozess beiträgt, ist der Quenching-Wärmestrom, und dieser trägt nicht zur Verdampfung bei, sondern kann mit dem einfachen Konvektionswärmestrom (d. h. Dittus-Boelter /DIT 30/) zusammengefasst werden. Daher ist es im Allgemeinen physikalisch nicht korrekt, den gesamten mikroskopischen Wärmeübergangskoeffizienten für die Oberflächenverdampfung zu verwenden. Wie zuvor besprochen, ist ein Modell zur separaten Berechnung der drei Komponenten des Wandwärmestroms nicht im Code implementiert. Allerdings kann der Beitrag des Quenching-Wärmestroms vereinfacht berücksichtigt werden, indem der Wärmestrom zur Verdampfung geeignet angepasst wird /HAI 01/:

$$Q_{\text{Verdampfung}} = [htc_{\text{Alles}} - (1 - A_b)htc_{\text{Einzelkonvektion}}](T_w - T_l) \left(\frac{T_w - T_s}{T_w - T_l} \right)^2 \quad (3.13)$$

$$1 - A_b = \begin{cases} 1 - \frac{\pi\alpha}{16\alpha_{OSV}} & \text{für } \alpha < \frac{16\alpha_{OSV}}{5} \\ 0 & \text{für } \alpha > \frac{16\alpha_{OSV}}{5} \end{cases} \quad (3.14)$$

Unter der Annahme, dass ein signifikanter Dampf volumenanteil bei 5 % (α_{OSV}) auftritt, lässt sich obige Formel für die nicht von Blasen bedeckte Fläche $1 - A_b$ verwenden /HAI 94/.

Insgesamt führen die beiden oben beschriebenen Programmmodifikationen zu vier verschiedenen Modellierungen der Wandverdampfung und Bulk Kondensation. Die

folgenden Abbildungen für die Zeitoun-Experimente B4 und B8 zeigen, dass die Modifikation bei der Bestimmung des Blasendurchmessers gemeinsam mit dem geänderten Verdampfungsmodell eine recht gute Übereinstimmung des experimentellen Dampfvolumentils ergibt.

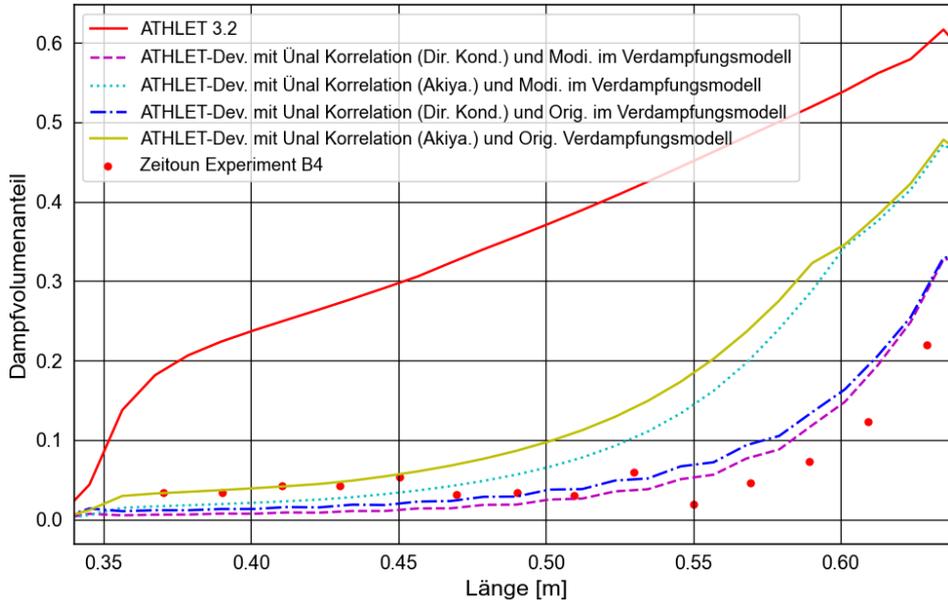


Abb. 3.3 Vergleich verschiedener ATHLET-Modifikationen mit dem Zeitoun-Experiment B4 ($\dot{m} = 152,5 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}$; $Q = 478 \frac{\text{kW}}{\text{m}^2}$; $P_{\text{ein}} = 1,19 \text{ bar}$; $T_{\text{ein}} = 79,8 \text{ }^\circ\text{C}$)

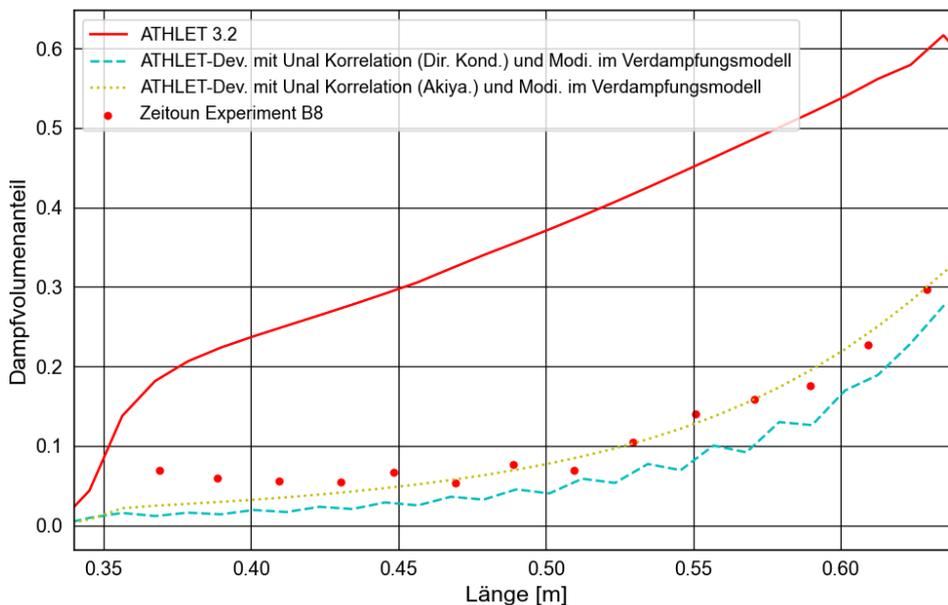


Abb. 3.4 Vergleich verschiedener ATHLET-Modifikationen mit dem Zeitoun-Experiment B8 ($\dot{m} = 263,8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}$; $Q = 596 \frac{\text{kW}}{\text{m}^2}$; $P_{\text{ein}} = 1,2 \text{ bar}$; $T_{\text{ein}} = 84,68 \text{ }^\circ\text{C}$)

Um die Modifikation der Verdampfungs- und Blasendurchmesserberechnung zu testen, werden die THTL-Testfälle für 5,3, 7,4, 12,15 und 14,9 MW/m² mit der entsprechenden ATHLET-Entwicklungsversion wiederholt. Für die THTL-Versuchsbedingungen wird das Einsetzen signifikanter Dampfvolumenbildung α_{OSV} auf 10 % statt 5 % gesetzt. In Abb. 3.5 bis Abb. 3.8 ist verdeutlicht, dass die neue Implementierung eine bessere Vorhersage für das Einsetzen der Strömungsinstabilität bei hoher Leistung liefert als die aktuelle Release-Version 3.2 (diese bereits mit Fehlerkorrektur im Direktkondensationsmodell). Weitere Analysen haben ergeben, dass sich ohne die Änderung des Verdampfungsmodells eine nur minimale Verbesserung der OFI-Vorhersage ergibt. Das Wandwärmestrompartitionierungsmodell führt somit zu der signifikanten Verbesserung der Vorhersage des Einsetzens der Strömungsinstabilität für das THTL-Experiment.

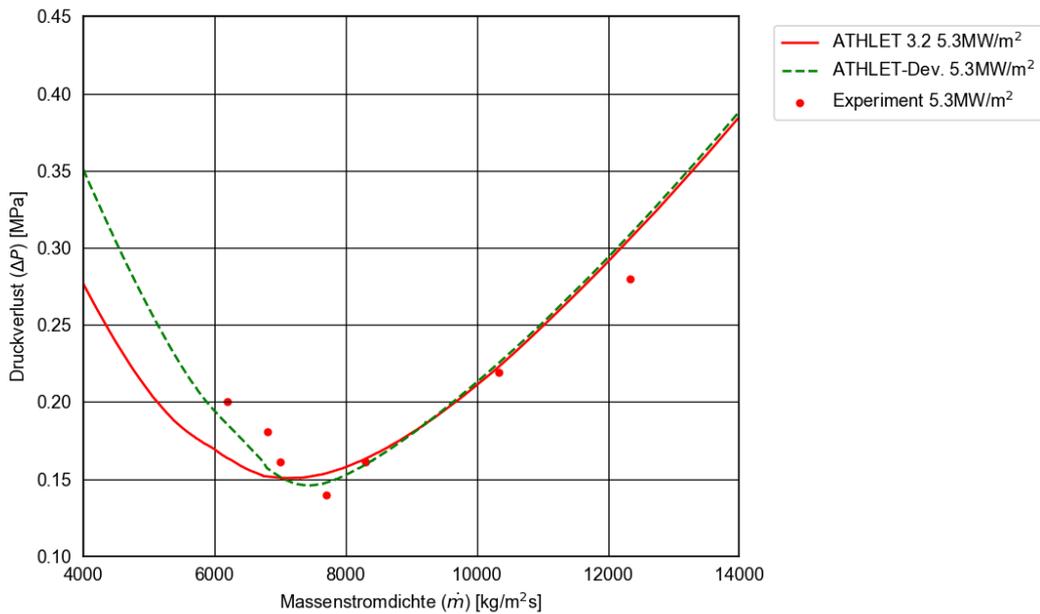


Abb. 3.5 Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment mit 5,3 MW/m²

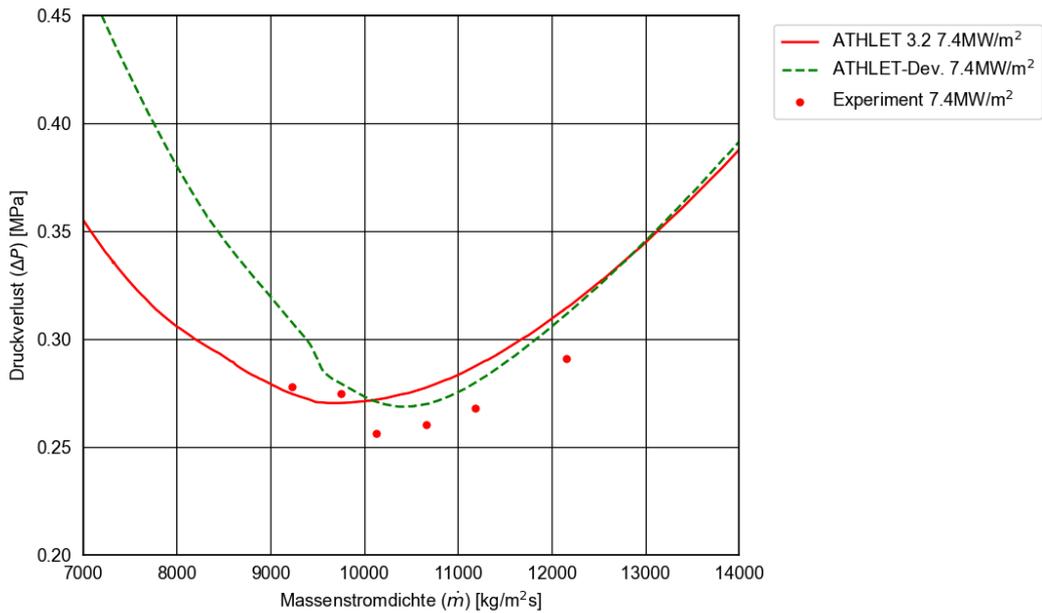


Abb. 3.6 Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von 7,4 MW/m².

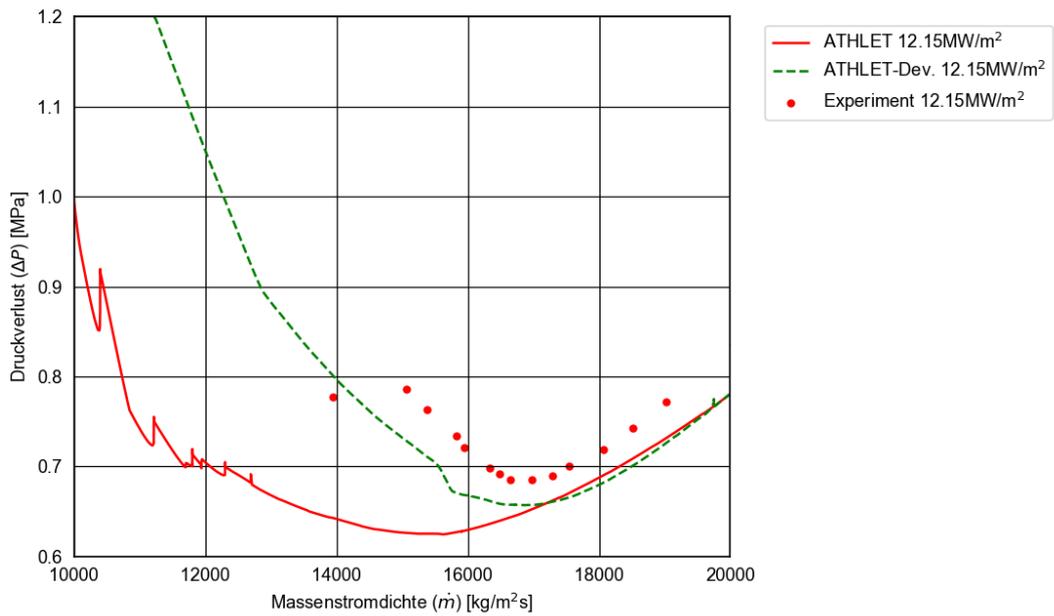


Abb. 3.7 Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 (mit Fehlerkorrektur im direkten Kondensationsmodell) und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von 12,15 MW/m².

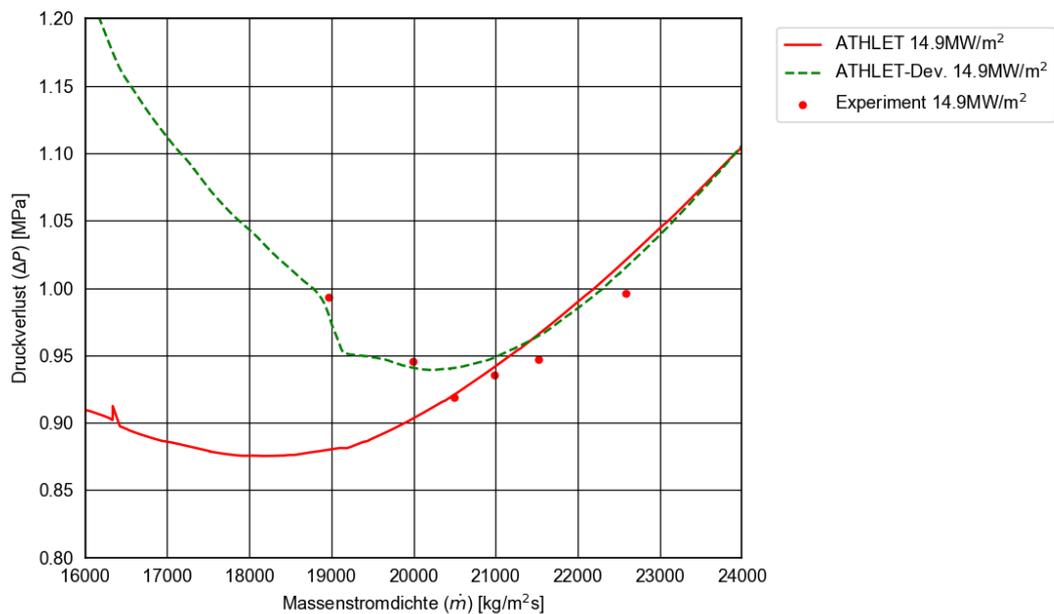


Abb. 3.8 Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 (mit Fehlerkorrektur im direkten Kondensationsmodell) und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von 14,9 MW/m².

Tab. 3.2 zeigt abschließend den relativen Fehler der Simulationen der vier THTL-Testfälle. Im Vergleich zu Tab. 3.1 ist zu erkennen, dass der relative Fehler durch die Modifikation der Wandwärmestromaufteilung und der Blasendurchmesserberechnung signifikant reduziert wird.

Tab. 3.2 Relativer Fehler zwischen Experiment und Simulation bei OFI nach Programmmodifikation /WON 21/

Wärmestromdichte [MW/m ²]	5,3	7,4	12,15	14,9
Druckverlust [MPa]	0,7 %	6,0 %	-3,1 %	2,9 %
Massenstromdichte [kg/m ² s]	-1,1 %	3,5 %	2,1 %	4,4 %
Austrittstemperatur [°C]	6,9 %	4,3 %	5,8 %	3,2 %

Die dargestellten Modellverbesserungen sind bisher nur in einem Entwicklungszweig von ATHLET implementiert. Weitere Entwicklung und Validierung ist zukünftig erforderlich, um ATHLET für die Simulation von Strömungsinstabilitäten in engen Kühlkanälen zu verbessern. Diese Arbeiten sind im Rahmen des Nachfolgevorhabens geplant.

3.2 Kritische Heizflächenbelastung

Bei der Berechnung des kritischen Wärmestroms für Forschungsreaktoren gibt es in der aktuellen Version von ATHLET zwei Limitierungen: Erstens werden Forschungsreaktoren bei niedrigem Druck betrieben, wobei die experimentelle Datenbasis für derartige Bedingungen unvollständig ist, zweitens verhindert die Geometrie enger rechteckiger Kanäle, dass die derzeit implementierten Korrelationen eine gute Schätzung des CHF-Wertes liefern. Da CHF ein wichtiger Sicherheitsparameter ist, sollte die ATHLET-Vorhersage des CHF-Wertes zumindest konservativ sein. In ATHLET 3.2 /AUS 19/ wurde die Mirshak-Korrelation /MIR 59/ als die empfohlene Option für Forschungsreaktoren oder andere Niederdruckanwendungen vorgeschlagen. Allerdings ist die experimentelle Basis für die Mirshak-Korrelation recht begrenzt und ihre Leistungsfähigkeit ist im Vergleich zum COSMOS-L-Experiment nicht zufriedenstellend, was zu einer deutlichen Überschätzung der CHF bei niedrigen Durchflussbedingungen führt. Eine ähnliche Überschätzung der CHF wurde auch mit der Groeneveld CHF Lookup-Tabelle /GRO 07/, /BAL 16/ beobachtet, aufgrund der begrenzten Datenbasis für niedrigen Druck, wie vom Autor in der ursprünglichen Veröffentlichung erwähnt. Vor diesem Hintergrund wurde für die Weiterentwicklung von ATHLET die Sudo-Kaminaga-Korrelation /SUD 93/ aufgrund ihrer relativ großen Validierungsbasis für enge rechteckige Kühlkanäle und der expliziten Unterscheidung von drei verschiedenen Strömungsregimen ausgewählt und implementiert. Der Unterkühlungseffekt wird ebenfalls explizit in der Korrelation berücksichtigt, wie im folgenden Abschnitt für den einfachen Test mit dem COSMOS-L-Experiment gezeigt wird. Die Sudo-Kaminaga-Korrelation unterteilt sich in drei Strömungsregime, wobei jedes Strömungsregime eine eigene Korrelation verwendet, die auf Basis des Experiments mit einem engen, rechteckigen Kanal abgeleitet wurde (Abb. 3.9). Auch die Ein- und Auslassunterkühlung wird berücksichtigt und die Strömungsumkehr kann mit entsprechender Berücksichtigung des Wechsels von Ein- und Auslass grundsätzlich simuliert werden. Alle Eigenschaften der Sudo-Kaminaga-Korrelation /SUD 93/, einschließlich ihrer jüngsten Aktualisierung im Jahr 1998 /KAM 98/, sind in der neuesten Entwicklungsversion von ATHLET implementiert. Für Details der Implementierung wird auf /WON 20b/ verwiesen.

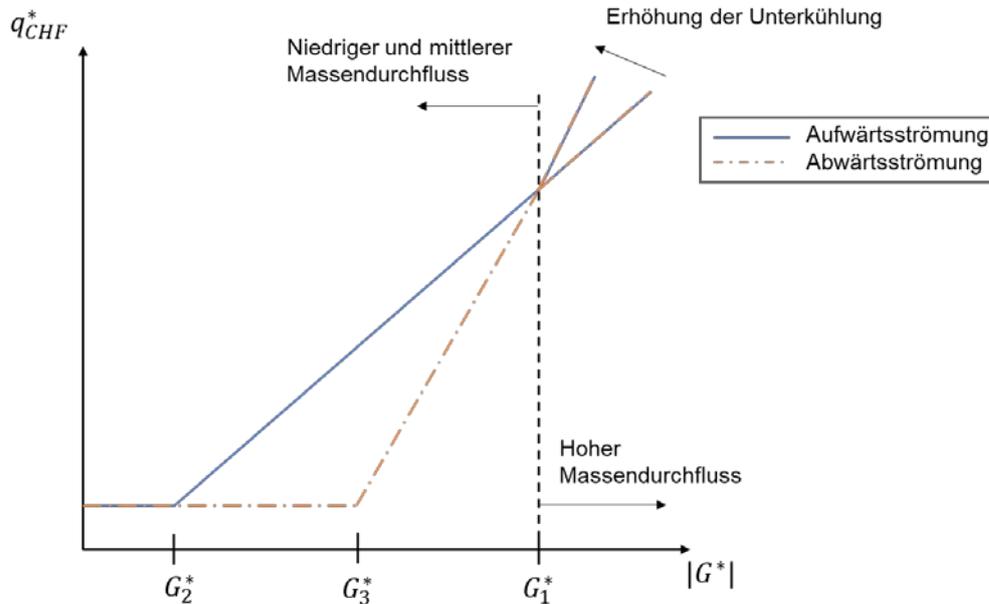


Abb. 3.9 Berechnungsschema für die Sudo-Kaminaga-Korrelation /SUD 93/.

Die vollständige Formulierung der Sudo-Kaminaga-Korrelation lautet:

$$q_{CHF,Aufwärt}^* = \begin{cases} 0.005G^{*0.611} \left[1 + \frac{5000 c_{p,l}(T_{sat,aus}-T_{aus})}{|G^*| h_v-h_l} \right] & \text{für } G^* > G_2^* \\ 0.7 \frac{A}{A_H} \sqrt{\frac{W_H}{\sigma^*}} \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{\rho_l}{\rho_v} \right)^{0.25} \right]^{2.0}} \left[1 + 3 \frac{c_{p,l}(T_{sat,ein}-T_{ein})}{h_v-h_l} \right] & \text{für } G^* < G_2^* \end{cases} \quad (3.15)$$

$$q_{CHF,Abwärt}^* = \begin{cases} 0.005G^{*0.611} \left[1 + \frac{5000 c_{p,l}(T_{sat,aus}-T_{aus})}{|G^*| h_v-h_l} \right] & \text{für } G^* > G_1^* \\ \frac{A}{A_H} G^* \left[\frac{c_{p,l}(T_{sat,ein}-T_{ein})}{h_v-h_l} \right] & \text{für } G_3^* < G^* < G_1^* \\ 0.7 \frac{A}{A_H} \frac{\sqrt{\frac{W_H}{\sigma^*}}}{\left[1 + \left(\frac{\rho_l}{\rho_v} \right)^{0.25} \right]^{2.0}} \left[1 + 3 \frac{c_{p,l}(T_{sat,ein}-T_{ein})}{h_v-h_l} \right] & \text{für } G^* < G_3^* \end{cases} \quad (3.16)$$

Hierin sind q_{CHF}^* und G^* der dimensionslose Massestrom und der dimensionslose Wärmestrom (für die Berechnung von q_{CHF}^* und G^* siehe /WON 20b/); A und A_H sind Durchfluss- und beheizte Fläche; W_H ist die Breite des schmalen Rechteckkanals oder der hydraulischer Durchmesser für einen Ringkanal (die ursprüngliche Korrelation wurde nur

für einen schmalen rechteckigen Kanal abgeleitet). $h_v - h_l$ ist Verdampfungsenthalpie; T_{ein} und $T_{sat,ein}$ sind Eintrittstemperatur und Eintrittssättigungstemperatur; T_{aus} und $T_{sat,aus}$ sind Austrittstemperatur und Austrittssättigungstemperatur; $c_{p,l}$ ist die spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit. G_1^* , G_2^* und G_3^* sind die Grenzwerte für den Übergang zwischen den verschiedenen Korrelationen, wie beschrieben in Abb. 3.9. Sie werden wie folgt berechnet:

$$G_x^* = \begin{cases} 0.005 \frac{A_H}{A} \left[\frac{c_{p,l}(T_{sat,ein} - T_{ein})}{h_v - h_l} \right]^{\frac{1}{0.389}} & \text{für } x = 1 \\ 140 \frac{A}{A_H} \frac{\sqrt{\frac{W_H}{\sigma^*}}}{\left[1 + \left(\frac{\rho_l}{\rho_v}\right)^{0.25}\right]^{2.0}} \left[1 + 3 \frac{c_{p,l}(T_{sat,ein} - T_{ein})}{h_v - h_l} \right]^{\frac{1}{0.611}} & \text{für } x = 2 \\ 0.7 \frac{A}{A_H} \frac{\sqrt{\frac{W_H}{\sigma^*}}}{\left[1 + \left(\frac{\rho_l}{\rho_v}\right)^{0.25}\right]^{2.0}} \left[\frac{1 + 3 \frac{c_{p,l}(T_{sat,ein} - T_{ein})}{h_v - h_l}}{\frac{c_{p,l}(T_{sat,ein} - T_{ein})}{h_v - h_l}} \right] & \text{für } x = 3 \end{cases} \quad (3.17)$$

σ^* ist die kritische Wellenlänge,

$$\sigma^* = \sqrt{\frac{\sigma}{(\rho_l - \rho_v)g}} \quad (3.18)$$

3.2.1 Implementierung der Sudo-Kaminaga-Korrelation

In ATHLET stehen dem Anwender zwei Versionen der Sudo-Kaminaga-Korrelation zur Verfügung, die lokale und die integrale Version. Der Unterschied liegt in der Berechnung der Flüssigkeitsunterkühlung.

- Für die lokale Sudo-Kaminaga-Korrelation (Eingabeparameter ICHF=11) werden die lokalen Parameter in dem gerade betrachteten CV genutzt und die Einlass- und Auslassunterkühlung werden als Unter­kühlung vor/nach dem CV berechnet.
- Bei der integralen Korrelation (ICHF=12) werden die Einlass- und Auslass-Unter­kühlung berücksichtigt, indem die Werte des Einlass-CV- bzw. Auslass-CV der des mit dem Kern-HCO verbundenen TFO genutzt werden. Die Lage des Einlass- und Auslass-CV hängt von der Strömungsrichtung im Kühlkanal ab, so dass eine Änderung

der CHF-Charakteristik bei Strömungsumkehr mit der integralen Beschreibung der Sudo-Kaminaga-Korrelation stärker berücksichtigt wird.

Die integrale Version der Sudo-Kaminaga-Korrelation entspricht der Formulierung in der Literatur, bietet jedoch für die Programmanwendung die Gefahr von Unstetigkeiten beim Wechsel der Strömungsrichtung. Dies kann mit der lokalen Variante vermieden werden, die aufgrund geringerer Einlassunterkühlung von der Tendenz her konservative Ergebnisse liefern sollte. Die Verwendung der Sudo-Kaminaga-Korrelation kann im Eingabedatensatz über die Karte `CHFREWET` aktiviert werden.

3.2.2 Testanwendung auf COSMOS-L Anlage

Das Experiment *Critical-heat-flux On Smooth and Modified Surfaces – Low pressure loop* (COSMOS-L) ist ein CHF-Experiment, das im Jahr 2012 am KIT durchgeführt wurde /HAA 12/. Es ist ein Experiment mit Ringraumgeometrie und die Anlage wird bei niedrigem Druck (ca. 1 bar) betrieben (Abb. 3.10). Obwohl der Kühlkanal die Form eines Annulus besitzt, ist das Experiment ein geeigneter Kandidat, um die Leistungsfähigkeit der in ATHLET neu implementierten Korrelation nach Sudo-Kaminaga (integrale Version) zu testen.

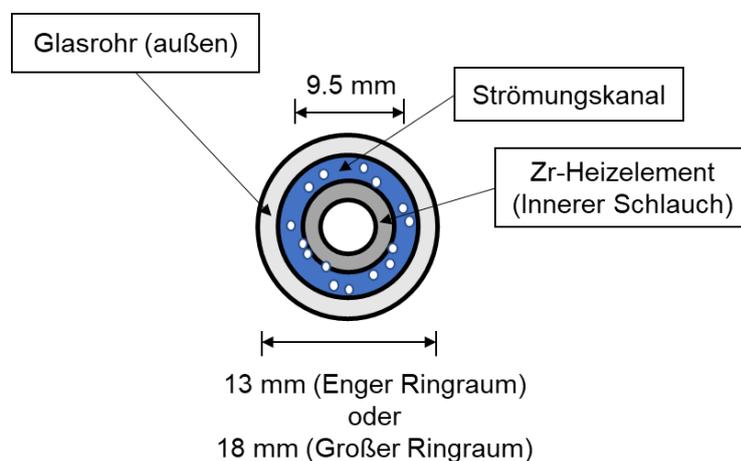


Abb. 3.10 Querschnitt des COSMOS-L-Experiment (beheizter Abschnitt).

Für die Validierung wurden nur die Ergebnisse für das nichtisolierte Rohr verwendet. Der gerade Kanal besteht aus drei Abschnitten, der Anfangs- und Endabschnitt sind mit einem Kupferblock mit einer Dicke von 7,5 mm verbunden, während der mittlere Heizabschnitt sowohl mit einem Zircaloy-Heizrohr mit einer Dicke von 0,57 mm als auch mit

einem nicht beheizten Glasrohr mit einer Dicke von 1,7 mm bestückt ist. Die Heizung wird mit konstanter axialer Leistungsverteilung betrieben.

Abb. 3.11 zeigt das ATHLET-Inputmodell für die COSMOS-L-Anlage. Der violette Abschnitt ist der Strömungskanal. Die grauen Abschnitte am Anfang und am Ende sind die HCOs, die die Kupferblöcke darstellen. Die grauen Abschnitte in der Mitte auf der linken Seite stellen das Zr-Heizelement dar, während der Abschnitt auf der linken Seite das Glasrohr ist, das die Außenfläche des Testabschnitts abdeckt. Der rote Abschnitt stellt die zeitabhängige Druck-Enthalpie-Randbedingung dar.

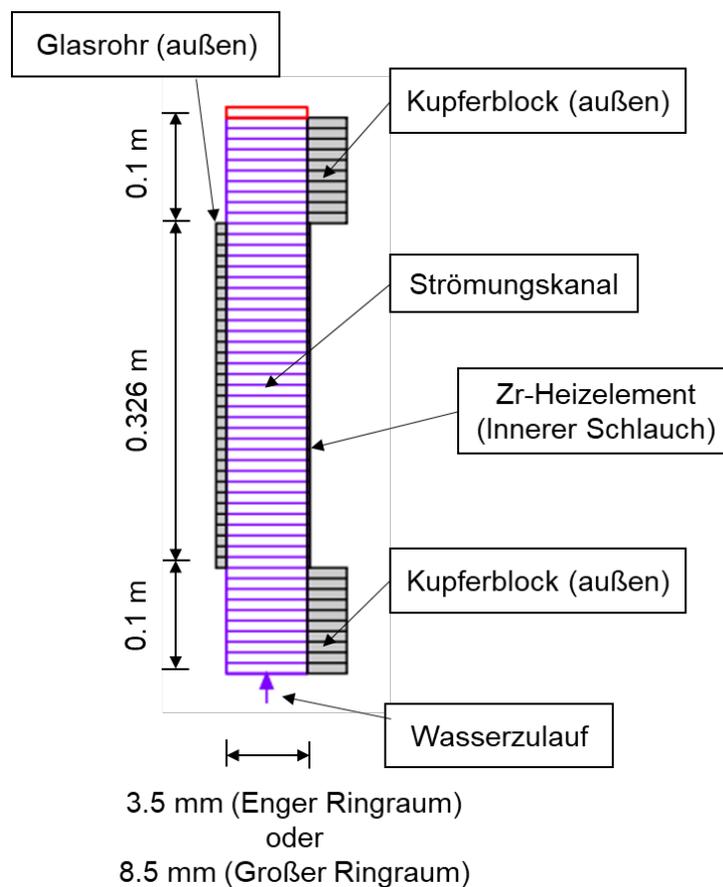


Abb. 3.11 ATHLET Input Modell für COSMOS-L-Experiment

Die nachfolgend dargestellten ATHLET-Testergebnisse wurden mit der Eingabeoption $IGAM=1$ erzielt (d. h. detaillierte Modellierung der Verdampfungs- und Kondensationsprozesse auch bei niedrigem Druck. Hinweis: Auch für $IGAM=1$ findet aus Stabilitätsgründen für sehr niedrige Drücke unter 2 bar eine (im Vergleich zu $IGAM=0$ weniger starke) Reduktion der Kondensationsrate statt. Diese wurde für die hier dargestellten Rechnungen beibehalten.). Die Sudo-Kaminaga-Korrelation sagt voraus, dass der CHF bei kleinerer Ringraumweite (hydraulischer Durchmesser) mit der Eintrittstemperatur

zunimmt, während der CHF bei größerer Ringraumweite mit der Eintrittstemperatur abnimmt. Für größere Ringräume stimmt das Ergebnis mit dem von Haas berichteten, experimentellen Trend überein, aber Haas berichtete, dass der Trend für kleinere Ringräume nicht linear ist, liefert jedoch keine weitere Erklärung für dieses Verhalten im Experiment. Mit der Sudo-Kaminaga-Korrelation /SUD 93/, /KAM 98/ ist ATHLET in der Lage, den Unterkühlungseffekt für niedrige Massenströme und Niederdruckbedingungen zu berücksichtigen, was mit anderen Korrelationen wie der Mirshak-Korrelation /MIR 59/ oder der Groeneveld-LUT /GRO 07/ nicht möglich ist. Das Ergebnis mit der Sudo-Kaminaga-Korrelation für den CHF zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis der COSMOS-L-Anlage, auch wenn die Sudo-Kaminaga-Korrelation ursprünglich auf Basis eines schmalen rechteckigen Kanals abgeleitet wurde. Wie Tab. 3.3 zeigt, sind die Abweichungen vertretbar und eher konservativ in Richtung einer Unterschätzung des CHF. Die maximal relative Überschätzung des CHF liegt bei +11 %.

Tab. 3.3 CHF-Ergebnis für Tests mit niedrigem Massenstrom und niedrigem Druck im COSMOS-L-Experiment (SA = Small Annulus; LA = Large Annulus).

Test No.	Druck [kPa]	Massenstromdichte [kg/m ² s]	Austrittstemperatur [°C]	CHF _{Exp} [MW/m ²]	CHF _{SK} [MW/m ²]	Fehler [%]
1 _{SA}	115	250	45	0,66	0,57	-14 %
2 _{SA}	115	250	65	0,84	0,62	-26 %
3 _{SA}	115	250	80	0,67	0,70	-4 %
1 _{LA}	120	250	45	1,13	1,24	+9 %
2 _{LA}	120	250	65	0,97	0,94	-4 %
3 _{LA}	120	250	80	0,82	0,56	-31 %
4 _{LA}	120	400	80	0,867	0,969	+11 %
5 _{LA}	200	600	80	1,695	1,65	-3 %
6 _{LA}	200	400	80	1,229	1,31	+6 %
7 _{LA}	200	400	65	1,619	1,63	+0,7 %

4 **Erweiterte Strömungsbildkarten und Schließungs- gleichungen**

Zweiphasige Strömungsregime wie Blasenströmung, Schwallströmung oder Ringströmung unterscheiden sich erheblich in ihren thermohydraulischen Eigenschaften. In ATHLET kommen daher für verschiedene Geometrien (horizontal, vertikal) unterschiedliche Strömungsbildkarten und Übergangskriterien zum Einsatz, auf Basis derer das lokal vorliegende Strömungsbild detektiert und geeignete Schließungsgleichungen ausgewählt werden. Insbesondere für die Schließungsgleichungen der Impulsgleichung, hier Wandreibung und Zwischenphasenreibung, spielen die Strömungsbildkarten eine erhebliche Rolle. Ziel der durchgeführten Arbeiten war nun, die vorhandenen Strömungsbildkarten für die Wand- und Zwischenphasenreibung zu verbessern, indem Übergangskriterien geeignet modifiziert und phasenspezifische Schließungsgleichungen für neue Strömungsbilder implementiert wurden. Die Arbeiten konzentrierten sich auf das Strömungsbild Ringströmung in vertikaler Geometrie sowie den Bereich von stratifizierter über Schwall- bis hin zu Ringtropfenströmung in horizontaler Geometrie und sind nachfolgend dargestellt.

4.1 **Ringströmung in vertikaler Geometrie**

Die Ergebnisse der Validierungsrechnungen mit Ring-Tropfen-Strömungen /SKO 16/, /SCH 18/ haben gezeigt, dass die vereinfachte Modellierung der Ringströmung als Extrapolation des „full range flooding based drift“ Modells nicht ausreichend ist. Demzufolge wurde das Zwei-Fluid-Modell weiterentwickelt, so dass das Strömungsbild der Ringströmung explizit berücksichtigt wird. Diese Erweiterung konzentriert sich auf die Modifizierung der Schließungsgleichungen der Impulsbilanzen. Die Schließungsgleichungen der Massen- und Energiebilanzen bleiben weitgehend unberührt.

Wandreibung

Die Wandreibung wird in ATHLET als Gesamtreibung der beiden Phasen mit Hilfe des Zweiphasen-Multiplikators berechnet:

$$\left(\frac{dP}{dx}\right)_{2\phi} = \Phi_{lo}^2 \left(\frac{dP}{dx}\right)_{lo} = -\Phi_{lo}^2 \frac{\lambda_l G_{tot} |G_{tot}|}{2A^2 D_h \rho_l}$$

Hierin sind λ_l die Rohrreibungszahl (Darcy-Weisbach Friction Factor), D_h der hydraulische Durchmesser, A die Strömungsquerschnittsfläche, ρ_l die Dichte der flüssigen Phasen und G_{tot} der Gesamtmassenstrom. Für den Zweiphasenmultiplikator Φ_{lo}^2 stehen verschiedene Korrelationen zur Auswahl, z. B. nach Martinelli-Nelson /MAR 48/ oder Chisholm /CHI 73/.

Die für das Zwei-Fluid-Modell notwendige Verteilung der Wandreibung auf die beiden Phasen erfolgt entsprechend den volumetrischen Phasengehalten. Der Druckverlust für die Dampf-/Gasphase ist

$$\Delta p_{F,V} = -\Phi_{lo}^2 \frac{L \lambda_l G_{tot} |G_{tot}| \rho_m}{2A^2 D_h \rho_l} \alpha$$

und für die Flüssigkeitsphase

$$\Delta p_{F,L} = -\Phi_{lo}^2 \frac{L \lambda_l G_{tot} |G_{tot}| \rho_m}{2A^2 D_h \rho_l} (1 - \alpha)$$

mit L gleich der Leitungslänge. Diese Verteilung der Wandreibung auf die beiden Phasen ist eine gute Approximation /LEE 17/ für beinahe alle Strömungsbilder mit Ausnahme der Ringströmung, bei der die Wandreibung tatsächlich nur auf eine Phase wirkt. Daher wird in dem neuentwickelten Modell für den Bereich der Ringströmung die gesamte Wandreibung dem Wasserfilm zugeordnet. Für die Aufteilung der Wandreibung zwischen den Phasen wird analog zu dem Ansatz im 3-Felder-Modell (siehe Kapitel 2.2.5) ein Verteilungsparameter E_{na} definiert. Die Wandreibung wird den beiden Phasen folgendermaßen zugeordnet. Für die Dampfphase ist

$$\Delta p'_{F,V} = \Delta p_{F,V} \cdot E_{na}$$

und für die Wasserphase

$$\Delta p'_{F,L} = \Delta p_{F,L} + \Delta p_{F,V} \cdot (1 - E_{na})$$

Zwischenphasenreibung

Im 2-Fluid-Modell in ATHLET wird die Zwischenphasenreibung mit Ausnahme des Bereichs der Tropfenströmung ausschließlich aus dem „full range flooding based drift“ Modell abgeleitet. Da sich die Extrapolation der Zwischenphasenreibung für den Bereich der Ringströmung als nicht ausreichend erwiesen hat, wurde eine spezielle Korrelation für die Ringströmung implementiert. Dies ist die modifizierte Wallis-Korrelation nach /LIL 88/, die bereits in Kapitel 2.2.4 beschrieben ist und analog für Ringströmung im 3-Felder-Modell genutzt wird.

Das Strömungsbild Ringströmung wird für den Bereich hoher Dampfvolumenanteile angenommen. Der Übergang von dem *full range drift flux* basierten Modell wird als Funktion des Ringströmungsanteils E_{an} dargestellt, wie in Kapitel 2.2.4 definiert. Die Zwischenphasenreibung berechnet sich zu

$$C_{i,non-disp} = C_{i,flood}(1 - E_{an}) + C_{i,ann}E_{an}$$

wobei $C_{i,flood}$ der Zwischenphasenreibungskoeffizient auf Basis des *full range drift flux* Modells und $C_{i,non-disp}$ der Zwischenphasenreibungskoeffizient für den nicht-dispersen Strömungsanteil. Die vollständige Zwischenphasenreibung der Wasserphase wird als Superposition von Tropfen- und nicht-dispersen (filmähnlichen) Anteil berechnet:

$$C_i = C_{i,non-disp}(1 - E_D) + C_{i,disp}E_D$$

mit $C_{i,disp}$ dem Zwischenphasenreibungskoeffizienten für dispergierte Strömung.

Für die Validierung des neuen Ringströmungsmodells wurden zwei Experimente ausgewählt:

- Experiment aus der LOTUS (Long Tube System) Anlage in Harwell /HEW 87/ und
- Experiment durchgeführt am Riso National Laboratory, Dänemark /WÜR 78/

Die Ergebnisse der Validierung zeigten eine deutliche Verbesserung der Simulationsergebnisse, vor allem im Fall des LOTUS-Experiments. Sowohl der gesamte Druckverlust als auch der Entrainmentanteil sind mit dem Ringströmungsmodell in besserem Einklang mit den Messdaten. Im Fall des Riso-Experiments sind die Unterschiede zwischen Simulation mit und ohne Ringströmungsmodell gering. Da das Riso-Experiment bei hohem

Druck durchgeführt wurde, erscheint eine weitere Modifikation des Modells für hohe Drücke für die Zukunft notwendig. Eine detaillierte Darstellung des Ringströmungsmodells und dessen Validierung findet sich in der Technischen Notiz /SKO 20c/.

4.2 Strömung in horizontalen Rohren

Die Analyse horizontaler Strömungen in der Thermohydraulik des Reaktors wird aufgrund passiver Sicherheitssysteme immer wichtiger. Daher ist es notwendig, die Modellierung in Bezug auf horizontale Strömungen in ATHLET kontinuierlich zu verbessern und für einen erweiterten Bereich an Betriebsbedingungen zu validieren. Vor diesem Hintergrund wurden die Entrainment- und Widerstandskraftmodelle für horizontale Strömungen in ATHLET modifiziert und verbessert /LEE 20a/. Anlass gab die Nachrechnung des Mantilla-Experiments /MAN 08/, das unterschiedliche Strömungsbilder insbesondere mit Blick auf das Entrainment mit 2-Zoll- und 6-Zoll-Horizontalrohren untersucht. Die Nachrechnung erfolgte im Rahmen eines von der FONESYS-Gruppe der Systemcodeentwickler initiierten Benchmarks, der Schwächen der bisherigen Modellierung offenbarte, und nun als erste Validierung der neuen Modifikationen diente /LEE 20b/. Da der Benchmark noch nicht vollständig abgeschlossen ist, sind die hier dargestellten Ergebnisse und Modellierungen vorläufiger Natur und werden derzeit (und ggf. im Rahmen des Nachfolgevorhabens) weiter verbessert.

4.2.1 Entrainmentmodellierung

Die Vorhersage des Wassermithnahmeanteils ist entscheidend, da dieser stark mit der Zwischenphasenreibung und der Wärmeübertragung zusammenhängt. Die aktuellen Modelle in ATHLET für den Entrainmentbeginn und die Entrainmentrate weisen die folgenden Limitierungen auf. Erstens berücksichtigt das Kriterium für den Entrainmentbeginn nicht den Effekt der Flüssigkeitsviskosität und der Oberflächenspannung. Zweitens hängt die Korrelation für die Entrainmentrate ausschließlich von Gasströmungsbedingungen ab, während sie tatsächlich auch durch die Flüssigkeitsströmungsbedingungen, bspw. die Wassergeschwindigkeit, beeinflusst werden kann, wie in der Literatur mehrfach vorgeschlagen /DAL 78/, /LAU 82/, /WIL 90/, /MAN 08/.

Um die Mitnahmemodelle in ATHLET zu verbessern, wurden die folgenden Modelle neu implementiert. Für den Entrainmentbeginn wurde das von Ishii und Grolmes /ISH 75/ vorgeschlagene Modell übernommen. Die Autoren hatten das Kriterium basierend auf einem Mechanismus zum Abscheren des Kamms von Störwellen entwickelt. Sie nahmen

an, dass der Entrainmentbeginn stattfindet, wenn die Reibungskraft an der Spitze der Störwellen die Haltekraft der Oberflächenspannung überschreitet. Die Kriterien sind nachfolgende angegeben:

wenn $Re_{SL} \geq 1635$,

$$\frac{\mu_L j_V}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \geq \begin{cases} N_\mu^{0.8} & \text{for } N_\mu \leq \frac{1}{15} \\ 0.1146 & \text{for } N_\mu > \frac{1}{15} \end{cases} \quad (4.1)$$

wenn $160 \leq Re_{SL} < 1635$,

$$\frac{\mu_L j_V}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \geq \begin{cases} 11.78 N_\mu^{0.8} Re_{SL}^{-1/3} & \text{for } N_\mu \leq \frac{1}{15} \\ 1.35 Re_{SL}^{-1/3} & \text{for } N_\mu > \frac{1}{15} \end{cases} \quad (4.2)$$

und wenn $Re_{SL} \leq 160$,

$$\frac{\mu_L j_V}{\sigma} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \geq 1.5 Re_{SL}^{-1/2} \quad (4.3)$$

wobei für die Reynoldszahl auf Basis der Wasserleerrohrgeschwindigkeit (Liquid Superficial Velocity) gilt:

$$Re_{SL} = \frac{\rho_L j_L D_h}{\mu_L}$$

und der dimensionslosen Viskositätszahl

$$N_\mu = \frac{\mu_L}{\left(\rho_L \sigma \sqrt{\frac{\sigma}{g \Delta \rho}}\right)^{1/2}}$$

Andererseits wurde die Al-Sarkhi-Korrelation /ALS 13/ für die Entrainmentrate eingeführt. Sie folgt im Wesentlichen einer S-Form-Funktion des Exponententerms in der

Weber-Zahl (We) der Dampfleerrohrgeschwindigkeit. Die Korrelation nutzt die maximale Entrainmentrate ($f_{e,max}$) als eine Art Skalierungsfaktor, der wiederum eine Funktion von Re_{SL} ist:

$$f_e = f_{e,max} \left(1 - \exp \left(- \frac{We_V}{We_V^*} \right) \right) \quad (4.4)$$

wobei

$$We_V = \frac{\rho_v (j_V - j_{V,cr})^2 D_h (\Delta\rho)^{0.25}}{\sigma}$$

$$f_{e,max} = 1 - \exp \left(- \left(\frac{Re_{SL}}{1400} \right)^{0.6} \right)$$

$$We_V^* = \left(\frac{0.632 f_{e,max}}{2.31 \times 10^{-4} Re_{SL}^{0.27133}} \right)^{1.53}$$

Diese Korrelation wurde ursprünglich anhand einer Gruppe von Horizontalströmungsexperimenten in einem Bereich von

- $695 \leq Re_{SL} \leq 13,884$
- $1 \leq P \leq 70 \text{ bar}$
- Luft-Wasser, N_2 -Wasser, and N_2 -Öl-Experiment.

validiert. Ihre Gültigkeit darüber hinaus muss weitergehend geprüft werden.

4.2.2 Modifizierte Druckverlustmodellierung

Die Widerstandskraftmodelle für horizontale Strömungen wurden modifiziert, um die Vorhersage des Druckabfalls in horizontalen Rohren zu verbessern. Zunächst wurde das Wandreibungmodell modifiziert, um die stratifizierte Strömung explizit als separates Strömungsbild zu berücksichtigen, wie von Taitel und Dukler /TAI 76/ vorgeschlagen. Abb. 4.1 zeigt, dass der hydraulische Durchmesser für jede Phase (Gas und Flüssigkeit) in der stratifizierten Strömung durch den Flüssigkeitsstand erheblich unterschiedlich sein kann.

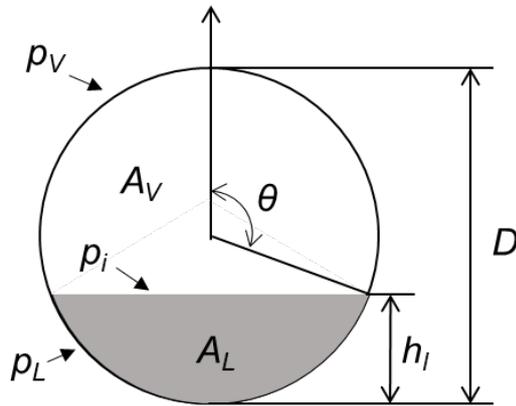


Abb. 4.1 Schematische Darstellung der horizontal stratifizierten Strömung

Die hydraulischen Durchmesser der Gas- und Flüssigphase können wie folgt geschrieben werden:

$$D_{h,V} = \frac{4A_V}{p_V + p_i} \quad (4.5)$$

und

$$D_{h,L} = \frac{4A_L}{p_L}. \quad (4.6)$$

Damit folgt als Wandreibungskraft pro Volumeneinheit für jede Phase:

$$\left(\frac{dP}{dx}\right)_{wall,V} = \frac{\tau_{wV} p_V}{A} = -\frac{2\theta}{\pi D_h} f_V \rho_V w_V |w_V| \quad (4.7)$$

und

$$\left(\frac{dP}{dx}\right)_{wall,L} = \frac{\tau_{wL} p_L}{A} = -\frac{2(\pi - \theta)}{\pi D_h} f_L \rho_L w_L |w_L| \quad (4.8)$$

wobei f der durch die Colebrook-Gleichung berechnete Wandreibungsfaktor ist. Abb. 4.2 zeigt, wie stark sich die Vorhersage der Wandreibung durch das stratifizierte Strömungsmodell ändert. Im bisherigen Strömungsmodell wird die Wandreibung durch

den Dampfvolumenanteil (bzw. den Flüssigkeitsvolumenanteil) linear gewichtet verändert. Andererseits werden aber höhere Druckabfälle in jeder Phase beobachtet, wenn der Rückhalt einer Phase aufgrund des kleineren hydraulischen Durchmessers gering ist. Dies rechtfertigt, warum wir die Wandreibung für die horizontal geschichtete Strömung separat betrachten sollten.

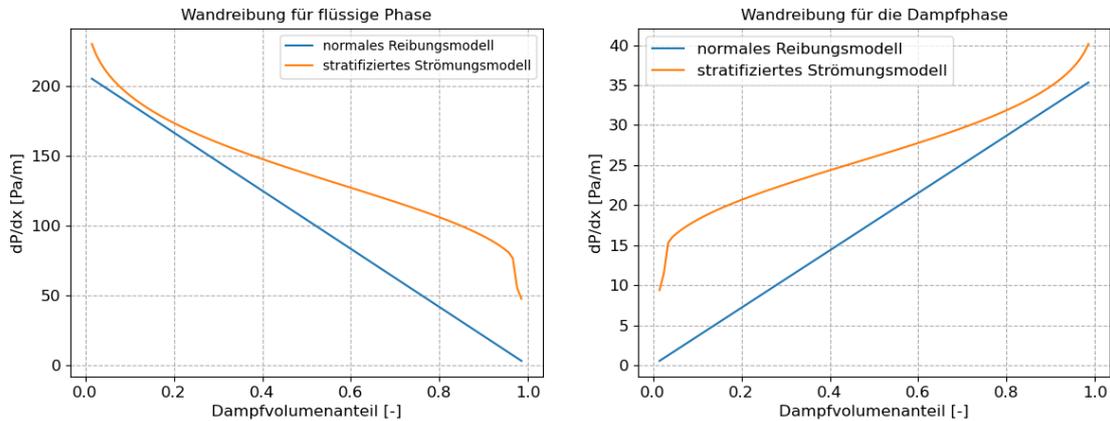


Abb. 4.2 Beispiel für einen Wandreibungsverlust von Flüssigkeit (links) und Dampf (rechts), berechnet durch das bisherige Strömungsmodell und ein stratifiziertes Strömungsmodell

Des Weiteren wurden die Grenzflächenreibungsmodelle für die stratifizierte glatte/wellige Strömung geändert. In ATHLET wurde die stratifizierte Wellenströmung als Übergang zwischen der stratifizierten glatten Strömung und der Schwall- oder Ringströmung behandelt. Zur genauen Modellierung wurde das von Andritsos und Hanratty /AND 87/ vorgeschlagene Modell der stratifizierten, welligen Strömung angewendet. Zusätzlich wurde die Korrelation für den stratifizierten glatten Strömung an die von Taitel und Dukler /TAI 76/ vorgeschlagene angepasst. Somit werden die Grenzflächenreibungskoeffizienten für die geschichtete glatte ($C_{i, strat}$) und die wellige Strömung ($C_{i, wavy}$) zu:

$$C_{i, strat} = \frac{1}{2} \rho_V f_V \frac{4 \sin \theta}{D_h} \quad (4.9)$$

wobei der Reibungsfaktor durch eine Blasius-Korrelation berechnet wird:

$$f_V = \begin{cases} 16 Re_V^{-1} & \text{für laminare Strömung} \\ 0.046 Re_V^{-0.2} & \text{für turbulente Strömung} \end{cases}$$

und

$$C_{i,wavy} = \frac{1}{2} \rho_V f_V \left(1 + 15 \left(\frac{h_l}{D_h} \right)^{0.5} \left(\frac{j_V}{j_{V,wavy}} - 1 \right) \right) \frac{4 \sin \theta}{D_h} \quad (4.10)$$

wobei $j_{V,wavy}$ die kritische Geschwindigkeit für die Wellenströmung ist:

$$j_{V,wavy} [m/s] = 5 \left(\frac{\rho_{air}}{\rho_V} \right)^{0.5}.$$

Zuletzt wurde die Grenzflächenreibungskorrelation für den Ringnebelfluss ($C_{i,ann}$) angepasst. ATHLET hatte zur Vereinfachung des Modells nur den Tropfeneffekt im Ring-Tropfenströmung berücksichtigt. In einem neuen Modell wurde die Wirkung des Flüssigkeitsfilms auch vom Wallis-Modell /WAL 70/ wie folgt berücksichtigt:

$$C_{i,filn} = \frac{1}{2} \rho_V 0.005 [1 + 75(1 - \alpha)] \frac{4}{D_h} \sqrt{\alpha + \alpha_d} \quad (4.11)$$

wobei α_d der Volumenanteil der Tropfen ist. Zusätzlich wurde die Korrelation für die Tropfen wie folgt an das Ishii- und Chawla-Modell /ISH 79/ angepasst:

$$C_{i,drop} = \frac{1}{2} \rho_V \frac{24}{Re_d} [1 + 0.1 Re_d^{0.75}] \frac{3\alpha_d}{2d_d} \quad (4.12)$$

wobei d_d der mittlere Sauter-Tropfendurchmesser und $w_{r,d}$ die Tropfenrelativgeschwindigkeit ist. Letztlich ist der Zwischenphasenreibungskoeffizient des Ring-Tropfenströmung durch eine Überlagerung von zwei Koeffizienten gegeben:

$$C_{i,ann} = C_{i,filn} + C_{i,drop} \frac{w_{r,d}^2}{w_r^2}.$$

4.2.3 Mantilla-Benchmark

Zur Validierung der neuen Implementierungen für horizontale Strömungen wurde das Mantilla-Experiment /MAN 08/ von ATHLET simuliert. Das Experiment wurde 2008 von Mantilla durchgeführt, um insbesondere das Entrainment in der Ringströmung in

horizontalen Rohren zu untersuchen. Die Luft-Wasser-Gemische wurden mit unterschiedlichen Leerrohrgeschwindigkeiten in die Testabschnitte injiziert, die unterschiedliche Durchmesser von 2 Zoll (insgesamt 49 Tests) bzw. 6 Zoll (39 Tests) hatten. Die Druckabfälle und Entrainmentraten wurden in dem Bereich gemessen, in dem die Strömung vollständig entwickelt war. Die Rand- und Anfangsbedingungen des 2-Zoll-Testabschnitts waren $j_V = 2,0 - 80 \text{ m/s}$, $j_L = 0,004 - 0,1 \text{ m/s}$, $\sim 20 \text{ }^\circ\text{C}$ Temperaturen und $\sim 2 \text{ bar}$ Druck. Für den 6-Zoll-Testabschnitt wurden die folgenden Rand- und Anfangsbedingungen verwendet: $j_V = 2,0 - 20 \text{ m/s}$, $j_L = 0,004 - 0,1 \text{ m/s}$, $\sim 20 \text{ }^\circ\text{C}$ Temperaturen und $1 - 2 \text{ bar}$ Druck. Der Re_{SL} Bereich beider Experimente (2 Zoll und 6 Zoll) lag zwischen 150 und 16.260, was dem Validitätsbereich der Al-Sarkhi-Korrelation ähnlich ist. Die Testabschnitte wurden für die ATHLET-Simulation modelliert, wie in Abb. 4.3 und Abb. 4.4 gezeigt.

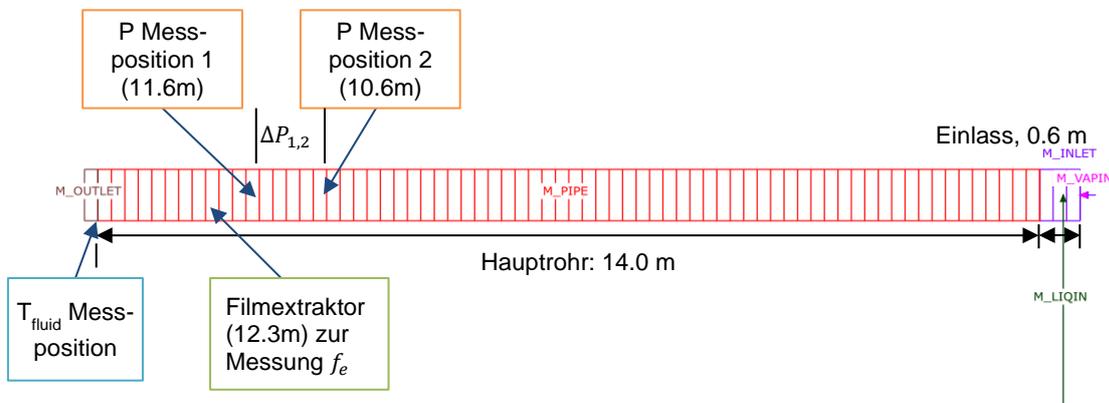


Abb. 4.3 Modellierung der Mantilla 2-Zoll-Testanlage

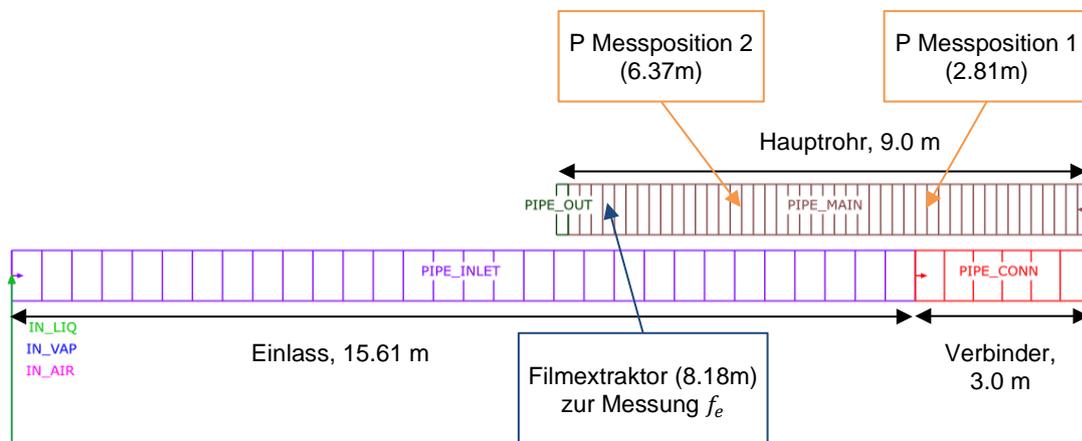


Abb. 4.4 Modellierung der Mantilla 6-Zoll-Testanlage

Die Berechnungsergebnisse für die Entrainmentrate sind in Abb. 4.5 (für zwei unterschiedliche Wasserleerrohrgeschwindigkeiten) und Abb. 4.6 dargestellt. In dem Experiment wurde ein gesättigtes Profil der Entrainmentrate als Zunahme der Dampfleerrohrgeschwindigkeit beobachtet, und die maximale Entrainmentrate wuchs mit Zunahme der Leerrohrgeschwindigkeit der Flüssigkeit. Dieses Verhalten wird durch die in Abbildung Abb. 4.5 gezeigte Al-Sarkhi-Korrelation angemessen erfasst. Infolgedessen wird die Vorhersage von Entrainmentrate durch die Al-Sarkhi-Korrelation signifikant verbessert, während die aktuelle Programmversion ATHLET 3.2 eine starke Überschätzung aufweist, wie in Abb. 4.6 dargestellt. Der absolute Mittelwert der relativen Fehler wurde für die Gesamtheit der 49 Versuchsnachrechnungen (2 Zoll) durch die neue Modellierung von 59 % auf 13 % reduziert.

Abb. 4.7 und Abb. 4.8 zeigen, welche Strömungsregime von ATHLET postuliert wurden, um die Grenzflächenreibung in der Simulation zu berechnen, während die horizontale Strömungskarte von Mandhane /MAN 74/ (für etwa 1 bar gültig) unterlegt ist. Die Strömungsregime in ATHLET 3.2 werden abhängig von der Existenz von Tropfen von einer stratifizierten Strömung in eine Tropfenströmung überführt. Neu erscheint bei den modifizierten Widerstandskraftmodellen das Wellenströmungsregime zwischen der stratifizierten glatten Strömung und dem Übergang zur Ringströmung, und ihre Verteilung stimmt gut mit der Mandhane-Strömungskarte überein. Folglich liefert die Modifikation eine bessere Vorhersage des Strömungsbildes und somit auch der Druckabfälle, wie in Abb. 4.9 und Abb. 4.10 gezeigt ist. Insbesondere werden die Druckabfälle der welligen Strömung durch den modifizierten Code (mod. DF (SW) in den Legenden) signifikant verbessert, während diese in ATHLET 3.2 unterschätzt werden. Der absolute Mittelwert der relativen Fehler ist von 29 % auf 8 % gesunken.

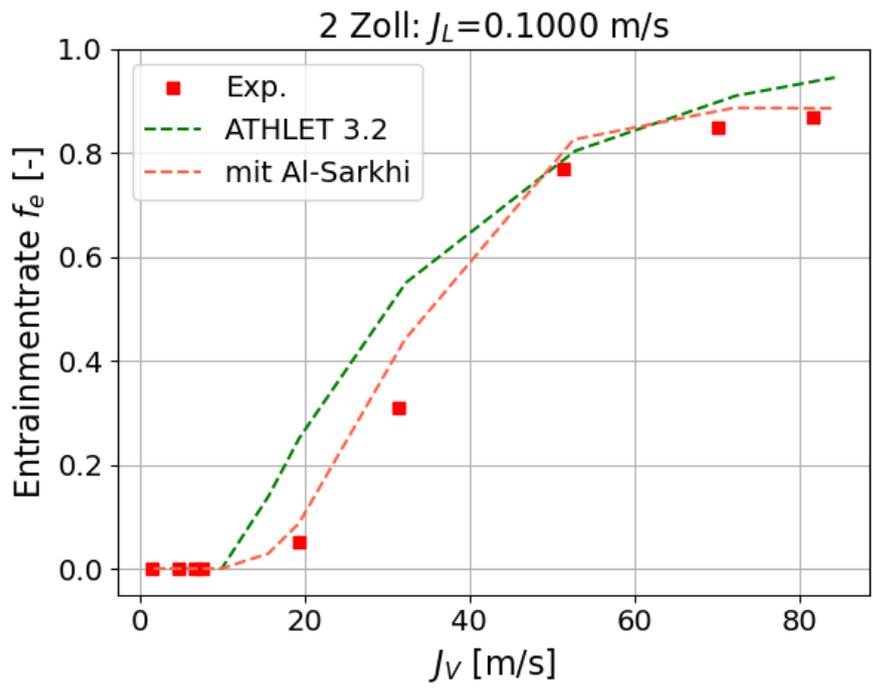
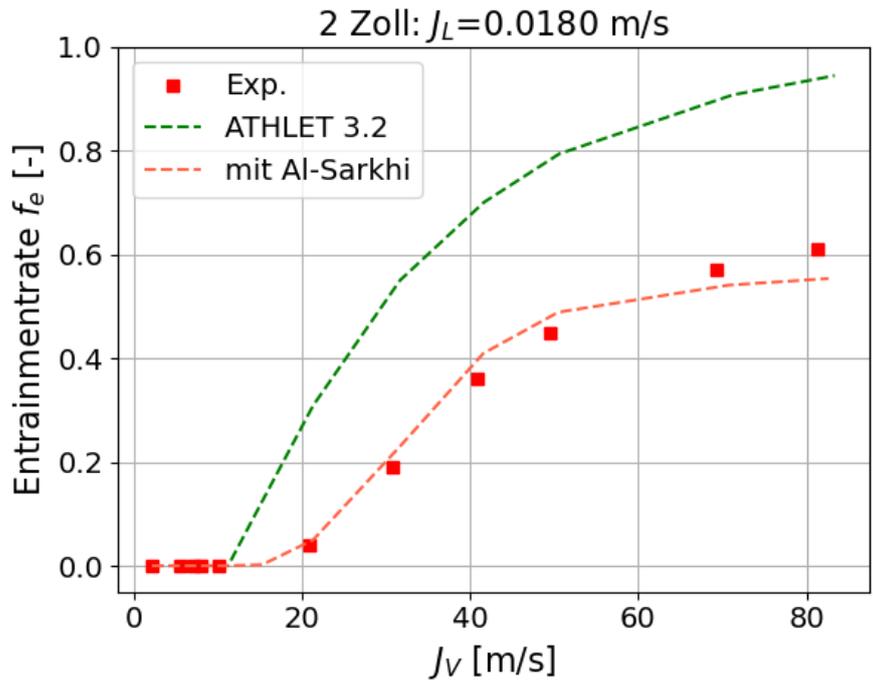


Abb. 4.5 Entrainmentrate bei zwei unterschiedlichen Leerrohrgeschwindigkeiten der Flüssigkeit (2-Zoll-Experiment)

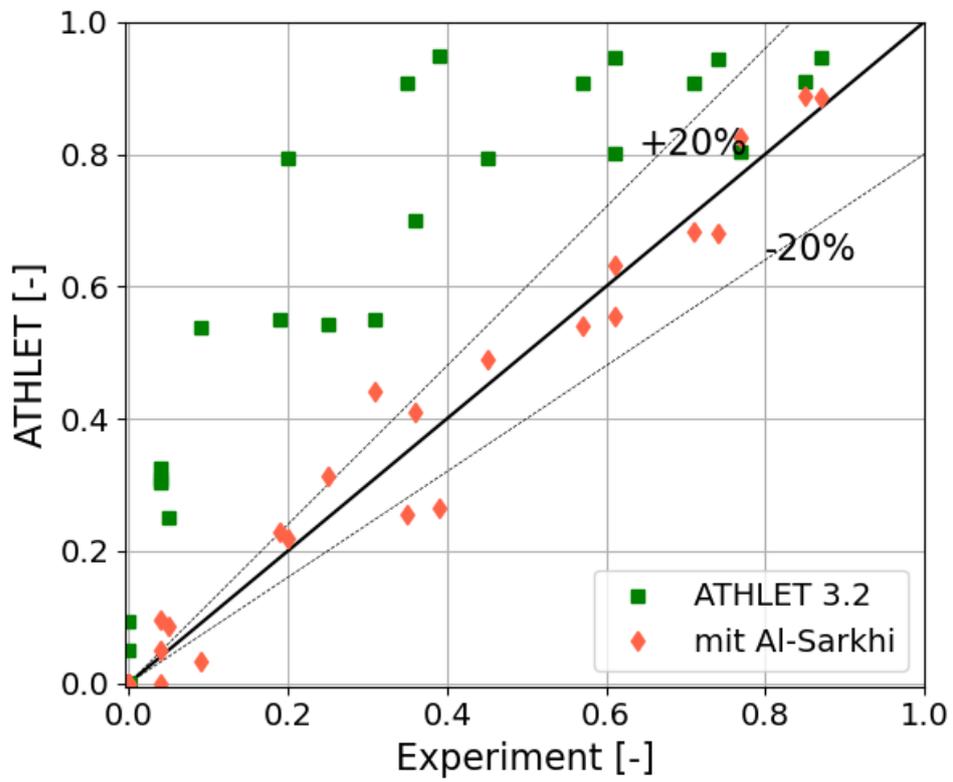


Abb. 4.6 Gemessene und berechnete Entrainmentrate des 2-Zoll-Testabschnitts

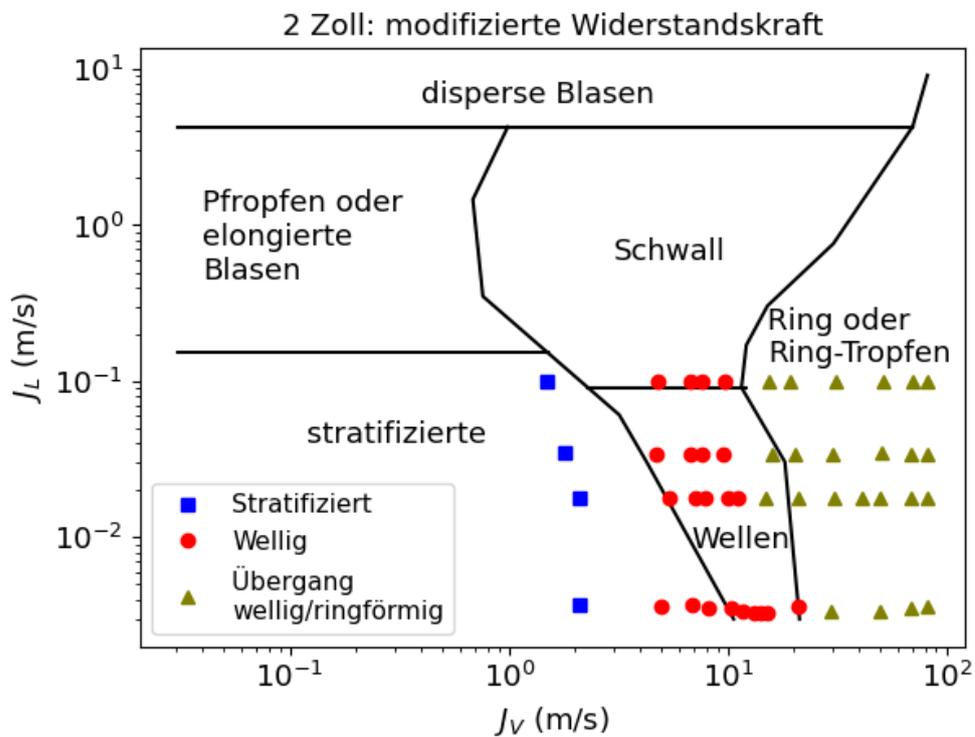
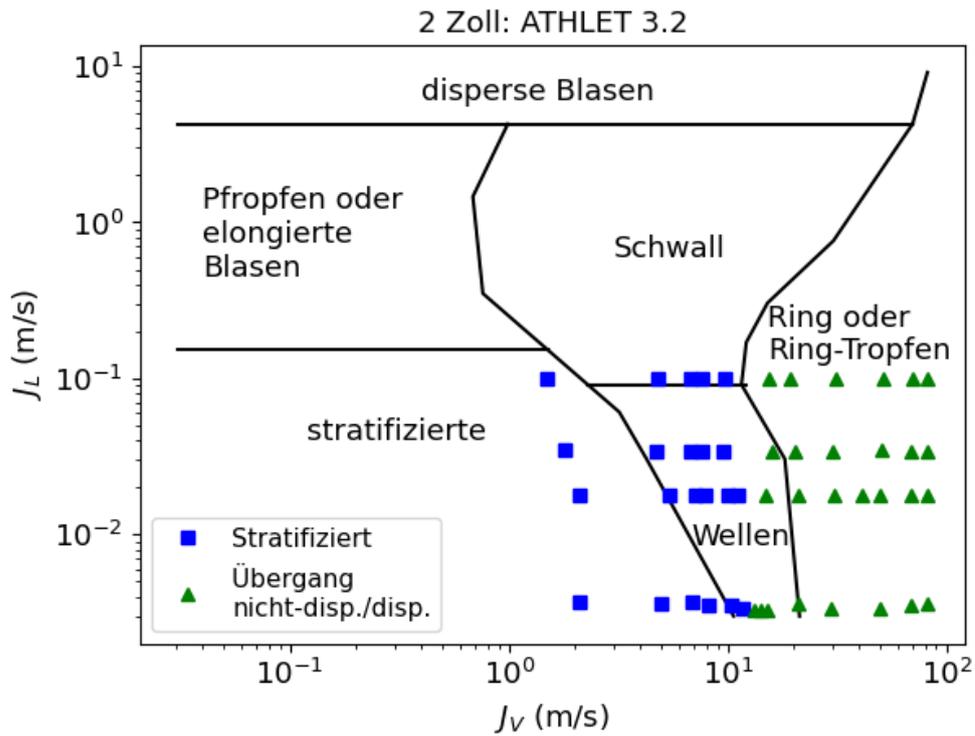


Abb. 4.7 In ATHLET ermittelte Strömungsregime zur Berechnung der Grenzflächenreibung für das Mantilla 2-Zoll-Experiment. Unterlegt ist die Mandhane-Strömungskarte (oben: ATHLET 3.2, unten: modifizierte Modellierung)

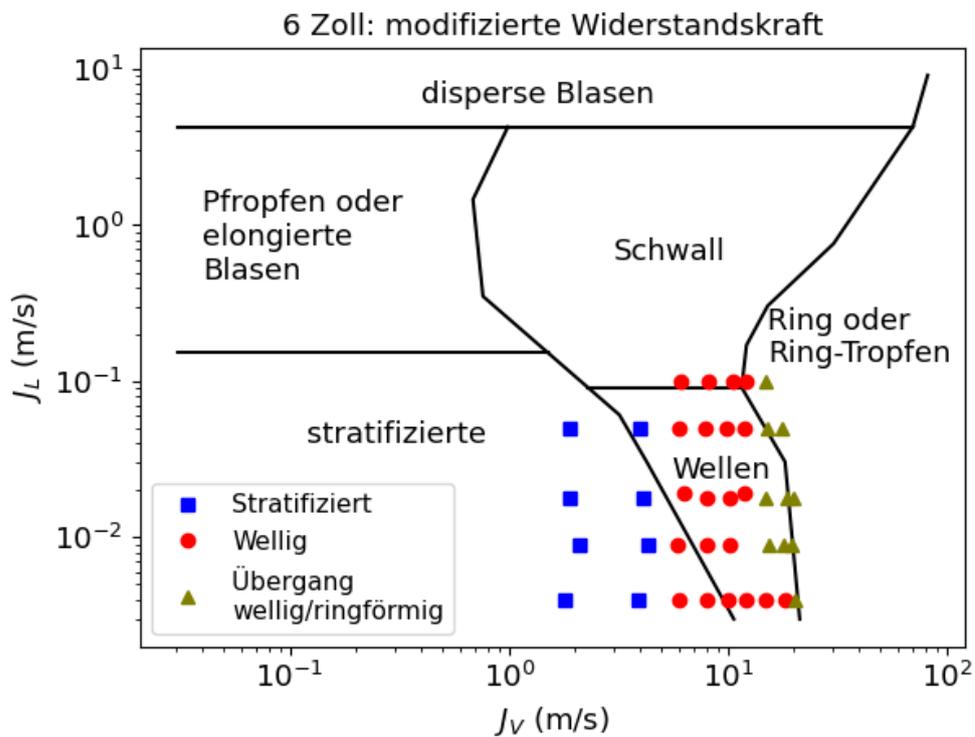
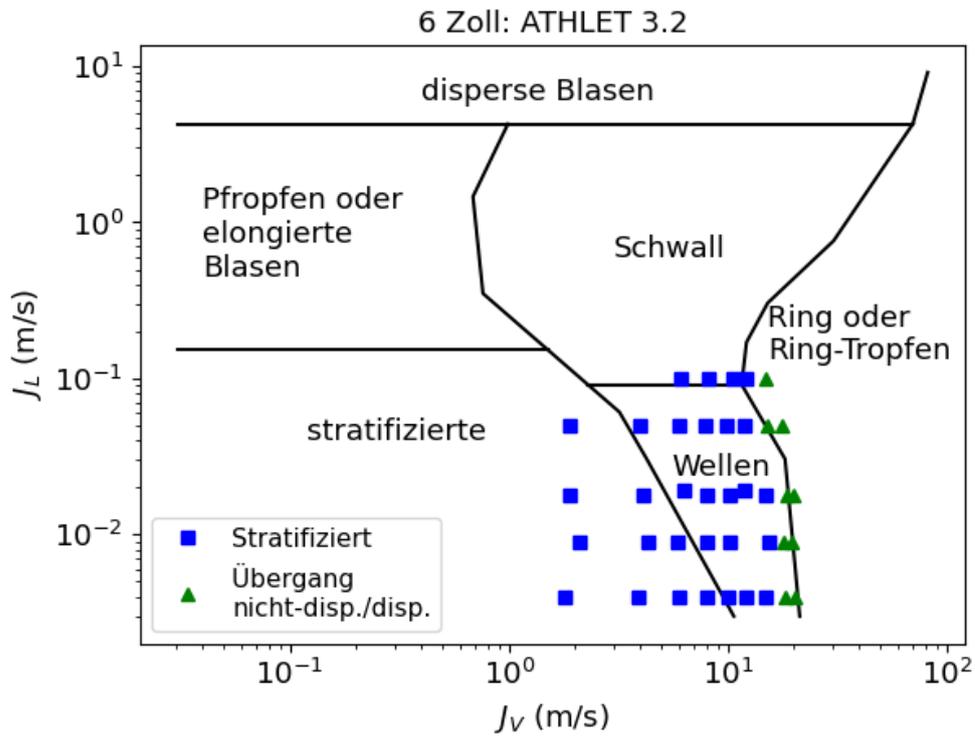


Abb. 4.8 In ATHLET ermittelte Strömungsregime zur Berechnung der Grenzflächenreibung für das Mantilla 6-Zoll-Experiment. Unterlegt ist die Mandhane-Strömungskarte (oben: ATHLET 3.2, unten: modifizierte Modellierung)

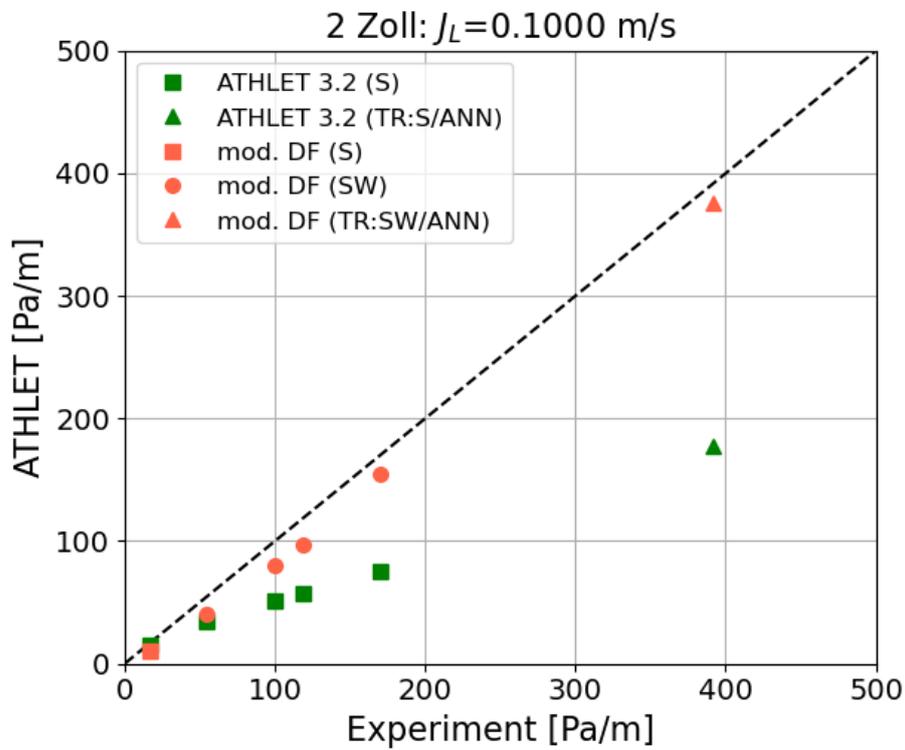
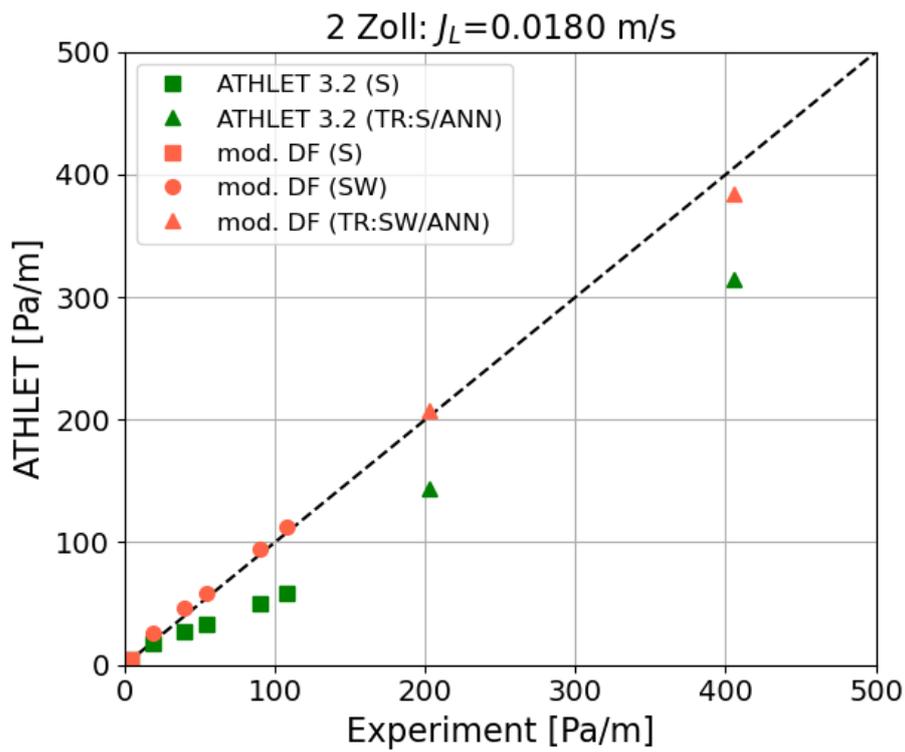


Abb. 4.9 Gemessener und berechneter Druckabfall für das Mantilla 2-Zoll-Experiment

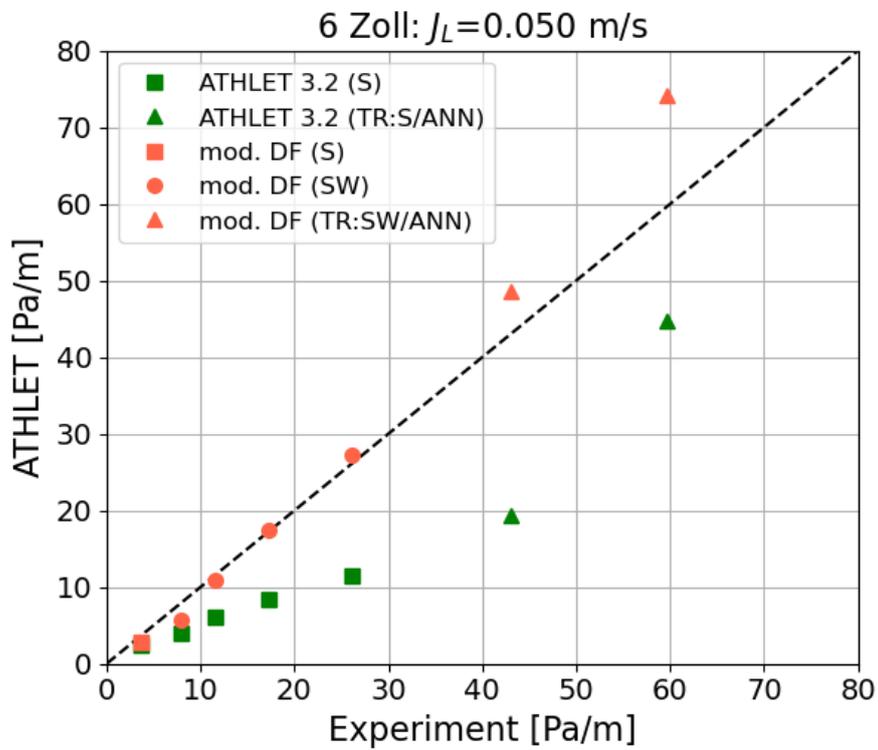
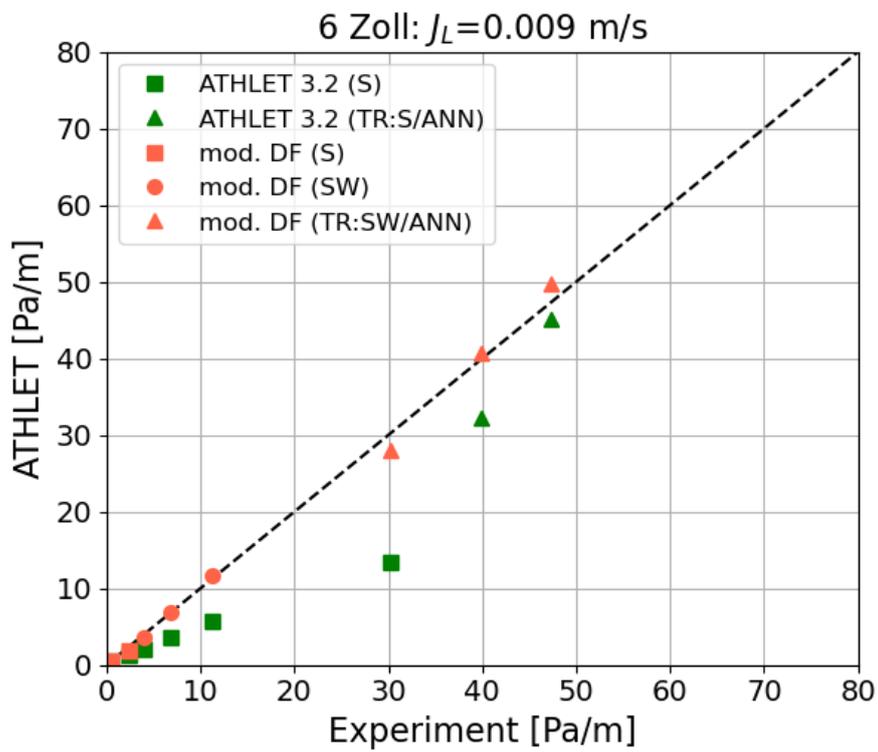


Abb. 4.10 Gemessener und berechneter Druckabfall für das Mantilla 6-Zoll-Experiment

4.2.4 Laufende Validierung

Eine umfangreiche Validierung wurde für das neue Entrainmentmodell durchgeführt, um den Gültigkeitsbereich zu bestätigen. Tab. 4.1 zeigt eine Liste der Versuchsdaten zu Entrainment in horizontalen Rohren, die für diese Validierungsarbeiten verwendet wurden. Das Validierungsset besteht hauptsächlich aus Experimenten mit Luft-Wasser-Gemischen unter Standardbedingungen. Zum Beispiel gibt es die Experimente von Dallman /DAL 78/, Laurinat /LAU 82/ und Williams /WIL 90/, die an der Universität von Illinois in Urbana-Champaign durchgeführt wurden und die nützlich sind, um den Effekt des Rohrdurchmessers zu untersuchen. Paras & Karabelas /PAR 91/, Mantilla /MAN 08/ und Magrini et al. /MAG 12/ liefern mehr Datenpunkte zu den Luft-Wasser-Gemischen unter Standardbedingungen. Andererseits werden für hohe Drücke oder andere Arbeitsflüssigkeiten die Experimente von Mantilla et al. /MAN 12/ und Viana /VIA 17/ in den Validierungssatz aufgenommen. Abb. 4.11 zeigt die auf Mandhanes Strömungskarte projizierten Versuchsbedingungen. Die Experimente von Dallman, Laurinat und Williams gehören zum Ringströmungsregime, während die Experimente von Mantilla, Mantilla et al., Viana von der stratifizierten Strömung bis zur Ringströmung reichen.

Die von Hand berechneten Ergebnisse des aktuellen ATHLET-Modells und des Al-Sarkhi-Modells werden mit den gemessenen Daten verglichen. Die absoluten Mittelwerte der relativen Fehler der Modelle sind in Abb. 4.12 als aufsteigende Reihenfolge des Rohrdurchmessers dargestellt. Das Al-Sarkhi-Modell zeigt in den meisten Fällen eine bessere Vorhersage als das aktuelle ATHLET-Modell. Es wurde jedoch herausgefunden, dass die Al-Sarkhi-Korrelation dazu neigt, die Entrainmentrate zu überschätzen, wenn der Rohrdurchmesser größer wird - Magrini et al., Viana und Williams (siehe Abb. 4.13), obwohl die Reynoldszahlen für die Lehrrohrgeschwindigkeit Re_{SL} innerhalb des validen Modellbereichs liegen (Gl. (4.4)). Daher wurde eine weitere Entrainmentkorrelation, Pan & Hanratty (2002) /PAN 02/, untersucht, die eine bessere Übereinstimmung bei einem Zustand mit großem Durchmesser ergeben kann, wie in Abb. 4.13 gezeigt. Die Details des Modells werden im nächsten Abschnitt beschrieben.

Tab. 4.1 Validierungsmatrix für Entrainment in horizontalen Rohren

Ref.	Medium	Durchm. [mm]	P [bar]	j_V [m/s]	j_L [m/s]	ρ_V [kg/m ³]	ρ_L [kg/m ³]	μ_V [μ Pa·s]	μ_L [mPa·s]	σ [mN/m]	Re_{SL}	N_{data}
Dallman (1979)	Luft- Wasser	23,1	1,10 - 1,10	32 - 184	0,008 - 0,90	1,3 - 1,5	998	18	1,0	73	168 - 20,554	87
Laurinat (1982)	Luft- Wasser	50,8	1,03 - 2,83	10 - 132	0,016 - 0,70	1,3 - 3,4	998	18	1,0	73	626 - 33,123	74
Williams (1990)	Luft- Wasser	95,0	1,18 - 1,18	31 - 91	0,030 - 0,12	1,3 - 1,9	998	18	1,0	73	2,429 - 10,264	19
Paras & Karabelas (1991)	Luft- Wasser	50,8	1,07 - 1,96	30 - 66	0,020 - 0,20	1,3 - 2,3	998	18	1,0	73	1,013 - 10,126	17
Mantilla (2008)	Luft- Wasser	48,6 - 153	1,04 - 2,24	1,5 - 82	0,003 - 0,10	1,2 - 2,6	998	18	1,0	73	154 - 16,261	43
Magrini et al. (2010)	Luft- Wasser	76,2	1,01 - 1,01	40 - 80	0,003 - 0,04	1,2	998	18	1,0	73	265 - 3,044	28
Mantilla et al. (2012)	N ₂ -Wasser N ₂ -Öl*	50,8	4,5 - 72	1,5 - 29	0,001 - 0,10	5,3 - 83	780 - 1,000	18	1,0-1,9	23 - 67	42 - 5,946	20
Viana (2017)	N ₂ -Water, CH ₄ -Öl**	76,2	35 - 84	1,0 - 25	0,010 - 0,10	24 - 92	752 - 999	12-20	0,8-1,8	17 - 71	286 - 8,730	33

*Drakesol 205, **Exxsol D110

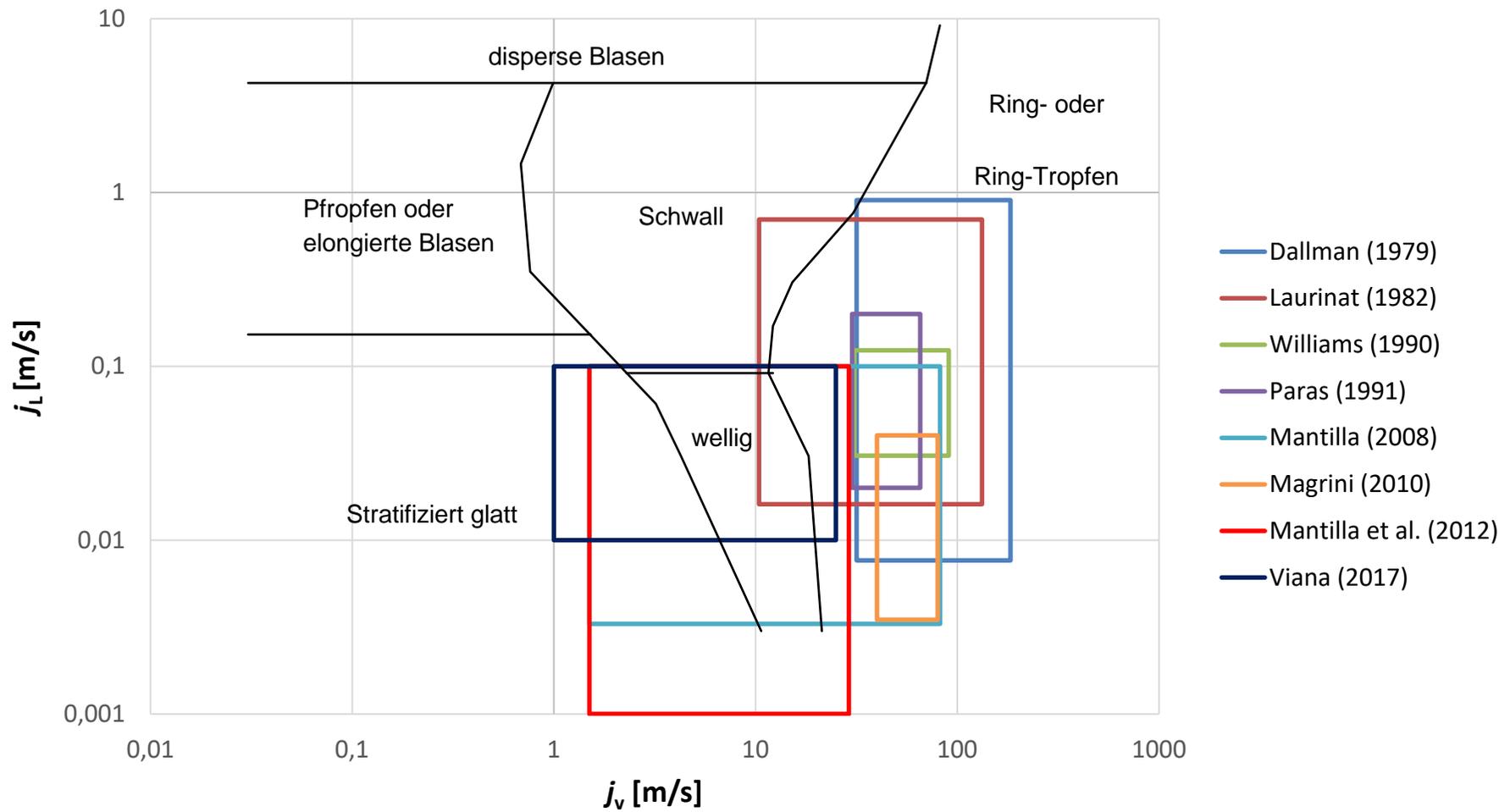


Abb. 4.11 Leerrohrgeschwindigkeitsbereiche der Experimente aus der Entrainment-Validierungsmatrix

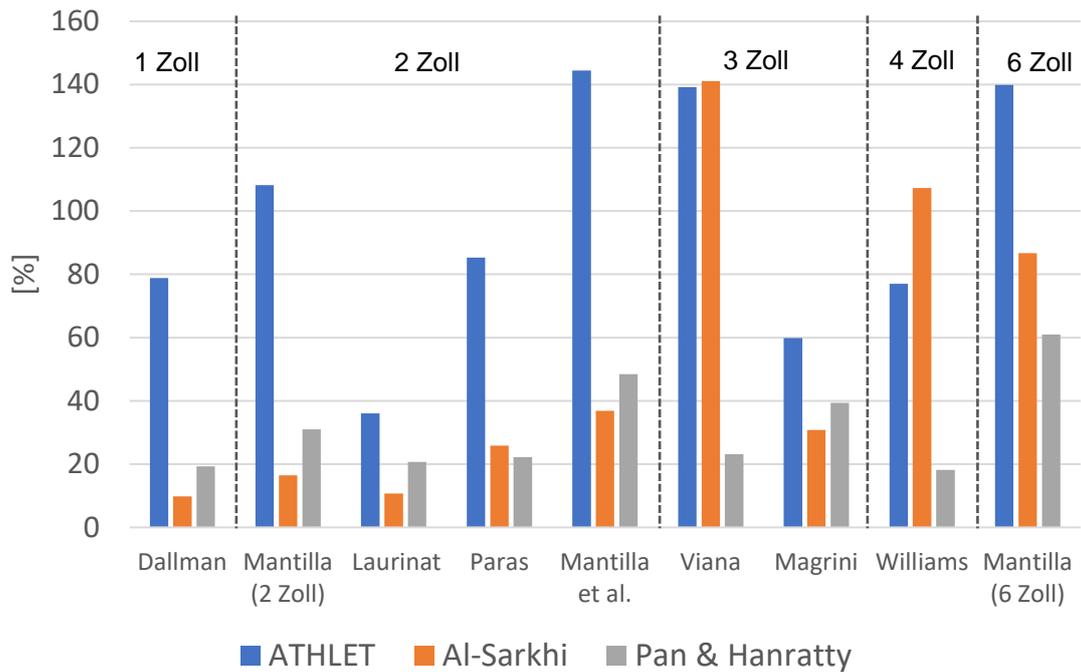


Abb. 4.12 Absoluter Mittelwert der relativen Fehler der vorhergesagten Entrainmentrate gegenüber den Versuchsdaten

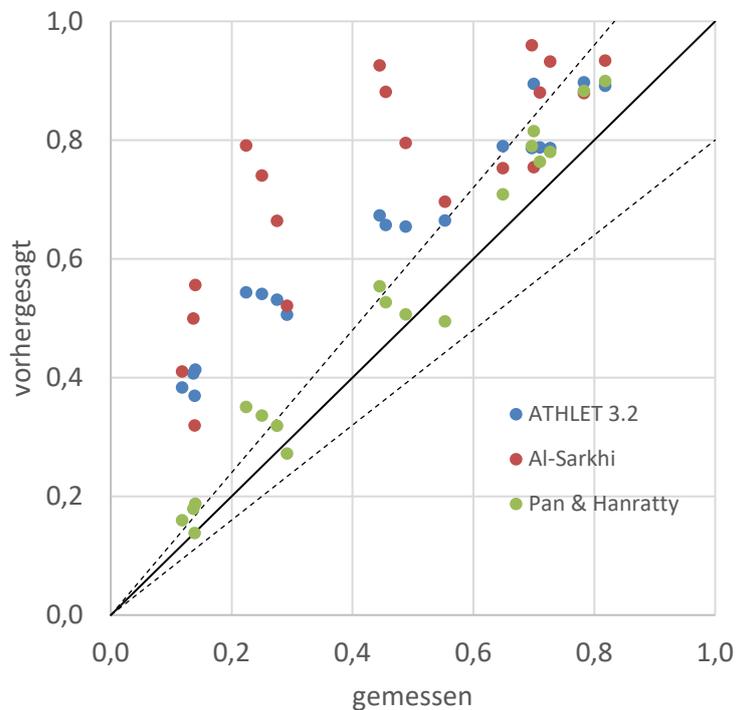


Abb. 4.13 Gemessene und vorhergesagte Entrainmentrate von William - Luft/Wasser, 1 bar, 3 Zoll Durchmesser

4.2.5 Aktuelle Weiterentwicklungen

Pan & Hanratty /PAN 02/ schlugen das Entrainmentmodell für horizontale Rohre vor, das auf einem Gleichgewicht zwischen Bildung und Ablagerung von Tropfen basiert. Damit kann die Entrainmentrate wie folgt berechnet werden:

$$\frac{f_e/f_{e,max}}{1 - f_e/f_{e,max}} = 9 \times 10^{-8} \left(\frac{D_h W_V^3 \rho_V^{1/2} \rho_L^{1/2}}{u_T \sigma} \right) \quad (4.13)$$

wobei

$$f_{e,max} = \begin{cases} 0 & Re_{SL} \leq Re_{LFC} \\ 1 - \frac{Re_{LFC}}{Re_{SL}} & Re_{SL} > Re_{LFC} \end{cases}$$

$$Re_{LFC} = 7.3(\log_{10}\omega)^3 + 44.2(\log_{10}\omega)^2 - 44.2\log_{10}\omega + 439$$

$$\omega = \frac{\mu_L}{\mu_V} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}}$$

u_T ist die Endgeschwindigkeit der Tropfen. Wie Abb. 4.12 und Abb. 4.13 zeigen, wurde festgestellt, dass die Pan & Hanratty-Korrelation gute Übereinstimmungen für die Experimente mit größerem Durchmesser ergeben kann, z. B. Viana oder Williams, wofür hohe Fehler bei der Al-Sarkhi-Korrelation auftraten. In einigen Experimenten zeigt die Pan & Hanratty-Korrelation jedoch eine schlechtere Vorhersage als die Al-Sarkhi-Korrelation, z. B. Mantilla, Dallman und Magrini. Der Grund dafür ist, dass Re_{LFC} zur Bestimmung von $f_{e,max}$ der Pan & Hanratty-Korrelation (Re_{LFC} beträgt etwa 370 bei Standardbedingungen) höher ist als die experimentell untersuchten Reynoldszahlen, bei denen bereits eine Entrainmentrate beobachtet wurde. Für Strömungen mit niedriger Reynoldszahl für die Leerrohrgeschwindigkeit wird aber $f_{e,max}$ und somit die Entrainmentrate Re_{SL} Null. Daher ist es notwendig, $f_{e,max}$ der Pan & Hanratty-Korrelation zu modifizieren, um ihre Vorhersage zu verbessern.

Das Ersetzen der ursprünglichen Beziehung für $f_{e,max}$ nach Pan & Hanratty durch eine andere Referenz wird derzeit in Betracht gezogen. Zum Beispiel kann $f_{e,max}$ im Al-Sarkhi-Modell den maximalen Mitnahmeanteil für Strömungen mit niedrigem Re_{SL} mit

von Null verschiedenem Wert vorhersagen, wie in Abb. 4.14 gezeigt. Die Untersuchung anderer Modelle für $f_{e,max}$ und der Vorhersagefähigkeit der kombinierten Korrelationen wird im Folgeprojekt weitergeführt werden.

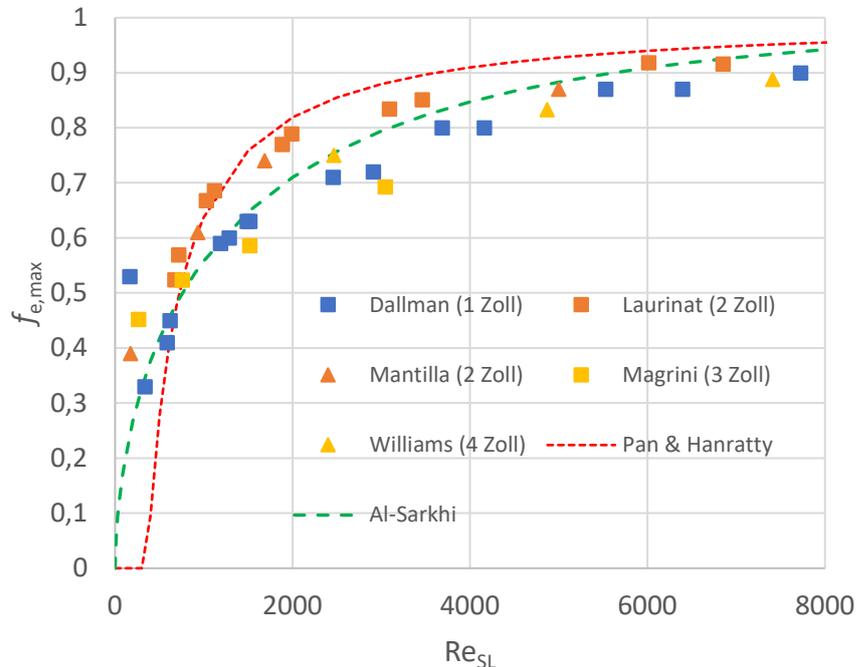


Abb. 4.14 Vorausgesagte und gemessene maximale Entrainmentrate anhand der Reynoldszahl für die Leerrohrgeschwindigkeit

4.3 Zentrale Strömungsbildkarte

In der bestehenden Struktur des ATHLET Quellcodes werden Strömungsregime für horizontale und vertikale Kanäle von verschiedenen Modellen separat bestimmt. Dies gilt beispielsweise für die Modellierung der Zwischenphasenfläche im Kondensations-/Verdampfungsmodell und für die Zwischenphasenreibung. Der Ansatz einer parallelen Implementierung von Übergangskriterien innerhalb der Einzelmodelle bietet die Möglichkeit der Feinjustierung entsprechend den Anforderungen und dem Detaillierungsgrad der jeweiligen Modelle, birgt jedoch auch die Gefahr von Inkonsistenzen und ist mittelfristig mit mehr Wartungsaufwand verbunden. Eine zentrale Auswahl des Strömungsbildes stellt sicher, dass Strömungsbilder von allen Modellen konsistent erkannt und angesprochen werden können. Zusätzlich liefert das zentrale Modul eine transparentere Strukturierung des Quellcodes und damit eine bessere Lesbarkeit. Mittelfristig bietet es die Möglichkeit, a) die zentralen Strömungsbildkarten um Übergangskriterien zu weiteren

Strömungsbildern zu ergänzen und b) das zentrale Strömungskartenmodul um neue Strömungsbildkarten für unterschiedliche Geometrien zu ertüchtigen.

Ziele dieses Arbeitspunktes waren daher:

- Vorbereitung einer neuen Struktur in ATHLET mit einer zentrale Strömungsbildkarte
- Vergleich der beiden wichtigen thermohydraulischen Strömungsbildkarten für den Phasenmassenaustausch und die Zwischenphasenreibung
- Vergleich der ATHLET Strömungsbildkarte mit anderen Karten aus der Literatur bzw. aus anderen Systemrechenprogrammen
- Bereitstellung des von ATHLET bestimmten Strömungsregimes in den Print- und Plotdaten (Dies ist eine wichtige Information, die in der Vergangenheit bereits mehrfach von verschiedenen Programmanwendern angefragt wurde.)

Mit den hier durchgeführten Arbeiten wurde ein zentrales Strömungsbildkartemodul in ATHLET implementiert /GUO 19/. Zur Prüfung des neuen Moduls wurden die Ergebnisse einer Strömungssimulation in einem vertikalen Rohr mit denen der Strömungsbildkarte von RELAP5/MOD 3.3 verglichen.

4.3.1 Strömungsbildkarten in ATHLET

Zwei wesentliche thermohydraulische Strömungsbildkarten von ATHLET sind im Verdampfungs- und Kondensationsmodell sowie im Zwischenphasenreibungsmodell implementiert.

Verdampfungs- und Kondensationsmodell

Für den Massen- und Energieaustausch zwischen den beiden Phasen ist die Größe der Zwischenphasenfläche ein entscheidender Einflussfaktor, die wiederum maßgeblich vom Strömungsregime, der Turbulenz und der Strömungsgeometrie abhängt. Das Modell zur Berechnung der Zwischenphasenfläche unterscheidet zwischen disperser Blasenströmung, Pfropfenströmung, Ring-/Ring-Tropfenströmung sowie Stratifizierung. Das Strömungsregimes werden in Abhängigkeit vom Dampfgehalt α , der Phasengeschwindigkeit und der Neigung des Strömungsweges bestimmt.

Zwischenphasenreibungmodell

Für vertikale und geneigte Kanäle wird die Bestimmung der Grenzflächenreibung in zwei Bereiche unterteilt: nicht-disperse und disperse Strömungen. Der Übergang zwischen beiden Strömungsformen basiert auf der Vorhersage des Einsetzens von Entrainment. Erweitert wird diese Strömungsbildkarte zukünftig durch die separate Berücksichtigung der Ringströmung (siehe Kap. 4.1). Die Strömungsbildkarte für horizontale Rohre beinhaltet zusätzlich das Strömungsregime der stratifizierten Strömung (siehe hierzu auch Kap. 4.2).

4.3.2 RELAP5/MOD 3.3 Modell

Für eine Einordnung der ATHLET-Strömungsbildkarten erfolgte ein Vergleich mit der Strömungsbildkarte des Codes RELAP5/MOD3.3 /NUC 01/. Die Strömungsregimekarte für vertikale Geometrien ist in Abb. 4.15 gezeigt. Das Schema ist dreidimensional, da RELAP anders als ATHLET zwischen Pre- und Post-CHF-Strömungsbildkarten unterscheidet. Die Übergänge erfolgen im Wesentlichen auf Basis des Dampfvolumentgehalts α_g und der Geschwindigkeit der Mischung v_m . Für Pre-CHF-Zustände werden als Strömungsbilder Blasen-, Schwall-, Ringnebel- und Tropfenströmung unterschieden, außerdem vertikale geschichtete Strömung für eine ausreichend niedrige Gemischgeschwindigkeit.

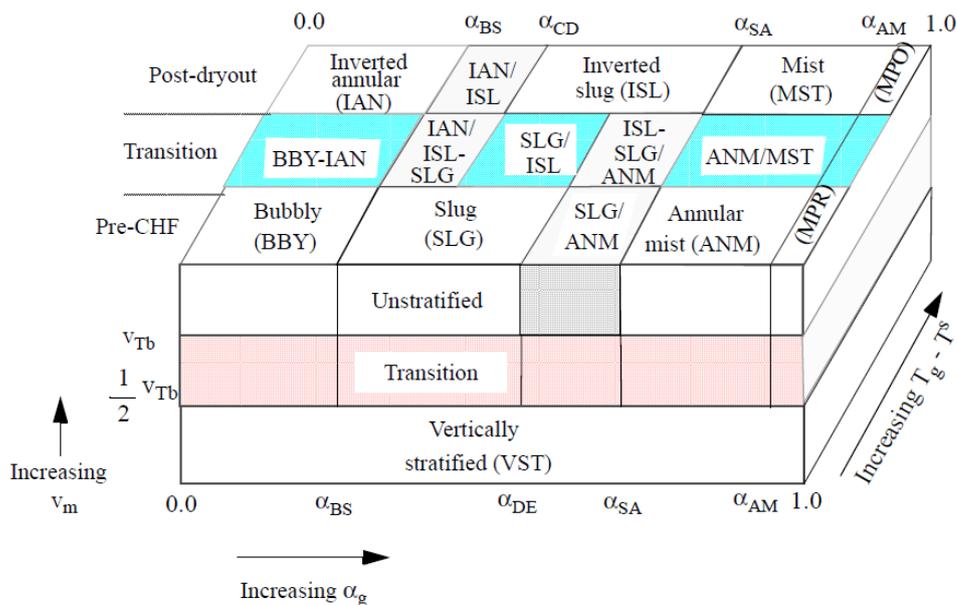


Abb. 4.15 Vertikale Strömungsbildkarte von RELAP, schraffierte Bereiche zeigen Übergänge /NUC 01/

4.3.3 Vergleich der Strömungsbildkarten

Zur Prüfung des neuen Strömungsbildkartemoduls werden die Ergebnisse einer Strömungsberechnung in einem vertikalen Rohr mit ATHLET mit denen Ergebnissen von RELAP5/MOD 3.3 für unterschiedliche Geometrie- und Strömungsparameter verglichen. Ausführliche Ergebnisse sind in /GUO 19/ zu finden.

Abb. 4.16 zeigt die Nodalisierung der 4 m langen Testgeometrie. Am unteren Ende des Rohrs wurde eine zeitlich schrittweise variierte Dampf-Wasser-Mischung in das Rohr injiziert. Die Phasenmassenströme sind in Abb. 4.17 gezeigt. Das Strömungsregime wurde geprüft, nachdem das System nach je 100 s einen stationären Gleichgewichtszustand erreicht hatte. Die ausgewählten Modellparameter sind in Tab. 4.2 mit unterschiedlichen Rohrdurchmessern, Massenströmen und Drücken aufgeführt. Die Strömungs- und Modellparameter berücksichtigten typische Bedingungen in DWR-Reaktoren im Normalbetrieb und Unfallverlauf.

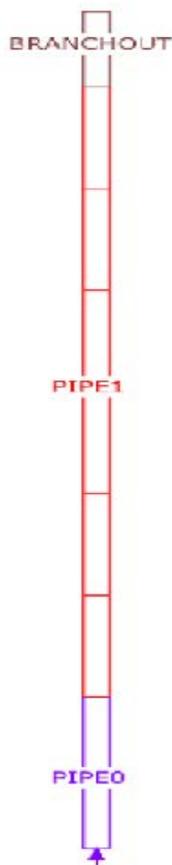


Abb. 4.16 Nodalisierung der Testgeometrie

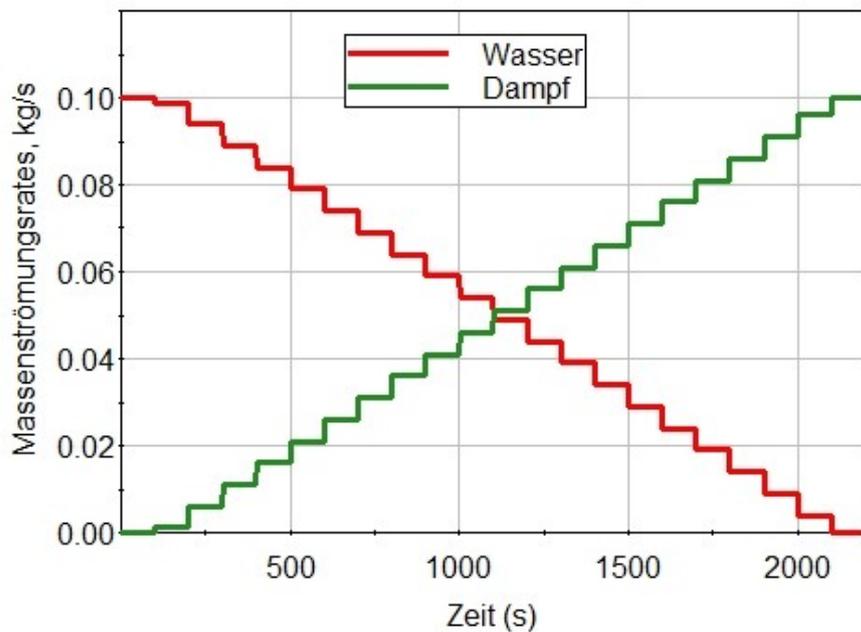


Abb. 4.17 Phasenmassenströme am Einlass

Tab. 4.2 Verwendete Modellparameter

Fall	Rohrdurchmesser (m)	Gesamtmassenstrom (kg/s)	Druck am Auslass (bar)
1	0,1	0,1	1,0
2	0,1	1,0	1,0
3	0,1	0,01	1,0
4	0,5	0,1	1,0
5	0,01	0,1	1,0
6	0,1	0,1	30,0
7	0,1	10,0	30,0
8	0,1	0,1	60,0

Zunächst wurde ein Vergleich der beiden ATHLET-Strömungsbildkarten für Kondensation/Verdampfung und für Zwischenphasenreibung durchgeführt. Da beide Strömungsbildkarten wie oben beschrieben unterschiedliche Strömungsbilder auflösen, sind Unterschiede zu erwarten. Wie in Abb. 4.18 am Beispiel des Falls 2 gezeigt, treten Abweichungen des Strömungsregimes zwischen der Übergangsströmung und der Ring-Tropfenströmung auf, da in den beiden Modellen unterschiedliche Übergangskriterien angewendet werden. Im Rahmen zukünftiger Arbeiten ist geplant, derartige

Inkonsistenzen in den Übergangskriterien nach Möglichkeit abzubauen. In diesem Zuge müssen auch Parameter in den Schließungsgleichungen angepasst werden, die für die bisher modellspezifischen Übergangskriterien optimiert sind.

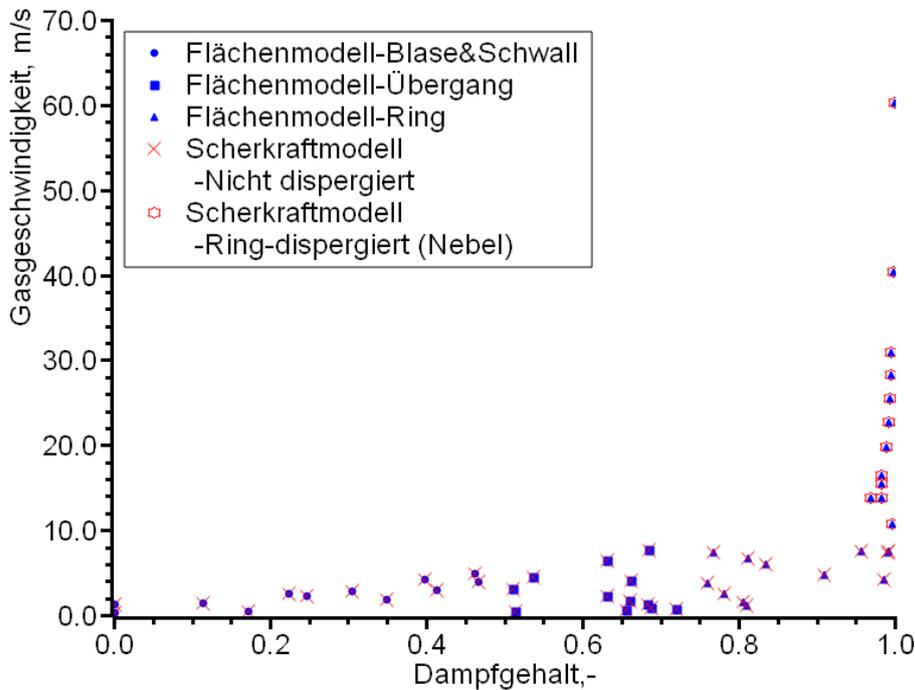


Abb. 4.18 Strömungsregime in den beiden Modellen für Kondensation/Verdampfung (Flächenmodell) und Scherkräfte für den Fall 2

Die nachfolgende Abb. 4.19 zeigt den Vergleich der Strömungsregime im vertikalen Rohr zwischen ATHLET (Modell für Kondensation/Verdampfung) und RELAP5 am Beispiel des Falls 1. Die Strömungsbilder sind als lokaler Dampfvolumentgehalt am Rohraustritt gegen die lokale Gasgeschwindigkeit aufgetragen und mit unterschiedlichen Symbolen gekennzeichnet. Ein Hauptunterschied findet sich in der separaten Betrachtung der Nebelströmung für hohe Dampfvolumentgehalte in RELAP. Die Übergangsbereiche zwischen Blasen-/Schwallströmung und Ring-Tropfenströmung stimmen näherungsweise überein. In Abhängigkeit der lokalen Geschwindigkeiten tritt in RELAP auch für höhere Dampfvolumentgehalte Übergangsströmung auf. Insgesamt besteht eine plausible Übereinstimmung zwischen RELAP und ATHLET gefunden. Abweichungen sind ggf. auch durch unterschiedliche Schließungsgleichungen in den beiden Codes begründet.

Der Vergleich von ATHLET und RELAP macht insgesamt deutlich, dass in ATHLET verschiedene Strömungsregime nur recht grob und demzufolge nicht immer durch

spezifische Schließungsgleichungen beschrieben werden. Durch Einführung weiterer Strömungsbilder besteht die Möglichkeit, die Vorhersagefähigkeit des Programms zu verbessern. Erste Schritte in dieser Richtung wurden gemacht und sind in den Kapiteln 4.1 und 4.2 beschrieben. Weitere Arbeiten sind im Nachfolgevorhaben geplant, bspw. durch Einführung eigener Strömungsbildkarten für kühlende Wände und Post-CHF Zustände.

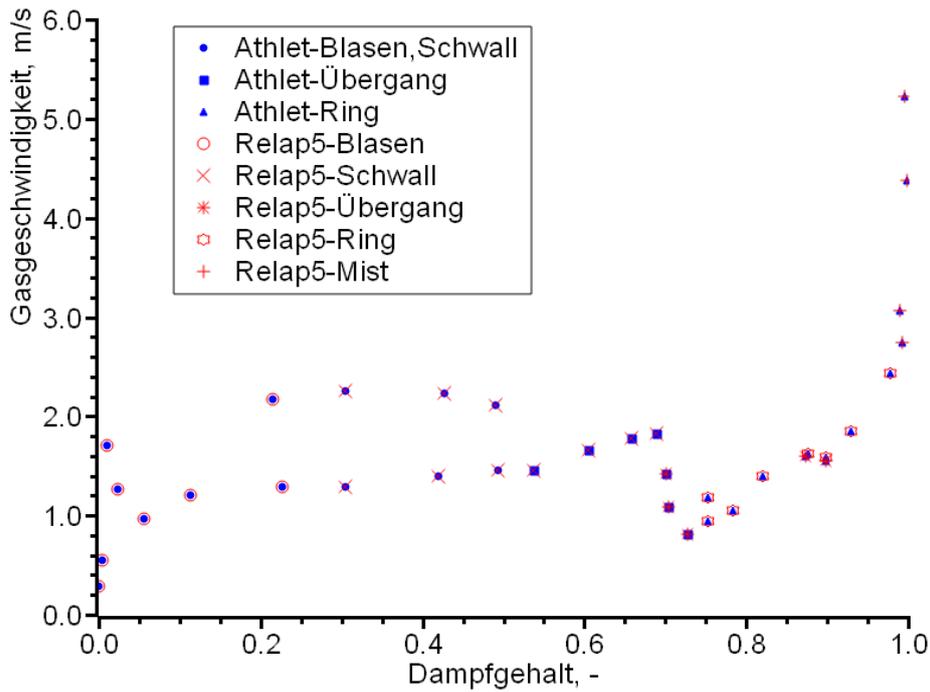


Abb. 4.19 Strömungsregime im Fall 1 mit $d = 0,1$ m, $G = 0,1$ kg/s, $p = 1,0$ bar

5 Weitere thermohydraulische Modellentwicklungen

5.1 Zweiphasenmodellierung

5.1.1 Wasserspiegelkraft

Ausgehend von der Impulsgleichung für eine beliebige Phase k wurde ein modifizierter Term für die im 6-Gleichungs-Modell von ATHLET enthaltene „Wasserspiegelkraft“ hergeleitet, implementiert und anhand verschiedener Testrechnungen verifiziert und validiert /CRO 20b/. Da in bisherigen ATHLET-Versionen bereits Terme für die Wasserspiegelkraft enthalten waren, wurden Vergleichsrechnungen mit den verschiedenen Formulierungen durchgeführt. Fazit der Vergleichsrechnungen war, dass keine Implementierung der Wasserspiegelkraft allen anderen eindeutig und in jedem Fall überlegen ist (nur Rechnungen ohne Wasserspiegelkraft sind eindeutig unterlegen). Bei vollständiger Betrachtung aller Ergebnisse konnte das Fazit gezogen werden, dass die neue Formulierung tendenziell die besten Ergebnisse liefert – sowohl hinsichtlich der Übereinstimmung mit Experimentaldaten als auch hinsichtlich der benötigten Rechenzeit und der numerischen Stabilität /CRO 20b/.

Im 5-Gleichungs-Modell von ATHLET gibt es für horizontale Querverbindungen (sog. Cross-Connection-Objects, CCO) zwischen vertikalen Parallelkanälen eine spezielle Drift-Option, die bei der Berechnung der Relativgeschwindigkeit den Gradienten des Wasservolumenanteils (bzw. den „Void fraction“-Gradienten) *nicht* berücksichtigt. Die Berücksichtigung des Gradienten des Wasservolumenanteils im Driftmodell hat ähnlichen Effekt wie die Berücksichtigung der Wasserspiegelkraft im 6-Gleichungs-Modell. Aus Gründen der Vergleichbarkeit wurde daher im 6-Gleichungs-Modell eine neue Option für CCO vorgesehen, die die Wasserspiegelkraft in der Impulsgleichung nicht berücksichtigt.

Darüber hinaus wurde die Wasserspiegelkraft des 6-Gleichungs-Modells für horizontale Leitungen zwischen Kontrollvolumen mit aktivem Gemischspiegelmodell neu formuliert. Im Fall von Kontrollvolumen mit Gemischspiegel ist die Phasenverteilung in den Volumen durch die Position des Gemischspiegels bestimmt. Die Wasserspiegelkraft resultiert dann aus dem Vergleich der Gemischspiegelpositionen:

$$dp = \rho_{L,x}(1 - \alpha_x) \cdot g \cdot (Z_{ML1} - Z_{ML2})$$

wobei Z_{ML} die Gemischspiegel Position und „x“ das Kontrollvolumen mit höherem Gemischspiegelstand bezeichnet. Falls nur auf einer Seite der Leitung ein Gemischspiegel vorhanden ist, wird dieser mit dem „collapsed level“ des Nachbarvolumens verglichen. Die Änderungen führen insgesamt zur Angleichung des 6-Gleichungs-Modells an die Ergebnisse der Simulationen mit einer gemeinsamen Impuls-Gleichung.

5.1.2 Modellierung bei erscheinender/verschwindender Phase

Eine wichtige Frage bei der Zweiphasenmodellierung ist die Behandlung der nichtvorhandenen bzw. gerade verschwindenden oder erzeugten Phase beim Übergang zu bzw. von einphasiger Strömung. Eine typische Frage lautet z. B.: Welche Geschwindigkeit hat die Wasserphase bei reiner Dampfströmung? Um die numerische Stabilität des Codes zu gewährleisten und um die physikalischen Prozesse möglichst realitätsnah abzubilden, werden in ATHLET verschiedene Maßnahmen ergriffen. Ein wichtiges Beispiel hierfür ist der Aufruf des Unterprogramms `D2MDZC`, in welchem die Zeitableitung einer verschwindenden Fluidphase auf Null geführt und deren Impuls auf die andere Fluidphase übertragen wird. Dieses Verfahren wird seit geraumer Zeit in ATHLET angewendet /LER 98/. Damalige Rechnungen einer Notkühlwasser-Einspeisung zeigten, dass durch dieses Vorgehen das Experiment besser simuliert werden konnte als mit alternativen Methoden (z. B. Gleichsetzen der Geschwindigkeit der nicht-existierenden Phase mit der Geschwindigkeit der anderen Phase). Bei ATHLET-Rechnungen in der jüngeren Vergangenheit ist jedoch aufgefallen, dass durch dieses Verfahren numerische Instabilitäten verursacht werden können, etwa beim Normalbetrieb im Reaktorkern, wenn wegen unterkühlten Blasensiedens sehr kleine Dampfgehalte entstehen und wieder verschwinden, oder bei horizontal bzw. leicht geneigt liegenden Kondensationsrohren (so traten bei Nachrechnungen von COSMEA-Experimenten /CRO 19/ Oszillationen des Volumendampfgehaltes auf, welche durch `D2MDZC` verursacht wurden; oder bei Nachrechnungen von Mantilla-Experimenten /MAN 12/ (siehe auch Kapitel 4.2.3) zu horizontalen Tropfenströmungen mit sehr kleinem Flüssigkeitsanteil kam es zum Zurückhalten der Tropfen in einem Kontrollvolumen, bis ein gewisser Volumenanteil überschritten wurde). Um die numerische Stabilität des Codes zu erhöhen, wurde die Routine `D2MDZC` nun entfernt. Die nicht-existierende Phase wird „mitlaufen“ gelassen, d. h. die Zeitableitung ihrer Geschwindigkeit wird wie gewöhnlich berechnet und über die Zeit integriert. Nachrechnungen verschiedener ATHLET-Samples, Experimente und Datensätze aus dem ATHLET-Validierungsband mit anschließender Analyse haben ergeben, dass ATHLET nun zwar erwartungsgemäß andere Ergebnisse berechnet als bei Verwendung der Routine, diese

jedoch unter dem Aspekt der physikalischen Vorhersagefähigkeit des Codes gleichwertig sind. Unter numerischen Gesichtspunkten wurde der Code durch das Entfernen des Unterprogramms verbessert.

5.1.3 Verbesserte Modellierung der kritischen Ausströmung

Das im Rahmen des vorangegangenen Projekts RS1538 weiter entwickelte Modell zur Simulation von kritischer Ausströmung /SKO 19a/ wurde modifiziert und validiert. Die Modifizierung bezog sich inhaltlich auf eine Erhöhung der Verdampfungsraten bei starker Turbulenz, die gewöhnlich bei einer kritischen Ausströmung auftritt. Der in dem bisherigen ATHLET Modell verwendete Turbulenzfaktor $CTURB$, der über den Eingabedatensatz vom Anwender vorgegeben werden musste, wurde durch eine Formulierung auf Basis einer äquivalenten Wärmeleitfähigkeit von Wasser ersetzt. Während der Faktor $CTURB$ für verschiedene Ausströmungskonfigurationen per Input modifiziert werden musste, konnte mit der äquivalenten Wärmeleitfähigkeit eine Formel eingeführt werden, die für verschiedene Ausströmungsgeometrien und thermohydraulische Bedingungen anwendbar ist. Die erweiterte Modellierung bedeutet somit auch eine Vereinfachung des Datensatzformats und eine Reduzierung möglicher Anwenderfehler.

Die äquivalente Wärmeleitfähigkeit ist eine Summe der molekularen und turbulenten Wärmeleitfähigkeit:

$$k_{equ} = k_{molec} + k_{eddy} \quad (5.1)$$

In CFD-Ansätzen wird auf Basis der Reynolds-Analogie eine turbulente Wärmeleitfähigkeit aus lokalen Turbulenztermen und Zwischenphasenflächen bestimmt. In einem Systemcode ist ein solches Vorgehen schwierig umzusetzen, da aufgrund des groben, ein-dimensionalen Gitters keine lokalen Informationen zu Geschwindigkeits- oder Temperaturgradienten vorliegen. Darüber hinaus verfügen Systemcodes über kein Mehrgleichungsturbulenzmodell. Alternative Ansätze in CFD-Programmen nutzen zur Bestimmung der turbulenten Wärmeleitfähigkeit die turbulente Prandtlzahl, die entweder als konstant angenommen oder über algebraische Beziehungen berechnet wird /KAY 05/. Da bei einem Systemcode keine genauen lokalen Turbulenzgrößen bekannt sind und zusätzlich die Modellierung der Verdampfung, die erheblich zum Turbulenzgrad beiträgt, mit Unsicherheiten behaftet ist, wurde für die Berechnung der turbulenten

Wärmeleitfähigkeit ein für 1D-Systemcodes geeigneter Ansatz gewählt, der diese als Funktion einer zweiphasigen Reynolds-Zahl darstellt:

$$k_{eddy} = 10^{-5} Re \cdot k_{molec} \quad (5.2)$$

Der Koeffizient 10^{-5} ist eine Konstante, deren Wert im Laufe von Testrechnungen anhand von etwa 100 Versuchen optimiert wurde. Die Reynolds-Zahl wird zur Approximation des Turbulenzgrades aufgrund des Unterschieds der Phasengeschwindigkeiten an der Grenzschicht auf Basis der Relativgeschwindigkeit bestimmt zu

$$Re_L = \frac{D_h \cdot w_{rel} \cdot \rho_L}{\eta_L} \quad (5.3)$$

für die Flüssigkeitsphase bzw. für die Dampfphase

$$Re_V = \frac{D_h \cdot w_{rel} \cdot \rho_V}{\eta_V} \quad (5.4)$$

Das neue Modell wurde anhand des Super-Moby-Dick-Experiments /ROU 87/ für verschiedene Düsenformen validiert. Die Ergebnisse der Simulation mit dem neuen Modell (Abb. 5.1 und Abb. 5.3) zeigen eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten als die Ergebnisse des alten Modells (siehe Abb. 5.2 und Abb. 5.4). Die Berechnung der kritischen Ausströmung am Austritt der Düse ist mit dem neuen Modell deutlich genauer als mit dem alten.

Auch die Druckverteilung entlang der Düse wird gut reproduziert (Abb. 5.5). Das neue Modell muss zukünftig weitergehend für die Ausströmung durch Blenden validiert werden.

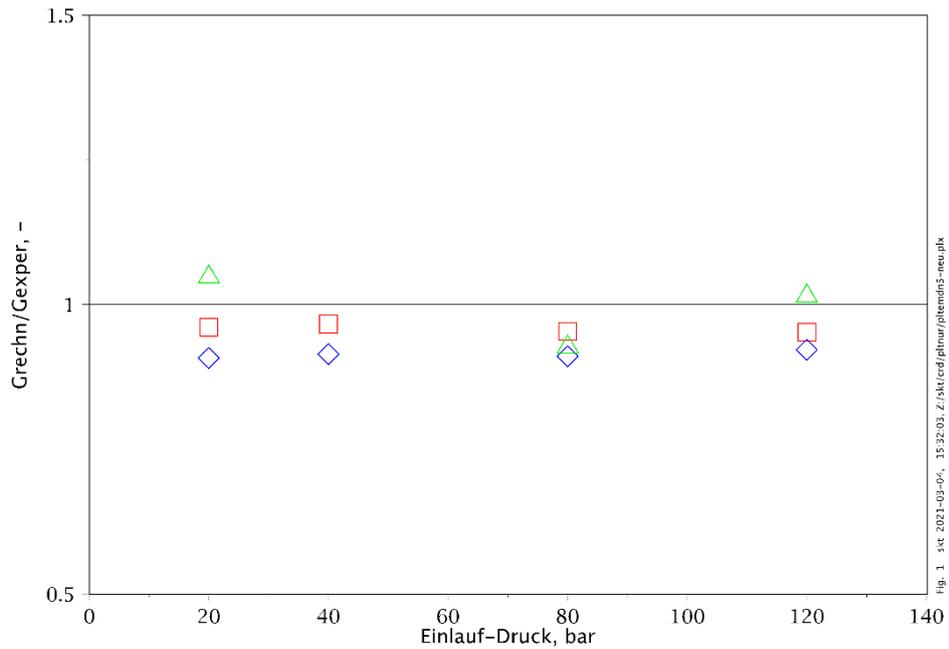


Abb. 5.1 Moby-Dick-Experiment mit Diffusor: Relative Fehler der mit dem neuen Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: □: Eintrittsunterkühlung 20 K; ◇: Eintrittsunterkühlung 10 K; △: Sättigung am Eintritt

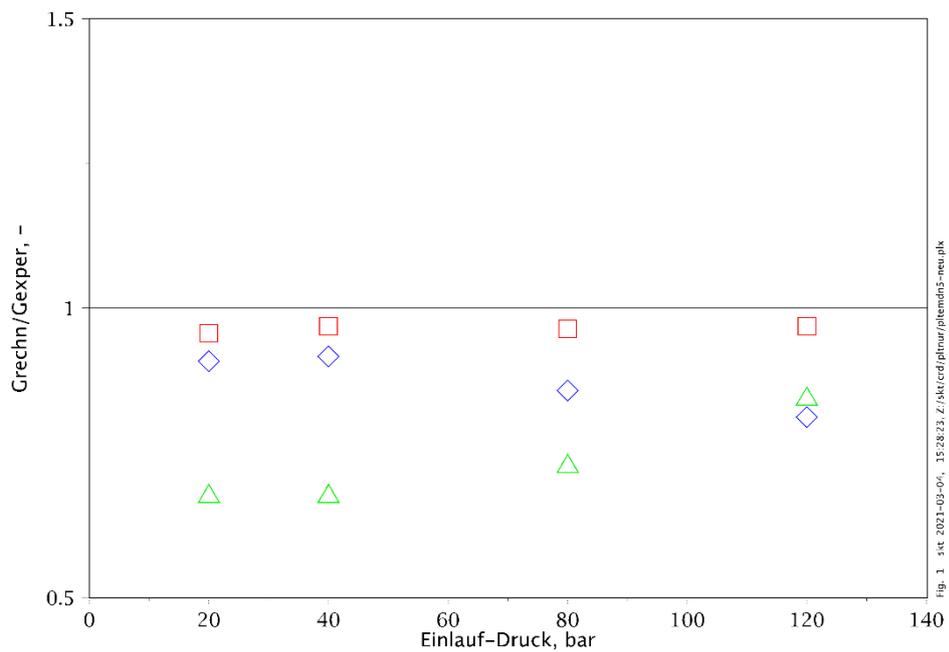


Abb. 5.2 Moby-Dick-Experiment mit Diffusor: Relative Fehler der mit dem alten Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: □: Eintrittsunterkühlung 20 K; ◇: Eintrittsunterkühlung 10 K, △: Sättigung am Eintritt

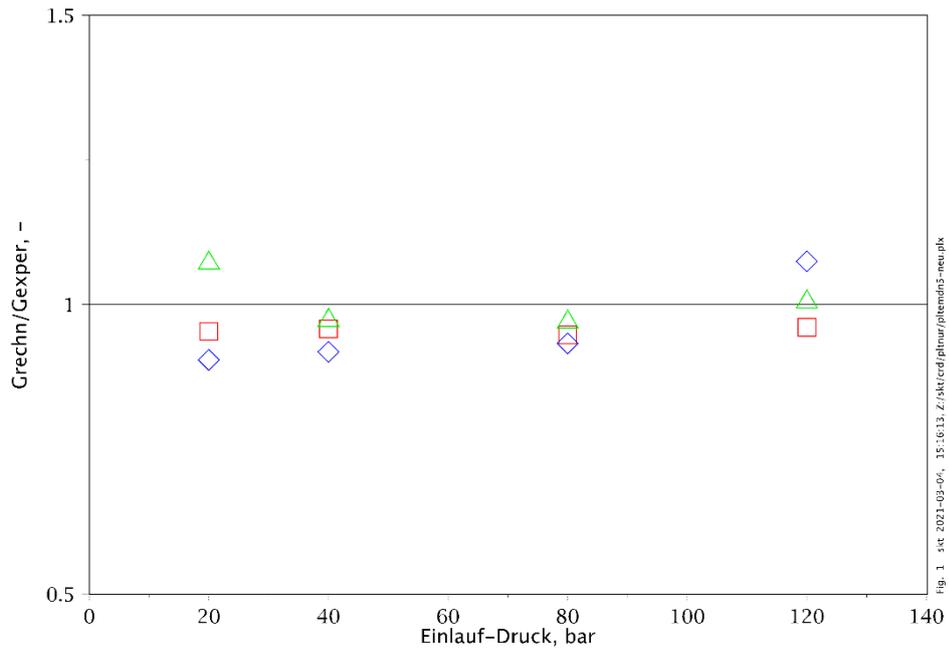


Abb. 5.3 Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Relative Fehler der mit dem neuen Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: □: Eintrittsunterkühlung 20 K, ◇: Eintrittsunterkühlung 10 K, △: Sättigung am Eintritt

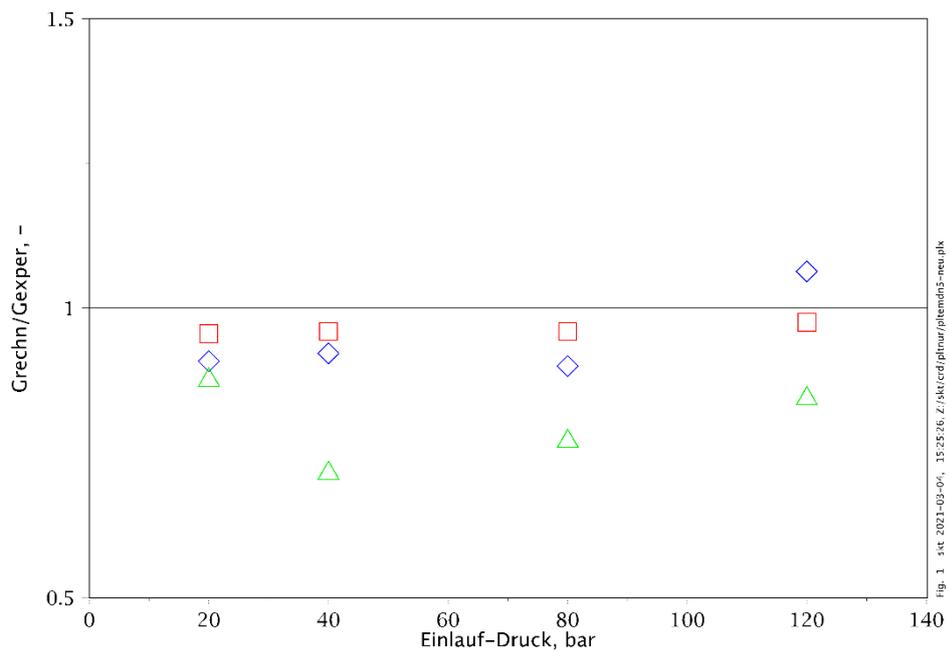


Abb. 5.4 Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Relative Fehler der mit dem alten Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: □: Eintrittsunterkühlung 20 K, ◇: Eintrittsunterkühlung 10 K, △: Sättigung am Eintritt

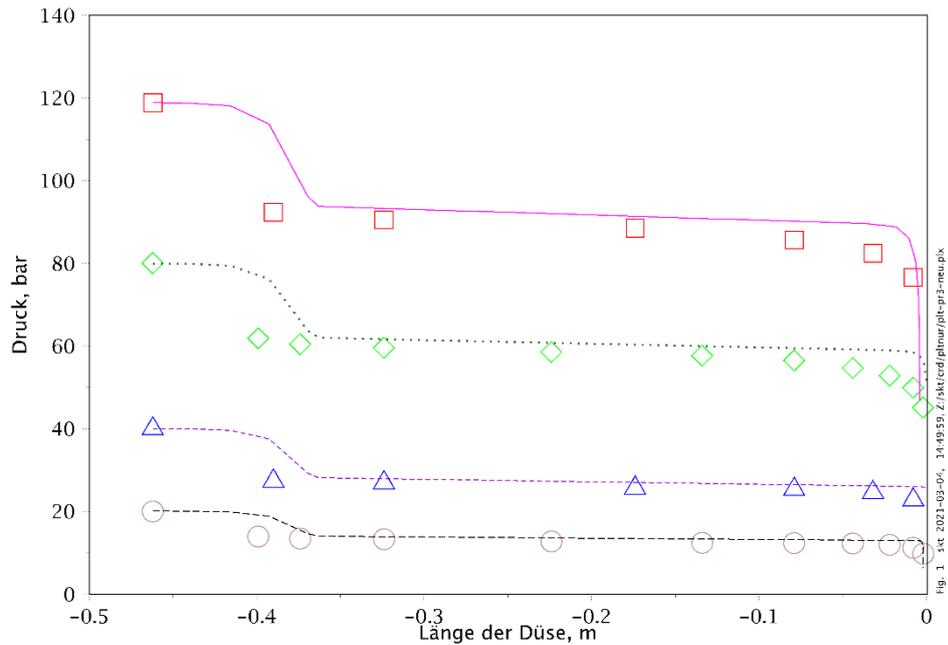


Abb. 5.5 Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Druckverteilung entlang der Düse:
 Test no 120EB305: □: Experiment, ____: Rechnung; Test no 80J276: ◇:
 Experiment, Rechnung; Test no 40J227: Δ: Experiment, ---- Rechnung;
 Test no 20EB192: ○: Experiment, - . - . -: Rechnung

5.1.4 Strömungssimulation in Verzweigungen

Um die Anwendung der verschiedenen Optionen zur Strömungssimulation in Abzweigen mittels der Eingaben unter den Schlüsselworten `BRANCHING` und `BRANCH2M` zu verbessern, wurden mehrere zusätzliche Prüfungen implementiert, die den Anwender auf inkonsistente Eingabedaten aufmerksam machen. Darüber hinaus werden für kompliziertere Verzweigungssituationen, die mittels eines Branchobjekts vom Anwender modelliert werden, unter bestimmten Bedingungen verbindlich Eingabedaten unter `BRANCHING` gefordert. Hintergrund hierbei ist, dass Verzweigungen eine mehrdimensionale Geometrie aufweisen können, die ATHLET auf Basis der ausschließlich eindimensionalen Eingabedaten der einzelnen Thermofluidobjekte nicht ableiten kann. Eine solche Situation ist insbesondere gegeben, wenn ein vertikal definiertes Branchobjekt mit einem horizontalen Pipeobjekt verknüpft ist oder umgekehrt. Hierbei kann bspw. die Simulation des Strömungseintritts in das verknüpfte Pipeobjekt nicht ausschließlich auf Basis der eindimensionalen Geometrieangaben (z. B. Strömungsquerschnitt) des Branchobjekts, das ja eine andere räumliche Orientierung besitzt, erfolgen. Der Anwender kann und muss zusätzliche geometrische Eingaben unter `BRANCHING` vornehmen, um den

mehrdimensionalen Charakter des Abzweigs zu spezifizieren. Auf dieser Basis kann ATHLET einen realistischen Druckverlust (Momentum-Flux) berechnen. Die Eingaben sind vor allem für das 5-Gleichungs-Modell von Relevanz. Beim Einsatz des 6-Gleichungs-Modells besitzt der Anwender die Möglichkeit, über das Schlüsselwort `BRANCH2M` weitere Vorgaben zur Berechnung des Momentum-Flux-Terms vorzunehmen.

5.1.5 3D-Modell

Das thermohydraulische 3D-Modell von ATHLET wurde im Rahmen des Vorgängerprojekts RS1538 um ein Gemischspiegelmodell erweitert, das die dreidimensionale Beschreibung von Wasserpools mit einer stratifizierten Wasseroberfläche ermöglicht. Da über den Gemischspiegel hinweg das Strömungsbild und die Phasenverteilung erheblich variieren, müssen verschiedene fluiddynamische Modellterme in diesem Bereich besonders behandelt und zum Teil in Abhängigkeit von der aktuellen Gemischspiegelposition innerhalb des numerischen Gitters geeignet interpoliert werden. Um das numerische Verhalten des 3D-Gemischspiegelmodells mit Blick auf Stabilität und Zeitschrittweiten zu verbessern, wurden diese bisher einfach stetigen Interpolationen nun stetig differenzierbar implementiert.

Neben dem 3D-Modell besitzt ATHLET ein spezielles Ringraum-Driftmodell (Option `annulus drift`) zur Erfassung mehrdimensionaler Effekte im Ringraum nach einem Leck in einem der Stränge, welches die Verteilung der Wasser-Dampf-Gegenströmung im Ringraum bei wenigen Parallelkanälen vereinfacht modelliert. Die gemeinsame Verwendung beider Modelloptionen, 3D-Modell und `annulus drift`, ist nicht zielführend, da das 3D-Modell insbesondere auf einem feineren Gitter mit acht und mehr Parallelkanälen im Ringraum die mehrdimensionalen Strömungseffekte auf Basis der 3D-Erhaltungsgleichungen berechnen kann. Die Modelloption Ringraumdrift wurde daher für Simulationsgebiete, für die das 3D-Modell bereits aktiviert ist, abgeschaltet.

5.2 Berücksichtigung Reynoldszahl-abhängiger Formverluste

ATHLET bietet verschiedene Modelloptionen, um Strömungsverluste aufgrund von Wandreibung oder Einbauten abzubilden. Zur Berücksichtigung eines lokalen Formverlusts muss der Anwender einen entsprechenden Verlustbeiwert im Eingabedatensatz spezifizieren. Der strömungsabhängige Formverlust wird anschließend von ATHLET auf

Basis dieses konstanten, von der Strömungsgeschwindigkeit unabhängigen Werts berechnet. Dieses Vorgehen ist allerdings unrealistisch, da tatsächlich eine Abhängigkeit zwischen Verlustbeiwert und Reynoldszahl existiert. Hierbei muss allerdings die spezielle Geometrie (Krümmer, Blende, Einlauf, etc.) berücksichtigt werden.

Die Eingabemöglichkeiten des Anwenders zur Berücksichtigung eines lokalen, Reynoldszahl-abhängigen Formverlustes wurden daher erweitert. Nun ist neben der Eingabe eines während der gesamten Rechnung konstanten Formverlustbeiwertes auch die Eingabe eines von der Strömung abhängigen Wertes möglich. Dazu wurde zum einen die Möglichkeit geschaffen, den Formverlustbeiwert in Abhängigkeit von der Reynoldszahl in Tabellenform vorzugeben und zum anderen, Formeln zur Berechnung des Formverlustbeiwertes für spezielle Bauformen, z. B. von Krümmern, auszuwählen. Für diese Eingabe wurde das neue Pseudokeyword `FORMLOSS` im Eingabedatensatz definiert. Darin werden abhängig von der Längenkoordinate des aktuellen Thermofluid-Objektes die gewünschten Modelloptionen (Tabelle oder Korrelation für spezielle Bauform) und ihre Variablen (z. B. Biegeradius beim Krümmer) eingegeben.

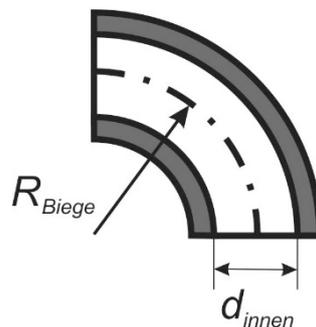


Abb. 5.6 Schema eines 90°-Krümmers mit Kennzeichnung des Biegeradius R_{Biege} und des Innendurchmessers d_{innen} .

Exemplarisch werden hier die Gleichungen zur Berechnung des Formverlustbeiwertes eines 90°-Krümmers (s. Abb. 5.6) vorgestellt. Dazu wurde das Modell von Herning /WAG 12/ implementiert. Dieses berechnet mittels der Variablen Biegeradius, Rohrdurchmesser und Reibungsverlustbeiwert den Formverlustbeiwert entsprechend der Gleichungen (5.5) bis (5.7).

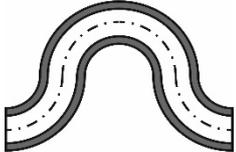
$$\frac{R_{Biege}}{d_{innen}} \geq 8 \qquad \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}} = \lambda \cdot 1,6 \cdot \sqrt{\frac{R_{Biege}}{d_{innen}}} \qquad (5.5)$$

$$2 \leq \frac{R_{Biege}}{d_{innen}} < 8 \quad \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}} = \lambda \cdot \frac{12,8}{\sqrt{R_{Biege}/d_{innen}}} \quad (5.6)$$

$$1 \leq \frac{R_{Biege}}{d_{innen}} < 2 \quad \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}} = \lambda \cdot \frac{12,8}{\sqrt{R_{Biege}/d}} \cdot \sqrt[4]{\frac{2}{\sqrt{R_{Biege}/d_{innen}}}} \quad (5.7)$$

Ein Vorteil dieses Modells ist, dass durch Multiplikation die Formverlustbeiwerte weiterer, bei Rohrleitungen typischer Bögen aus hintereinander gereihten 90°-Krümmern berechnet werden können (s. Tab. 5.1).

Tab. 5.1 Gleichungen zur Berechnung der Formverlustbeiwerte von Bögen, die aus 90°-Krümmern zusammengesetzt sind /WAG 12/.

180° Bogen	Raumbogen	S-Bogen	Umbogen
			
$\xi_{180^\circ \text{ Bogen}}$ $= 1,2$ $\cdot \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}}$	$\xi_{\text{Raumbogen}}$ $= 1,7$ $\cdot \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}}$	$\xi_{\text{S-Bogen}}$ $= 2,2$ $\cdot \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}}$	ξ_{Umbogen} $= 2,4$ $\cdot \xi_{90^\circ \text{ Krümmer}}$

Die realistische Betrachtung der Abhängigkeit von Reynoldszahl und Strömungsverlust ist insbesondere für die Simulation passiver Systeme, deren Anlauf- und Betriebsverhalten von kleinen treibenden Kräften bestimmt wird, von großer Bedeutung. Auch kommen in passiven Systemen sehr spezielle Bauformen zum Einsatz, deren Strömungsdruckverluste nur unzureichend mit den Standardmodellen von ATHLET abgebildet werden können. Ein Beispiel hierfür sind Plattenwärmetauscher, deren Reibungsverluste von der Oberflächenprägung der Platten abhängen. Derartige Komponenten sollen im Rahmen des BMWi-Projekts *Vasil* (Erweiterung und Validierung von AC² für die Simulation innovativer LW-SMR) simuliert werden. Für die Implementierung geeigneter Druckverlustkorrelationen kann die im Rahmen dieses Arbeitspunktes durchgeführte Entwicklung weitreichend als Basis genutzt werden.

5.3 Neue nicht-kondensierende Gase

Es wurden zwei zusätzliche nicht-kondensierbare Gase in ATHLET eingefügt: CO und CO₂. Damit sind die in ATHLET verfügbaren Gase mit denen in COCOSYS konsistent. Im Zuge dieser Arbeiten wurde zusätzliches Code-Refactoring durchgeführt. Damit ergeben sich die folgenden Änderungen bzw. Verbesserungen für nicht-kondensierbare Gase.

- Es besteht keine programmtechnische Beschränkung bezüglich der gleichzeitig zu simulierenden nicht-kondensierbaren Gaskomponenten mehr. Es können alle derzeit definierten Gase (8) plus das durch Nutzereingaben definierte Gas (USERGAS) genutzt werden.
- Die molaren Massen der Gase wurden an aktuelle Werte aus /LIN 97/ bzw. /WEB 21/ angepasst. Die spezifische Wärmekapazität aller Gase wurde auf die Werte bei 373,15 K und 1 MPa nach /LIN 97/ aktualisiert. Molare Massen und Wärmekapazitäten stehen als globale Parameter, die Gaskonstanten als globale Variablen im Modul CDMC zur Verfügung und werden in allen Programmteilen konsistent genutzt.
- Ebenso wurden die molaren Massen der Arbeitsmedien an aktuelle Werte aus /LIN 97/ bzw. /WEB 21/ angepasst. Die Werte von Wasser sind einer Empfehlung der IAPWS /IAP 20/ entnommen. Die Werte stehen als globale Parameter im Modul CDPR zur Verfügung.
- Die spezifische Gaskonstante wird aus der idealen Gaskonstante und der molaren Masse für Gas berechnet.
- Die Viskosität von Helium wird nicht mehr aus der von Wasserstoff abgeleitet, sondern durch eine eigene Korrelation, entnommen aus der MATPRO-Bibliothek von SCDAP/RELAP 3.3 /SIE 01/, bestimmt.
- Die nicht-kondensierbaren Gase CO und CO₂ können vom Nutzer aktiviert werden, indem unter dem CW MULTICOMP als Variable AGAS die Werte CO bzw. CO2 vorgegeben werden. Wärmeleitfähigkeit und Viskosität werden nach dem Verfahren im COCOSYS Reference Manual /KLE 00/ bestimmt. Dabei wurden die Varianten ohne thermische Dissoziation implementiert, weil dieser Effekt für die anderen nicht-kondensierbaren Gase in ATHLET – und die Arbeitsfluide – vernachlässigt wird.

Alle Werte und Formeln sind in ATHLET Models and Methods ab Version 3.3 dokumentiert.

Die Änderungen wurden verifiziert, der dazu verwendete Verifizierungsdatensatz steht für Continuous Integration zur Verfügung. Die Verifikation zeigte auch, dass das Mischungsmodell nach Wilke /SIE 01/, /HÖH 72/ korrekt implementiert ist. Die ATHLET-Eingabedatensatzbeschreibung ab ATHLET 3.3 wurde aktualisiert.

Insbesondere die Änderungen bei der Berechnung der physikalisch korrekten spezifischen Gaskonstante für Stickstoff und auch Wasser können Auswirkungen auf den Verlauf von Simulationen haben, bei denen es zu heftigen Zwischenphasenprozessen (z. B. Kondensationsschlägen) kommt. Auch wenn sich im Einzelfall Simulationsergebnisse verschlechtern können, erlauben die neuen Werte eine konsistentere Berechnung des Systemverhaltens.

Weiterer Verbesserungsbedarf zum Themenkomplex nicht-kondensierbare Gase, der im Zuge der oben beschriebenen Arbeiten erkannt wurde, betrifft insbesondere die folgenden Punkte:

- Konsistente Berücksichtigung der Druckabhängigkeit der Stoffwerte.
- Verbesserung der Performance des Codes (Rechengeschwindigkeit) bei der Simulation nicht-kondensierbarer Gase. Hier erlauben ggf. programmiertechnische Verbesserungen einen Performancegewinn.
- Verbesserung des Transports von geringen Mengen nicht-kondensierbarer Gase und Begrenzung numerischer Diffusion. Ein möglicher Ansatz könnte sein, sehr geringe Mengen von nicht-kondensierbaren Gasen ohne Rückwirkung auf die Thermohydraulik als Blasen zu transportieren. Verbesserungen sind u. a. auch deswegen notwendig, da sehr geringe Mengen von nicht-kondensierbaren Gasen derzeit aus einem Kontrollvolumen nicht abtransportiert werden, dadurch das betreffende Volumen aber zeitschrittweiten-limitierend werden kann. Dies ist insbesondere ein Problem, wenn solche geringen Mengen nicht-kondensierbarer Gase in mit Flüssigkeit gefüllten CVs etabliert werden. Das Fehlen eines Modells zur Lösung dieser Restgase in der Flüssigkeit führt dazu, dass die entsprechenden Gasanteile im CV langfristig bestehen und die Rechnung ausbremsen können.

- Verbesserung der Zwischenphasenmodelle mit Berücksichtigung des Effekts nicht-kondensierbarer Gase. Hier sind besser an Strömungskarten und Zwischenphasenfläche angepasste Modelle sinnvoll.
- Verbesserte Interaktion der Modelle in ATHLET und ATHLET-CD (SAFT) zum Transport nicht-kondensierbarer Gase. Hier wäre ein konsistentes Transportmodell hilfreich.

5.4 Wärmeübergang

5.4.1 Vertikale Wärmetauscherrohrbündel

Im ATHLET Entwicklungsvorhaben RS1548 wurde eine ATHLET-Entwicklerversion erstellt, die drei neue Wärmeübergangskorrelationen für die Kondensation innerhalb vertikaler Rohre beinhaltet. Dies war notwendig geworden, da Nachrechnungen von Experimenten der PERSEO-Testanlage mit einem Isolation Condenser mit vertikalen Wärmeübertragerrohren gezeigt hatten, dass mittels der in ATHLET vorgesehenen Korrelationen für den Wärmeübergang durch Kondensation (Nusselt/Carpenter und Colburn) die Leistung des Wärmeübertragers um bis zu 22,5 % unterschätzt wird. Durch die neuen Korrelationen sinkt die Differenz auf nur noch 5 – 10 % (basierend auf der experimentell bestimmten Leistung).

Bei den Korrelationen handelt es sich um Modelle nach Nusselt, Kutateladze und Chen, die auf Basis der Reynoldszahl der Wasserphase den Massen- und Energieübergang an einem laminaren, welligen bzw. turbulenten Film unterscheiden /PAP 10/.

$$\begin{aligned}
 &htC_{Film} = \\
 &\left\{ \begin{array}{ll}
 \lambda_L \cdot \left[\frac{(\mu_L/\rho_L)^2}{g} \right]^{-1/3} \cdot 1.1 \cdot Re_L^{-1/3} \cdot \frac{T_S - T_W}{T_V - T_W} & \text{für } Re_L < 30 \\
 \lambda_L \cdot \left[\frac{(\mu_L/\rho_L)^2}{g} \right]^{-1/3} \cdot 0.756 \cdot Re_L^{-0.22} \cdot \frac{T_S - T_W}{T_V - T_W} & \text{für } 30 < Re_L < Re_{tr} \\
 \lambda_L \cdot \left[\frac{(\mu_L/\rho_L)^2}{g} \right]^{-1/3} \cdot 0.00402 \cdot Re_L^{0.4} \cdot Pr_L^{0.65} \cdot \frac{T_S - T_W}{T_V - T_W} & \text{für } Re_L < Re_{tr}
 \end{array} \right. \quad (5.8)
 \end{aligned}$$

mit $Re_{Tr} = 4658 \cdot Pr_L^{-1.05}$.

Bei Filmkondensation in einem vertikalen Rohr bildet sich zunächst ein laminarer Wasserfilm aus. In diesem Bereich nimmt der Wärmübergang mit steigender Filmdicke ab. Im weiteren Verlauf kommt es zur Bildung kleinerer Wellen. Obwohl auch hier der Wärmübergang mit steigender Filmdicke abnimmt, wird er durch die durch die Wellen eingetragene Turbulenz verstärkt. Wird der Film vollständig turbulent, verstärkt sich der Wärmübergang durch die Durchmischung des Wasserfilms und sinkt nicht mehr ab. Die drei Korrelationen wurden zunächst derart in ATHLET implementiert, als dass sie parallel zu den schon vorhandenen Korrelationen ausgewertet werden. Die Auswahllogik des maximalen Wärmeübergangskoeffizienten wurde durch die neuen HTC-Werte ergänzt.

Die Verifikation der Wärmeübergangskorrelationen erfolgte anhand der PERSEO-Versuchsanlage, die mit einem 120 vertikale Rohre umfassenden Bündel, das von oben nach unten durchströmt wird, ausgestattet ist /FER 02/, /BUC 19/. Abb. 5.7 zeigt Ergebnisse zu PERSEO Test 7 Part 1. Mit der erweiterten Modellierung kann ATHLET die gemessene Wärmeübertragerleistung deutlich besser nachbilden. Der entsprechende Wärmeübergangskoeffizient, der bei der neuen Modellierung entlang des Rohres mit wachsender Filmdicke und steigender Filmturbulenz variiert, ist in Abb. 5.8 dargestellt.

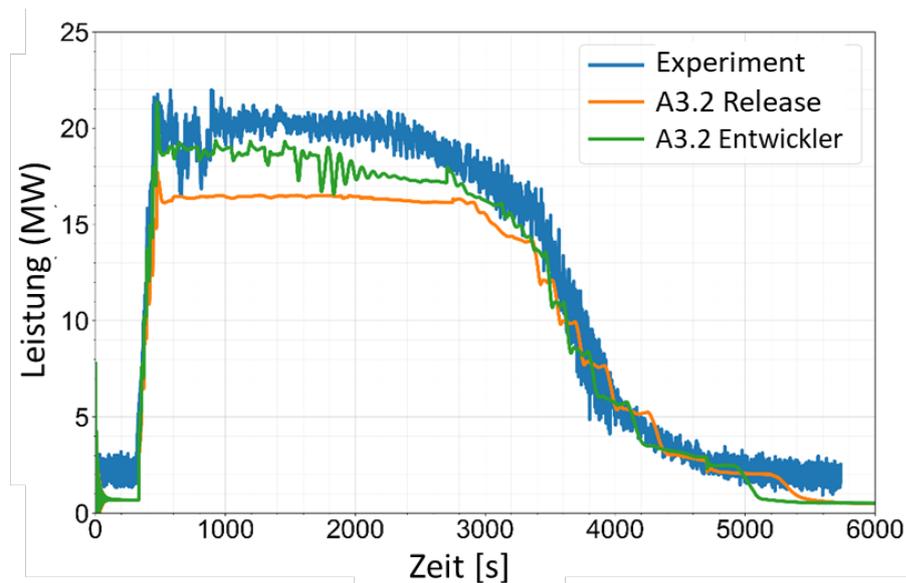


Abb. 5.7 Gemessene und berechnete Wärmeübertragerleistung (grüne Kurve: mit neuen Modellen zur Filmkondensation)

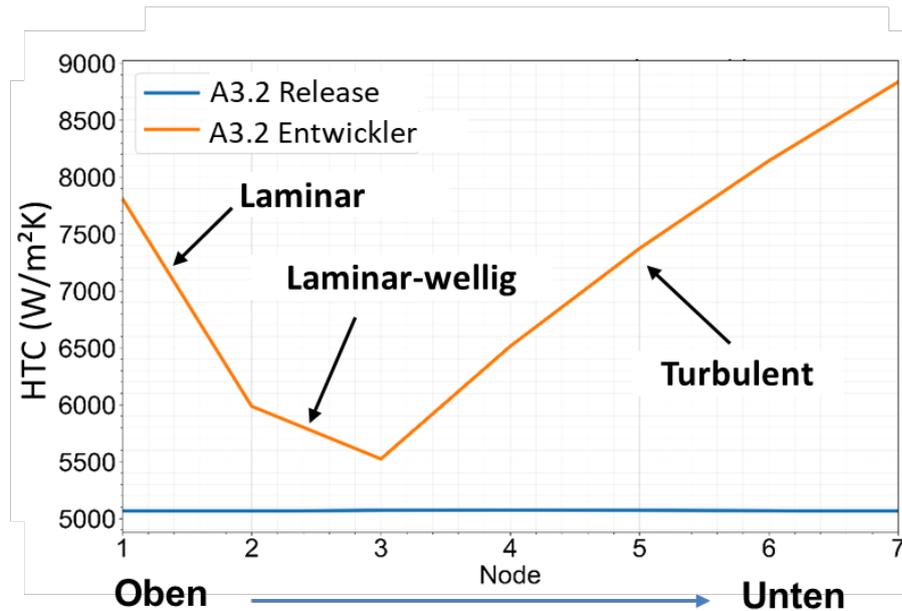


Abb. 5.8 Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten entlang der Filmströmung von oben nach unten

Da zur Verifikation und Validierung aber nur zwei Experimente der PERSEO-Anlage zur Verfügung standen, wurde entschieden, die Auswahl der neuen Korrelationen zunächst dem ATHLET-Anwender zu überlassen, bis die Validierungsbasis breiter ist. Die Korrelationen können nun vom Anwender über den Eingabeparameter $I_{HTC4L/R}$ im HECU-Modul entweder global oder auch nur für spezielle HCOs aktiviert werden. Die Funktionsfähigkeit der so erzeugten ATHLET-Version wurde getestet und mit den vorangegangenen Rechnungen verglichen. Es wurden keine Abweichungen festgestellt. Daher wurden die oben genannten Änderungen in die Hauptentwicklungslinie von ATHLET übernommen.

Weiterhin wurde ein PERSEO-Versuch in die Continuous Integration Umgebung eingepflegt, um eine fortwährende Validierung von ATHLET bezüglich des Wärmeübergangs durch Kondensation innerhalb vertikaler Rohre zu gewährleisten.

5.4.2 Weitere Korrelationen für Wärmeübergang und Bündelfaktor

ATHLET beinhaltet eine Bündelfaktor-Korrelation nach Inayatov /INA 75/, mittels derer dem im Vergleich zu einem Einzelrohr erhöhte Wärmeübergang innerhalb eines Brennstabbandels Rechnung getragen wird. Die bisherige Implementierung berücksichtigte lediglich quadratische Brennstabanordnungen. Zur genaueren Berechnung des

Wärmeübergangs in hexagonalen Brennstabbündeln wurde ATHLET erweitert und eine für hexagonale Stabanordnungen angepasste Korrelation nach Inayatov implementiert /INA 75/. Im Eingabedatensatz wurde für den Anwender die Möglichkeit eingerichtet, die Geometrie des abgebildeten Stabbündels, quadratisch oder hexagonal, zur Berechnung des Wärmeübergangs zu spezifizieren.

Anfang des Jahres 2020 fand ein wissenschaftlicher Austausch zwischen der GRS und dem Kurchatov-Institut zur Simulation des Wärmeübergangs in hochbelasteten WWER-Bündeln (Abb. 5.9) im Einphasen- und Siedebereich statt. ATHLET überschätzt die Wandtemperaturen insbesondere am Bündelaustritt deutlich. Vor diesem Hintergrund wurde eine detaillierte Analyse des simulierten Wärmeübergangs durchgeführt. Die Analysen können bisher jedoch nicht abschließend bewertet werden, da einerseits der GRS nicht die vollständigen Anlagen- und Versuchsdaten vorliegen und andererseits der Wärmeübergang insbesondere in Austrittsnähe möglicherweise von sehr effektiven und in vergleichsweise kurzen Abständen montierten Abstandhaltern beeinflusst wird. Der Effekt der Abstandshalter auf den Wärmeübergang kann in der aktuellen ATHLET-Version nicht berücksichtigt werden (allerdings sind hierzu Arbeiten im Nachfolgevorhaben geplant), daher wurde der Einfluss der Abstandsgitters nicht weiter untersucht. Stattdessen wurden in ATHLET verschiedene Siedekorrelation und Gleichungen für den Bündelfaktor, der den im Vergleich zu einem Einzelrohr erhöhten Wärmeübergang im Bündel erfasst, getestet und ein besseres Ergebnis zu erzielen.

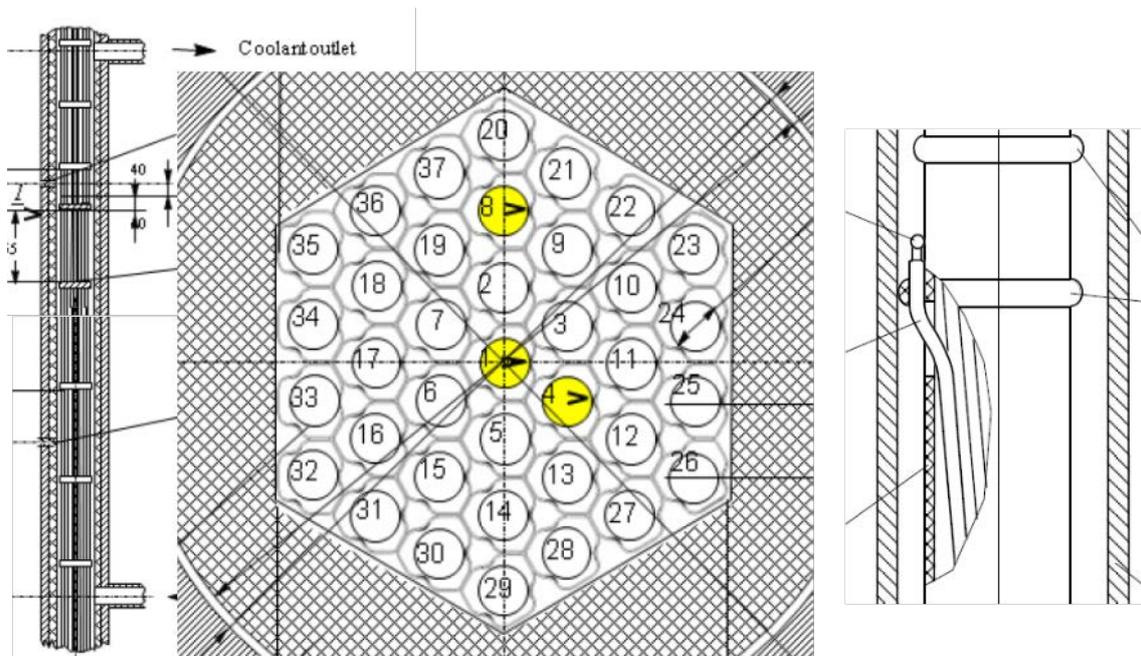


Abb. 5.9 Schematische Darstellung der Kurchatov-Institut-Teststrecke /OLE 13/

Eine Analyse der vom Kurchatov-Institut vorgelegten Simulationsergebnisse ergab, dass die mit der aktuellen Programmversion ATHLET 3.2 erzielten Resultate eine bessere Übereinstimmung sowohl in der einphasigen Zwangskonvektion als auch im unterkühlten/gesättigten Siedebereich liefern als ältere Ergebnisse mit ATHLET-Version 3.1A. Ursächlich ist die Einbeziehung des Bündelfaktors nach Inayatov für die Dittus-Boelter-Korrelation ab der Version ATHLET 3.2. Da aber nach wie vor Diskrepanzen zwischen Experiment und Simulation zu beobachten sind (Abb. 5.10), wurden als mögliche ATHLET-Verbesserung Bündelfaktorkorrelationen nach Inayatov /INA 75/, Weisman /WEI 59/, Presser /MAS 20/ und Markoczy /MAR 72/ getestet. Es wurde festgestellt, dass die Inayatov- und Weisman-Formeln die beste Übereinstimmung mit dem KI-Experiment liefern, an dieser Stelle also keine weitere Code-Verbesserung notwendig ist /WON 20c/.

Wie Abb. 5.10 verdeutlicht, werden für unterkühltes/gesättigtes Sieden die größten Diskrepanzen sowohl für die ATHLET 3.1A als auch für die 3.2 Version gefunden. Dies kann möglicherweise auf ein Verlassen des validen Bereichs für die Chen-Korrelation /CHE 66/ bei hohem Druck zurückgeführt werden. Die Chen-Korrelation wurde aus Daten bis zu 3,6 MPa abgeleitet, was weit von dem aktuellen Experiment mit 15 MPa entfernt ist. Eine weitere mögliche Fehlerquelle kann aus Nicht-Anwendbarkeit der Formel für den Suppression-Faktor in der Chen-Korrelation resultieren. In /COL 96/ wird erwähnt, dass der Suppressionsfaktor auf 1 gesetzt werden sollte (d. h. kein Suppressionseffekt), wenn ein vertikales Bündel simuliert wird. Es ist nach dem derzeitigen Forschungsstand jedoch nicht eindeutig geklärt, ob ein Suppressionseffekt bei Rohrbündeln existiert. Für ATHLET 3.2 wird eine bessere Übereinstimmung mit dem KI-Experiment erzielt, wenn der Suppressionsfaktor im Quellcode auf 1 gesetzt wird. Da jedoch die Erkenntnis, den Unterdrückungsfaktor auf 1 zu setzen, nur auf einigen wenigen Experimenten basiert, die im Wesentlichen alle vom gleichen Autor mitgeteilt wurden, fehlt die physikalische Grundlage für eine generelle Programmänderung /STE 92/. Die weiteren Analysen konzentrierten sich daher auf eine neue Wärmeübergangskorrelation für das unterkühlte bzw. gesättigte Sieden als Ersatz für die Chen-Korrelation bei hohem Druck. Es hat sich herausgestellt, dass mit der Liu-Winterton-Korrelation /LIU 91/ eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit dem KI-Experiment erzielt wird (Abb. 5.10). Die im Experiment gemessenen Oberflächentemperaturen, die bei Annäherung an Sättigungsbedingungen im Fluid aufgrund des verbesserten Wärmeübergangs wegen Siedens nur noch wenig ansteigen, werden gut reproduziert. Allerdings findet die Liu-Winterton-Korrelation in der Literatur nur vereinzelt Erwähnung und weist teilweise deutliche

Unterschiede zur Chen-Korrelation auf, die sich für viele Anwendungen in der Vergangenheit bewährt hatte. Daher wurde die Liu-Winterton-Korrelation in ATHLET zunächst als Option implementiert, die durch den Anwender im Eingabedatensatz bei Bedarf (bspw. für eine weitergehende Validierung) aktiviert werden kann.

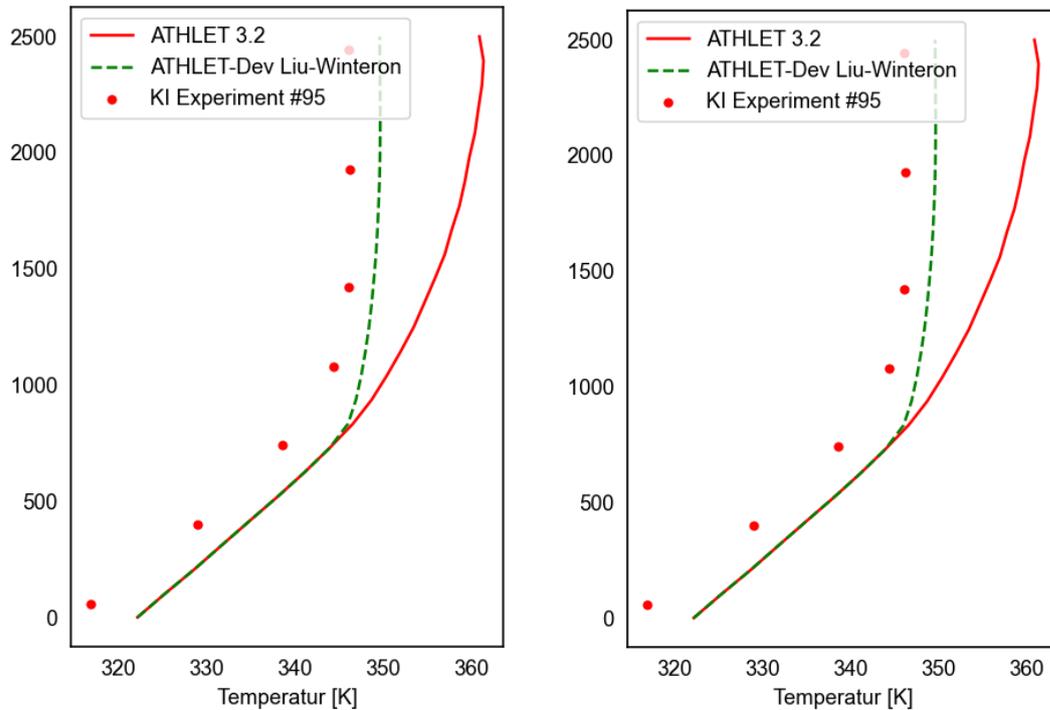


Abb. 5.10 Axiale Verteilung der Oberflächentemperatur für Test #95 der Kurchatov-Institut-Versuchsanlage /WON 20c/

Im Zuge der Prüfung und Erweiterung des Wärmeübergangs wurden ebenfalls verschiedene, neue Wärmeübergangskorrelationen für den einphasigen, konvektiven Wärmeübergang an die Flüssigkeitsphase implementiert. Neben der standardmäßig in ATHLET genutzten Dittus-Boelter-Korrelation /DIT 30/ können nun vom Anwender optional die Sieder-Tate- /SIE 36/ sowie die Gnielinski-Korrelation /GNI 75/ ausgewählt werden.

Aus der Literatur ist bekannt, dass Dittus-Boelter den Wärmeübergang in engen Kühlkanälen, wie sie z. B. in Forschungsreaktoren zu finden sind, bei niedrigen Drücken und hohen Geschwindigkeiten deutlich unterschätzt /GHI 16b/. Die Korrelation nach Sieder und Tate berücksichtigt den großen Temperaturunterschied zwischen wandnahe Fluid und Fluid im Bulk durch Einführung eines Viskositätsverhältnisses, was bei hohen Wärmestromdichten bessere Ergebnisse liefert. Die Gnielinski-Korrelation bietet durch

Modifikation des Druckverlustbeiwerts, der in die Korrelation eingeht, die Möglichkeit, an die jeweils vorliegende, spezifische Geometrie angepasst zu werden. Beide Korrelationen zeigten jedoch sowohl für die Nachrechnungen der Kurchatov-Institut-Experimente als auch für die Analysen zu Forschungsreaktoren (Kapitel 3) nur einen untergeordneten Einfluss.

5.4.3 Fluid-Referenztemperatur für den zweiphasigen Wärmeübergang

Bei Simulationen eines Brennelement-Lagerbeckens mit ATHLET-CD kam es immer wieder zu starker Überhitzung der Flüssigkeitsphase von Wasser. Zahlreiche Simulationen wurden deshalb abgebrochen, nachdem der Gültigkeitsbereich der Stoffwertapproximation überschritten worden war. Die Probleme traten immer dann auf, wenn bei sehr heißer Oberfläche der Brennstäbe ($\sim 1.000\text{ °C}$) und niedrigem KM-Druck ($\sim 1\text{ bar}$) kleine Flüssigkeitsmengen in CVs mit heißem Dampf einströmten.

Eine tiefergehende Analyse hat gezeigt, dass ursächlich für das Problem die Art der Berechnung der mittleren Fluidtemperatur für den Wärmeübergang auf Basis des Massendampfgehaltes war. Dies führt zu einer sehr schnellen Absenkung der mittleren Fluidtemperatur schon bei geringem Wasseranteil und damit zu hohen Wärmeströmen zwischen Wand und Fluid ($T_{\text{Wand}} \gg T_{\text{Fluid}}$). Da $T_{\text{Dampf}} > T_{\text{Wand}} > T_{\text{Flüssigkeit}}$ war, wurde der gesamte Wärmestrom der Flüssigkeit zugeführt.

Für Wandtemperaturen oberhalb der Leidenfrost-Temperatur kann die Oberfläche in der Realität jedoch nicht benetzt werden. Somit kann kalte Flüssigkeit sich nicht unmittelbar auf den Wärmetransport Wand – Fluid auswirken. Dem wird in ATHLET nun dadurch Rechnung getragen, dass für $T_{\text{WAND}} > T_{\text{LEID}} + 100\text{ K}$ eine dampfvolumengehaltsgewichtete mittlere Fluidtemperatur berechnet wird. Zwischen $T_{\text{LEID}} + 100\text{ K}$ und T_{LEID} findet ein stetiger Übergang zwischen einer dampfvolumengehalts- und einer massendampfgehaltsgewichteten Berechnung der mittleren Fluidtemperatur statt. Diese Modelländerung wurde analog auch in ATHLET-CD vorgenommen. Mit der Programmmodifikation konnten die Simulationen problemlos durchgeführt werden.

5.4.4 Rückkehr vom Übergangssieden zum Blasensieden

Im Rahmen von Anlagenrechnungen zu Kühlmittelverluststörfällen wurde festgestellt, dass unter bestimmten Umständen einzelne Wärmeleitvolumen trotz ausreichender Kühlung des Reaktorkerns leicht erhöhte Wandtemperaturen zeigen können. Eine genaue Analyse des Phänomens hat ergeben, dass das Wärmeübergangsregime für diese Volumen z. B. aufgrund kurzzeitig stagnierender Strömung vom Blasensieden in den

Bereich des Übergangssiedens gewechselt hatte, ohne jedoch den Zustand des Filmsiedens zu erreichen, d. h. ohne dass die Wandtemperatur die minimale Filmsiedetemperatur überschritten hätte. Trotz anschließend wieder verbesserter Kühlung konnte jedoch erst nach mehreren hundert Sekunden wieder der Zustand des Blasensiedens erreicht werden. Die Implementierung in ATHLET wurde nun derart geändert, dass ein schnelleres Wiederbenetzen nach Überschreiten der kritischen Heizflächenbelastung (und ohne Erreichen des Filmsiedens) möglich ist.

5.5 Weitere Etablierung von AC²

5.5.1 Kopplung mit COCOSYS

ATHLET Wärmeleitobjekte (HCOs) können mit COCOSYS Wärmeleitobjekten gekoppelt werden, so dass es möglich ist, den Wärmeaustrag des Kühlkreises in das Containment gekoppelt mit ATHLET-COCOSYS zu berechnen: ATHLET simuliert den Kühlkreislauf, die Wärmeströme gehen über die Wärmeleitobjekte vom ATHLET- in das COCOSYS-Rechengebiet und heizen das Containment auf. Allerdings war das Erstellen einer solchen Kopplung im Datensatz durch den Anwender bisher sehr aufwändig und fehleranfällig, da die Wärmeströme über GCSM-Signale gekoppelt wurden und die Zuordnung der gekoppelten Kontrollvolumen "händisch" erfolgen musste.

Diese Kopplung der Wärmeströme besitzt im Prinzip das Potential, auch kompliziertere Vorgänge als den Wärmeeintrag vom Kühlkreislauf in das Containment zu simulieren. Im Containment befinden sich bei fortschrittlichen Reaktoren sogenannte Gebäudekondensatoren, die auf ihrer Außenseite den Dampf im Containment kondensieren. Von innen sind die Kondensatoren zumeist von Wasser durchströmt, das aus einem Kühlwasserbecken in die Kondensatorrohre fließt. Diese durchströmten Kondensatorrohre können gut mit ATHLET simuliert werden, wohingegen das Verhalten der Dampfatmosfera auf der Außenseite am besten mit COCOSYS abgebildet werden sollte. Um diese gekoppelte Simulation einfach zu ermöglichen, wurde im Eingabedatensatz von ATHLET als Randbedingung für die Wärmeleitobjekte die Option "COCOSYS" geschaffen. Damit wird automatisch die Fluidtemperatur und der Wärmeübergangskoeffizient auf der Außenseite der zugehörigen HCO-Kontrollvolumen von COCOSYS (oder ggf. auch von einem anderen externen Code) übernommen. Der berechnete Wärmestrom wird von ATHLET an COCOSYS geliefert. Damit die Zuordnung der ATHLET-HCOs zu den COCOSYS-HCOs automatisch, d. h. ohne weitere Nutzereingabe, funktioniert,

werden die notwendigen Geometriedaten ebenfalls automatisch für COCOSYS bereitgestellt. Durch diese Entwicklungsarbeiten konnte die Kopplung über Strukturen von ATHLET bzw. ATHLET-CD mit COCOSYS innerhalb des AC²-Pakets für den Anwender deutlich vereinfacht werden.

Hinsichtlich der Kopplung von ATHLET mit COCOSYS bei einer Lecksimulation besteht die Möglichkeit, die Entwicklung der Leckbildung wie auch der zeitlich veränderlichen Leckquerschnittsfläche dynamisch zu berücksichtigen. Eine allgemeine Schnittstelle auf Basis eines Plug-ins zur Kopplung der strukturemechanischen Berechnung ist über GCSM verfügbar. Die Einbindung des CDR1D-Modells zur Simulation einer kritischen Ausströmung ist optional möglich. Zur Simulation des strukturemechanischen Verhaltens können über die Schnittstelle entsprechende Modelle zur Berechnung der aktuellen Leckgeometrie eingebunden werden, z. B. aus dem GRS-Programm WinLeck.

5.5.2 Neues Wasser-Dampf-Stoffwertpaket

Die Hochschule Zittau-Görlitz (HSZG) hat in einem eigenen Projekt (SBRS-AC² – Schnelle Berechnung realer Stoffeigenschaften in ATHLET nach den neuesten Standards der IAPWS) eine neue Bibliothek LIBSBTL95 für die Berechnung der Stoffwerte für Wasser/Dampf speziell für ATHLET entwickelt /KRE 20/. ATHLET benötigt Stoffwerte wie Enthalpie, Dichte, Sättigungstemperatur etc. in Abhängigkeit von Druck und Temperatur und zusätzlich, aber nur an wenigen Stellen im Programm, auch abhängig von Druck und Enthalpie. Die neue von HZDR erstellte Stoffwertbibliothek berechnet die Stoffwerte ähnlich wie das bisherige Stoffwertpaket durch eine zweidimensionale Spline-Interpolation. Die notwendigen Spline-Koeffizienten wurden vorher ermittelt und in der Bibliothek als Tabellen gespeichert. Gegenüber der bisherigen Stoffwertbibliothek enthält die neue einige Verbesserungen:

- Die Anzahl der Stützstellen der hinterlegten Koeffiziententabellen wurde deutlich erhöht, wodurch die Stoffwerte genauer approximiert werden.
- Der Gültigkeitsbereich wurde vergrößert, so dass eine sehr genaue Stoffwertberechnung auch bei niedrigen (im Bereich des Normaldrucks) und sehr niedrigen Drücken weit unter Normaldruck möglich ist.
- Die Datenbasis für die neue Stoffwertbibliothek SBTL95 ist der IAPWS-95 Standard, der als die genaueste momentan verfügbare Formulierung der Stoffeigenschaften von Wasser gilt /IAP 18/.

- Der rechenaufwändige Suchalgorithmus, der bisher notwendig war, um für ein konkretes Wertepaar von Druck und Temperatur die zugehörigen Stützstellen der Tabellen zu bestimmen ist bei der SBTL95 nicht mehr notwendig. Hier wird eine Abbildung bestimmt, die die nicht äquidistant verteilten Stützstellen der Tabellen auf ein gleichverteiltes Gitter abbildet. Mit diesem Gitter und der Abbildungsvorschrift können die für ein konkretes Wertepaar von Druck und Temperatur notwendigen Stützstellen direkt berechnet werden. Die aufwändige Suche entfällt.

Die GRS hat die LIBSBTL95 übernommen, auf den neuen Buildmechanismus (CMake) von AC²/ATHLET umgestellt und in den ATHLET Buildmechanismus integriert. Weiter wurden die Änderungen, die HSZG an ATHLET zum Aufruf der SBTL95 vorgenommen hat, überprüft und getestet. Dazu wurde eine Erweiterung von ATHLET entwickelt, die automatisch Stoffwerte berechnet und in Form von csv-Tabellen ausgibt. Mithilfe eines Python-Programmes können dann die von der SBTL berechneten Stoffwerte mit den bisherigen Standard-Werten von ATHLET verglichen werden. Als Beispiel ist in Abb. 5.11 ein Vergleich der Standard-ATHLET-Stoffwertberechnung und der neuen SBTL95 gezeigt. Deutlich zu sehen ist die Abweichung bei Drücken unter 1 bar. Dieser Druckbereich ist zum Beispiel für die Simulation von passiven Systemen wie bspw. Wärmerohren, die für die Kühlung von Lagerbecken entwickelt werden, wichtig. Der niedrige Druckbereich stand bei den „klassischen“ Einsatzgebieten (DWR und SWR) von ATHLET weniger im Fokus, weshalb die bisherige Implementierung für diese Anwendungen ausreichend genau, gleichwohl aber verbesserungsfähig war.

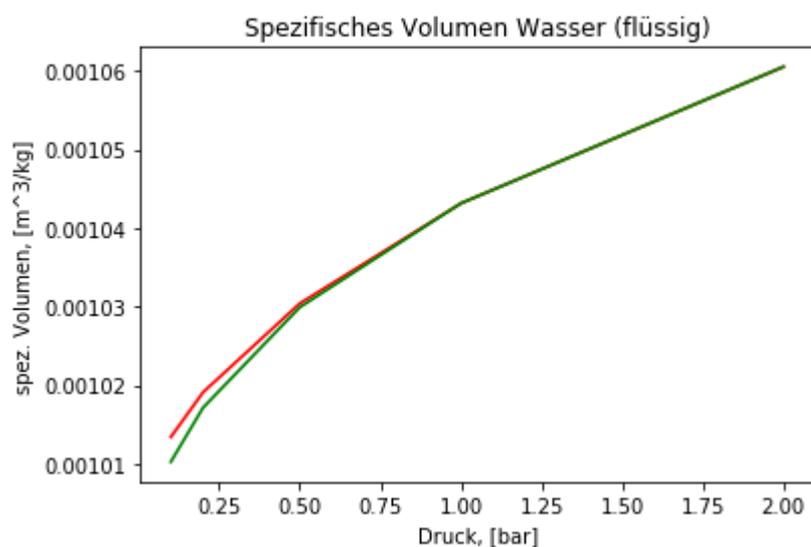


Abb. 5.11 Vergleich des spezifischen Volumens von Wasser, berechnet mit Standard-ATHLET (rot) und SBTL95 (grün)

5.5.3 Kopplung alternativer Stoffwertbibliotheken

In Testanlagen werden aus Skalierungsgründen teilweise spezielle Kühlmittel wie R134a verwendet. Aber auch für die Verwendung in Kühlsystemen in Realanlagen sind solche Kühlmittel geplant. Damit ATHLET in solch einem Fall einfach um die entsprechenden Stoffwerte erweitert werden kann, wurde ein Plugin "fluidprops_external" implementiert, mit dem Stoffwerte von extern (z. B. durch eine separate Bibliothek) an ATHLET geliefert werden können. Aktuell wurde beispielhaft die freie Bibliothek Coolprop auf diese Weise an ATHLET angekoppelt. Über dieses Plugin wird auch z. B. die Anbindung von Refprop, einer der wichtigsten Bibliotheken für die Stoffwertberechnung von Fluiden, an ATHLET möglich. Die Implementierung des Plugins hat momentan einen alpha-Status erreicht und bedarf noch weiterer Entwicklungs- und vor allem Validierungsarbeiten.

6 Modellertüchtigungen und Anwenderfreundlichkeit

6.1 GCSM – Signalreihenfolge

6.1.1 Modell zur optimierten Anordnung der GCSM-Signalreihenfolge im ATHLET-Datensatz

Die Aufgabenstellung dieses Arbeitspunkts beinhaltete die Entwicklung eines Modells zur optimierten Anordnung der GCSM-Signalreihenfolge im ATHLET-Datensatz. Die Notwendigkeit für eine nachträgliche Reorganisation der Signalreihenfolge erwächst aus dem Sachverhalt, dass aufgrund des hohen Vernetzungsgrades und der für gewöhnlich großen Anzahl an GCSM-Signalen eine adäquate bzw. optimale Anordnung der Signale im Datensatz durch den Nutzer nur mit erheblichem Aufwand realisierbar ist. Eine GCSM-Signalreihenfolge kann als optimiert betrachtet werden, wenn zu jedem Aktualisierungszeitschritt der aktuell errechnete Wert eines GCSM-Signals auf der Basis bereits ermittelter Signalwerte bestimmt wird (Rückwärtsreferenz) und somit keine Vorwärtsreferenz auf nachfolgende Signale, d. h. noch nicht aktualisierte Signalwerte erfolgt.

6.1.2 Vorliegende Struktur des GCSM-Eingabeblocks in ATHLET

Der GCSM-Eingabeblock lässt sich in zwei Teilgruppen unterteilen. Die erste Gruppe beinhaltet den Typus GCSM-Prozess-Signale, der zur Einbindung von Messgrößen aus anderen ATHLET-Modellen (TFO, HCO u. a.) dient. Die Werte dieser Messgrößen können zum Zeitpunkt der GCSM-Signalwertberechnung als bekannt bzw. aktualisiert angesehen werden, so dass diese Signale generell keine Vorwärtsreferenz aufweisen.

Die zweite Gruppe umfasst die Signale vom Typus GCSM-Regler, die zur Bestimmung der Steuersignale dienen. Dieser Signaltyp kann bis zu 20 Eingangsgröße, d. h. verschiedene GCSM-Signale, umfassen, die zur Ermittlung des zu bestimmenden Steuerwertes verwendet werden. In Abhängigkeit von der Anordnung der einzelnen Eingangsgrößen im Datensatz können hierbei Vorwärtsreferenzen auf noch nicht aktualisierte Eingangssignale auftreten.

Eine zusätzliche Unterteilung der zweiten Gruppe (GCSM-Regler) ist durch sog. Blöcke gegeben, denen eine beliebige Anzahl an GCSM-Reglern zugeordnet werden können. Neben der nutzerseitigen Unterstützung bei der aufgabenspezifischen Strukturierung unterschiedlicher GCSM-Regler ist die Funktion der einzelnen Blöcke im Wesentlichen

durch die Festlegung des Aktualisierungszeitpunktes und der Aktualisierungsfrequenz der jeweils enthaltenen GCSM-Regler gekennzeichnet.

Die Aufgabenstellung des nachfolgenden Modellentwurfs besteht darin:

- Die vorliegende Netzwerkarchitektur der GCSM-Signale zu erfassen
- Die Anordnung der GCSM-Signale im Datensatz derart zu gestalten, dass Vorwärtsreferenzen unterbunden werden.

Bezüglich des letzten Punktes ist zu ergänzen, dass innerhalb des GCSM-Netzwerkes von ggf. geschlossenen Steuer-Regel-Kreisläufen auszugehen ist. In diesem Fall ist eine eindeutige Zuweisung in Vor- bzw. Rückwärtsreferenz nicht möglich, so dass diese Kreisläufe gesondert behandelt und geeignet aufgetrennt werden.

6.1.3 Modellentwurf

Für die programmtechnische Implementierung des GCSM-Netzwerkes werden die einzelnen GCSM-Signale innerhalb eines objektorientierten Ansatzes beschrieben. Neben dem eindeutigen Signalnamen (Objekt-Name) wird für jedes Objekt zusätzlich die Information über die Eingangsgröße (**Vorgänger**) erfasst (max. 20 Signale). Zusätzlich enthält jedes Objekt die Information über sämtliche Signale, für welche dieses Signal als Eingangsgröße verwendet wird (**Nachfolger**). Mit diesem Ansatz ist in jedem GCSM-Signal-Objekt die Information über die partiellen Vorwärts- und Rückwärtsreferenzen bzw. Vorgänger und Nachfolger hinterlegt.

Eine vereinfachte, exemplarische Darstellung der GCSM-Netzwerkstruktur mit zugehörigen Vor- und Rückwärtsreferenzen ist durch Abb. 6.1 gegeben. In dieser Matrixdarstellung werden in der ersten Zeile die GCSM-Signalnamen in der Reihenfolge ihres Auftretens im Datensatz aufgetragen. In der ersten Spalte (links) wird die aktuelle Reihenfolgenummer des Signalnamens festgehalten und in der Diagonalen der zugehörige GCSM-Operator (z. B. SWITCH, ADDER, FUNGEN) notiert. In den jeweiligen Spaltenvektoren werden zusätzlich die jeweiligen Eingangssignale (Vorwärtsreferenzen (rot), Rückwärtsreferenzen (blau)) durch Punkte dargestellt. Eine optimale Reihenfolge der Signale ist erreicht, wenn im oberen Dreieck keine Eingangssignale (Vorwärtsreferenzen) vorhanden sind, so dass beim Durchlaufen der GCSM-Nummern die einzelnen Signale ausschließlich durch bereits aktualisierte Eingangssignale bestimmt werden.

Vorwärtsreferenz

		GCSM -Signalname									
		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
GCSM-Nummer	1	OP1									
	2		OP2								
	3			OP3							
	4				OP4						
	5					OP5					
	6						OP6				
	7							OP7			
	8								OP8		
	9									OP9	
	10										OP10

Rückwärtsreferenz

Abb. 6.1 Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur mit Vor- und Rückwärtsreferenz

Beispiel: In der Abb. 6.1 sind beispielhaft für Signal-Name S9 die zugehörigen vier Eingangssignale S3, S5, S6 und S7 zusätzlich durch blaue Pfeile dargestellt. Die Aktualisierung dieser Signale geschieht beim Durchlaufen der GCSM-Karte vor der Signalwertbestimmung von S9. Im Gegensatz hierzu wird der Wert des Signals S4 vor der Aktualisierung des zugehörigen Eingangssignals S7 realisiert, so dass für Signal S4 eine Umpositionierung in der GCSM-Reihenfolge durchzuführen ist. Eine optimierte Anordnung der Signale für diesen Fall ist in Abb. 6.2 dargestellt. Das Signal S4 wurde hierbei von der Position 4 an die Position 7 verschoben.

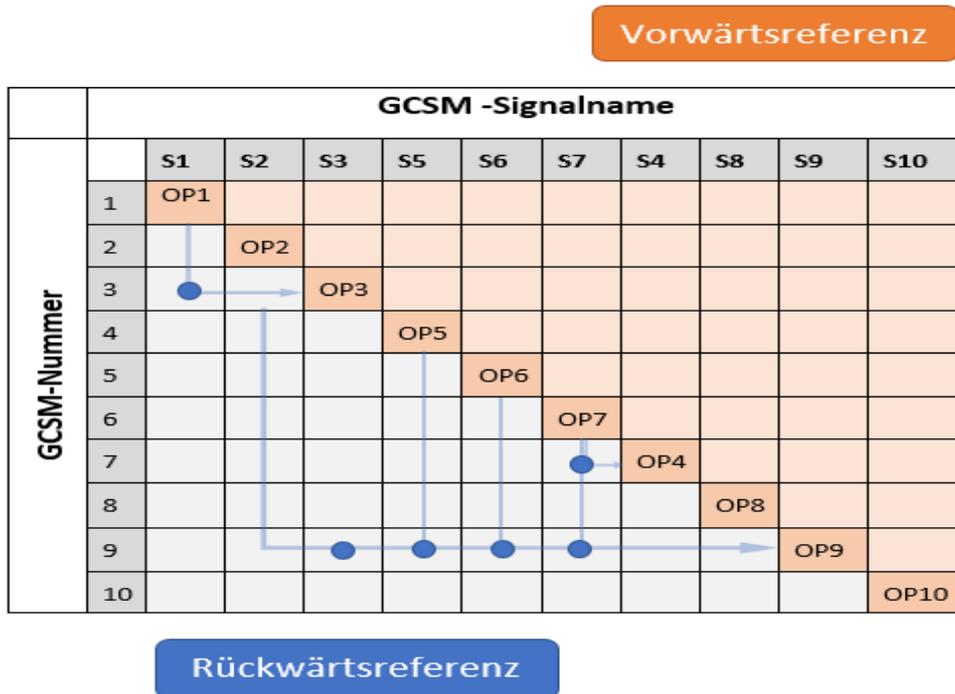


Abb. 6.2 Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur im optimierten Fall

6.1.4 Prinzipielle Netzwerkstruktur und Sortiermechanismus

Die i. A. auftretende GCSM-Netzwerkstruktur lässt sich in die drei Gruppen, Start-, Circular- und End-Layer, unterteilen (Abb. 6.3). Der erste Start-Layer (*Start Layer 1*) wird aus Signalen gebildet, die über keinen Vorgänger im Netzwerk verfügen und somit an den Anfang, der optimierten GCSM-Reihenfolge sortiert werden können. Signale, die dieser Gruppe zuzuordnen werden, sind:

- **GCSM-Prozesssignale**, die in ihrer gegebenen Anordnung im Datensatz übernommen werden
- **GCSM-Regler**
 - mit einer ATHLET internen Prä-Initialisierung (`INTE`, `DELAY` und `LAG`)
 - basierend auf einer externen GCSM-Bibliothek (`TELEPERM`, `INTEGRATOR`)
 - mit einem zeitlichen Verzug (`DELAY`) hinsichtlich ihrer Aktualisierung definiert wurden (Koeffizient `A1` bei Operator: `OR`, `AND` und `NOT`)

Nach der Zuordnung dieser Signale werden diese aus dem Gesamtnetzwerk entfernt und in den nachgelagerten Schritten nicht mehr berücksichtigt. Für das resultierende

Netzwerk folgt, dass jetzt die Signale aus *Start Layer 2* über keine Vorgänger mehr verfügen und in analoger Weise sortiert und aus dem Netzwerk entfernt werden können. Dieser Vorgang wird bis zum Erreichen des zirkulären Layers fortgesetzt.

In umgekehrter Form werden die Signale im End-Layer sortiert. Der erste End-Layer (*End Layer 1*) wird hierbei aus Signalen gebildet, die über keinen Nachfolger verfügen und somit an das Ende der GCSM-Reihenfolge sortiert werden können. Nach entsprechender Zuordnung werden diese Signale für die weitere Analyse aus dem Gesamtnetzwerk entfernt, mit dem Resultat das nunmehr *End Layer 2* die Eigenschaft fehlender Nachfolger besitzt. Dieser Zuordnungsvorgang wird bis zum Erreichen des zirkulären Layers fortgesetzt.

Die im zirkulären Layer enthaltenen Signale haben jeweils mindestens einen Vorgänger und Nachfolger und verbleiben damit vorerst im reduzierten Gesamtnetzwerk. Für die Analyse dieser Signale wird ein Algorithmus von D. B. Johnson /JOH 75/ verwendet, der im Weiteren zur Ermittlung der geschlossenen elementar Kreisläufe bzw. einzelner Ringe genutzt wird.

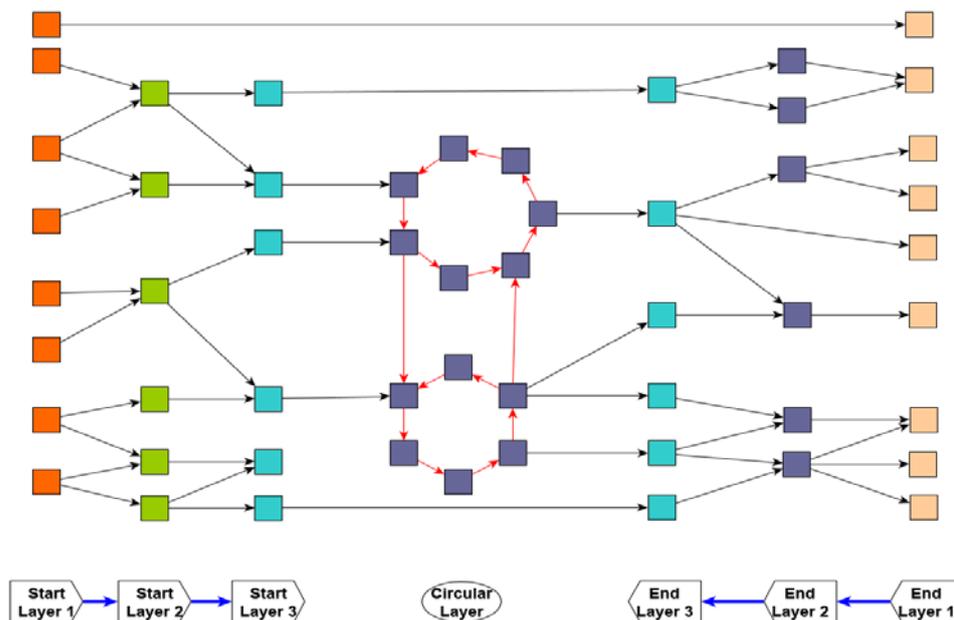


Abb. 6.3 Generische GCSM-Netzwerkstruktur

Wie in Abb. 6.3 dargestellt, kann es zu diversen Überschneidungen zwischen den verschiedenen Ringen kommen, wodurch die anhand des Johnson-Algorithmus ermittelte Anzahl an Elementarringen stark anwachsen kann. Weiterhin zeigt sich, dass sich eine Untergruppe an Signalen bestimmen lässt, die jeweils als Start- bzw. Endelement für

diverse Einzelkreise fungieren. Anhand dieser Start- und Endelemente ist es möglich, die ursprünglich große Anzahl an ermittelten Einzelkreisen zusammenzufassen und zu systematisieren.

6.1.5 Anwendung des GCSM-Optimierungsalgorithmus auf realen Datensatz

Für eine erste Testanwendung wurde der implementierte Optimierungsalgorithmus auf eine GCSM-Karte mit 24486 Einzelsignalen angewendet. Wie die Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur in Abb. 6.4 zeigt, besteht im nicht optimierten Beispieldatensatz der Testanwendung eine große Anzahl an Vorwärtsreferenzen zwischen den GCSM-Signalen. Nach Anwendung der Optimierung reduziert sich die Anzahl der Vorwärtsreferenzen auf zwei Signalgruppen. Hierbei umfasst Signalgruppe 1 (rotes, oberes Punktband in Abb. 6.5) die Menge der GCSM-Regler, die aufgrund ihrer Spezifikation im *Start-Layer 1* erfasst wurden (INTE, DELAY, LAG, TELEPERM und Operatoren mit DELAY). Die zweite Signalgruppe hingegen umfasst die durch den Johnson-Algorithmus bestimmten Start- und Endelemente der einzelnen Ringe, die in der Darstellung Abb. 6.5 an das Ende der optimierten GCSM-Karte gesetzt wurden (rotes, vertikales Punktband am rechten Rand). Für eine vollständige Optimierung besteht die Notwendigkeit, die Signale der Start- und Endelementgruppe mit entsprechenden Initialdaten zusätzlich auszustatten.

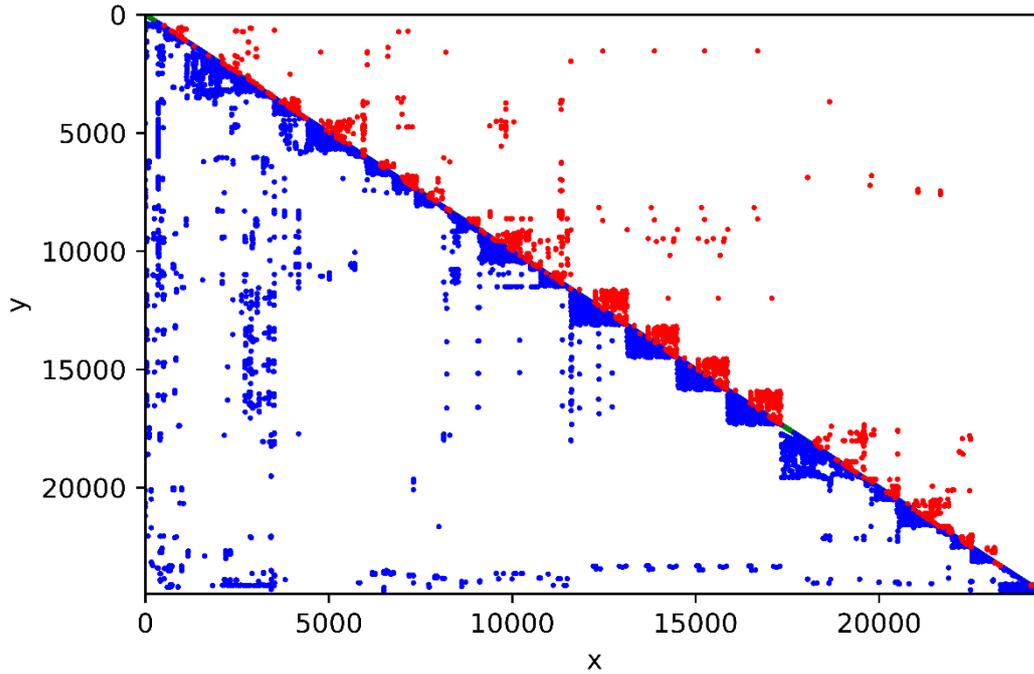


Abb. 6.4 Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur des Testanwendung im nicht optimierten Fall

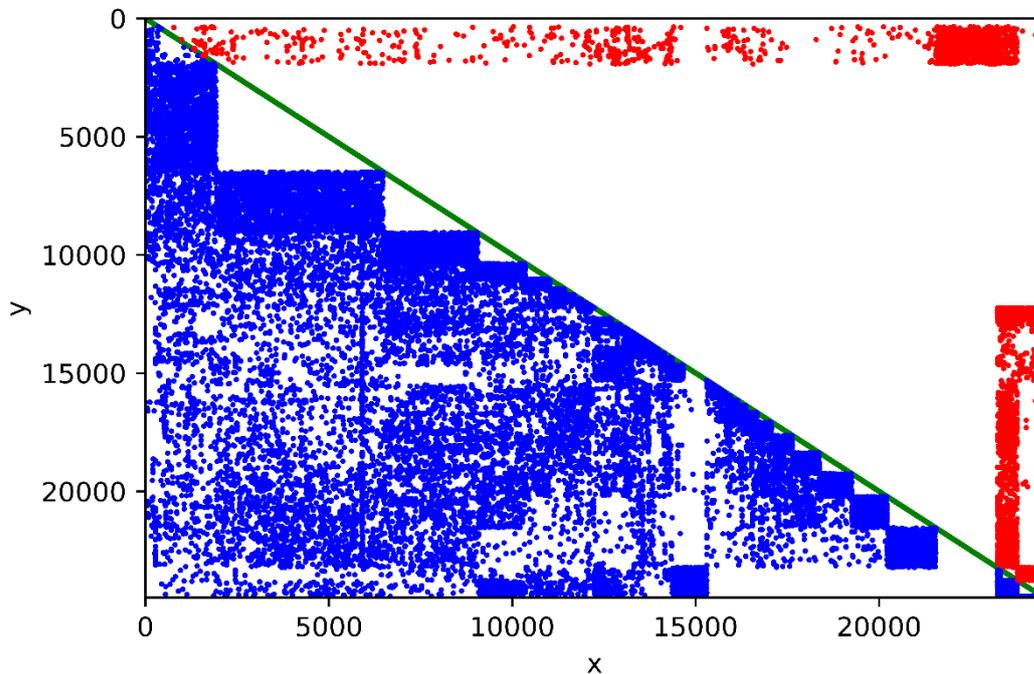


Abb. 6.5 Matrixdarstellung nach Anwendung des Optimierungsalgorithmus

In einem ersten Schritt erfolgte die Implementierung des beschriebenen GCSM-Sortiermechanismus zu Testzwecken in Form einer prototypischen Entwicklung in der Sprache C++, außerhalb des ATHLET-Programmcodes. Im Verlauf des zweiten

Schritt wurde mit der Übertragung der Algorithmen in die Sprache FORTRAN in Form eines ATHLET-Plugins begonnen, jedoch ist die Implementierung hierfür noch nicht vollständig abgeschlossen.

6.2 Neutronenkinetische Rückwirkungen für flüssigmetallgekühlte Reaktoren

Die Punktkinetik beschreibt die nukleare Leistungserzeugung im Reaktorkern unter Berücksichtigung integraler, über den Kernbereich gemittelter, thermohydraulischer Einflussfaktoren. Hiermit konnten bisher für LWR charakteristische Rückwirkungen der Kühlmitteltemperatur und -dichte, der Borkonzentration, der Steuerstäbe und der Brennstofftemperatur berücksichtigt werden. Insbesondere flüssigmetallgekühlte Reaktoren (LMR) weisen aufgrund der axialen und radialen thermischen Ausdehnung des Reaktorkerns während des Betriebs weitere Rückwirkungen auf, die bisher mit ATHLET nicht geeignet abgebildet werden konnten. Daher wurde ATHLET für diese Reaktoren erweitert, so dass zusätzliche thermohydraulische Rückwirkungen nach Bereitstellung der zugehörigen Feedback-Koeffizienten in der Punktkinetik Berücksichtigung finden können. Hierfür wurde auf Erkenntnisse zu funktionalen Abhängigkeiten der Rückwirkungen aus dem EU-Projekt *Evaluation of the ASTRID core safety coefficients /BOR 17/* zurückgegriffen. Entsprechende Korrelationen und Formfaktoren für unterschiedliche, durch Strukturkomponenten oder Kühlmittel bedingte Feedbacks wurden implementiert.

Für flüssigmetallgekühlte Reaktoren bedeutsame neutronenkinetische Rückwirkungen /YAN 12/ sind insbesondere

- Dopplereffekt: dieser kann bereits in ATHLET berücksichtigt werden
- Brennelementausdehnungseffekt: Rückwirkung durch temperaturbedingte axiale Ausdehnung der Brennelemente
- Kühlmitteltemperatureffekt: dieser konnte bisher nur für Kühlmittel im Reaktorkern berücksichtigt werden. In LMR treten jedoch zusätzlich Rückwirkungen aus anderen Anlagenbereichen auf. Zusätzlich können die Rückwirkungen in Abhängigkeit vom Ort positiv oder auch negativ sein. Dies muss durch sog. Formfaktoren berücksichtigt werden

- Radialer Kernaussdehnungseffekt (Diagrid expansion feedback): Rückwirkung durch temperaturbedingte, radiale Ausdehnung des Reaktorkerns, beim ASTRID-Design insbesondere bedingt durch die Ausdehnung des Diagrid
- Behälterausdehnungseffekt: Rückwirkung durch temperaturbedingte Ausdehnung des Reaktorbehälters
- Dichte-/Voideffekt: Dieser Effekt entsteht durch Dichte- und/oder Dampfvolumentgehaltsänderung, vorrangig im Kern und oberen Plenum.

Im Vordergrund der vorgenommenen Erweiterung für LMR stehen Rückwirkungen aufgrund einer temperaturbedingten Ausdehnung von Strukturkomponenten oder Fluidvolumina. Der Voideffekt wird bisher nicht weiter berücksichtigt, da Phasenaustausch und -wechselwirkung für Flüssigmetalle, hier insbesondere für Natrium, in ATHLET lediglich in einer vereinfachten Form implementiert sind. Alle oben erwähnten temperaturabhängigen Rückwirkungen (mit Ausnahme des Brennelementausdehnungseffekts) lassen sich durch einen einheitlichen, funktionalen Zusammenhang beschreiben:

$$\begin{aligned} \rho_{comp}^*(t) &= \frac{1}{\sum_i V_i \cdot f(FF_i)} \sum_i [F^{comp}(T_i(t) - T_{ref}) \cdot V_i \cdot FF_i] \\ &= \frac{1}{\sum_i V_i \cdot f(FF_i)} \sum_i [\rho_{i,comp}^* \cdot V_i \cdot FF_i] \end{aligned} \quad (6.1)$$

Die Summe geht in Abhängigkeit des betrachteten Feedbacks über alle CV (Flüssigkeitsvolumen) bzw. HCV (Strukturvolumen), die zum Feedback beitragen und die mit ihrem jeweiligen Volumen V_i gewichtet werden. Soweit es sich um Strukturobjekte (HCO) handelt, werden die Summen für alle Materialschichten ausgeführt. Optional können Formfaktoren FF_i berücksichtigt werden. Das Gesamtvolumen $\sum_i V_i \cdot f(FF_i)$ erfasst lediglich diejenigen Abschnitte der TFO bzw. HCO, die zum Gesamtfeedback tatsächlich etwas beitragen. Dies wird durch die Wichtungsfunktion

$$f(FF_i) = \begin{cases} 0 & , \text{if } FF_i = 0 \\ 1 & , \text{if } FF_i \neq 0 \end{cases} \quad (6.2)$$

erreicht, wodurch, falls erforderlich, bei Vorgabe entsprechender Formfaktoren durch den User, nur einzelne CV/HCV von bestimmten TFO/HCO für die Feedbackberechnung berücksichtigt werden können.

Da ATHLET zum Beginn der Transiente einen stabilen (kritischen) Anlagenzustand erwartet, wird das Feedback nach der Startrechnung durch eine additive Konstante $\rho_{comp}^*(t_0)$ auf Null geführt.

$$\rho_{comp}(t) = \rho_{comp}^*(t) - \rho_{comp}^*(t_0) \quad (6.3)$$

Rückwirkungen während der Transienten werden als zeitliche Änderung (Abweichung von Null) von $\rho_{comp}(t)$ berücksichtigt.

Um das Feedback gemäß Gleichung (6.1) berechnen zu können, müssen der Reaktivitätskoeffizient F^{comp} sowie die Referenztemperatur bekannt sein. Diese können neben den TFO bzw. HCO vom Anwender im Eingabedatensatz für jedes zu berücksichtigende Feedback spezifiziert werden. Alternativ zu Gleichung (6.1) kann das Feedback auch aus Tabellenwerten interpoliert werden. Hierzu kann vom Anwender eine Tabelle mit Temperaturen und zugehörigen Rückwirkungswerten vorgegeben werden.

$$\rho_{i,comp}^* = \rho_{i,comp}^*(T_i) \quad (6.4)$$

Die Rückwirkung aufgrund der thermischen Brennelementausdehnung berechnet sich mit folgenden Unterschieden ebenfalls mittels Gleichung (6.1):

- Formfaktoren und Wichtungsfunktion sind identisch eins (können also nicht über den Eingabedatensatz modifiziert werden)
- Die Strukturobjekte (HCO) müssen vom Anwender nicht explizit vorgegeben werden, da ATHLET bekannt ist, welche Strukturen Leistung erzeugen und somit Brennelemente darstellen.
- Die Rückwirkung der Brennelementausdehnung wird für jede im Eingabedatensatz definierte Punktkinetikregion separat berechnet. Soll dieses Feedback in mehreren Regionen Berücksichtigung finden, muss es dementsprechend mehrfach vom Anwender im Eingabedatensatz vorgegeben werden.

Die Überprüfung der Implementierung erfolgte anhand von Testrechnungen zum ASTRID Design /SEU 16/. ASTRID ist ein Pool-Reaktor mit Natrium als Kühlmittel. Das Kerndesign zeichnet sich dadurch aus, dass es – im Vergleich zu anderen Flüssigmetallgekühlten Schnellen Reaktoren – nur einen geringen positiven bzw. sogar negativen Void-Rückwirkungskoeffizienten aufweist. Im Rahmen des europäischen ESNII+ Projektes „Preparing ESNII for HORIZON 2020“ /WAH 17/ wurde ein Benchmark durchgeführt, der das thermohydraulische und neutronenphysikalische Verhalten dieses Reaktortyps während einer ULOF-Transiente (unprotected loss of flow) zum Inhalt hatte. Der hierbei entwickelte Datensatz, der eine vereinfachte Berücksichtigung der neutronenphysikalischen Rückwirkungen mittels GCSM beinhaltete, wurde geeignet erweitert, so dass nun die neue Implementierung genutzt wird. Die neuen Ergebnisse wurden mit den früher erzielten Resultaten verglichen. Die Simulationen wurden über den Zeitpunkt des Siedens im Reaktorkern hinaus fortgesetzt, gleichwohl für diesen Bereich die thermohydraulische wie auch die neutronenphysikalische Modellierung in ATHLET nicht vollständig sind.

Abb. 6.6 zeigt schematisch den Aufbau des Reaktors. Der heterogene Reaktorkern mit Spalt- und Brutbereichen wurde in drei parallele Kanäle aufgeteilt: innerer Kernbereich, davon ein separates heißes Brennelement, sowie äußerer Kernbereich.

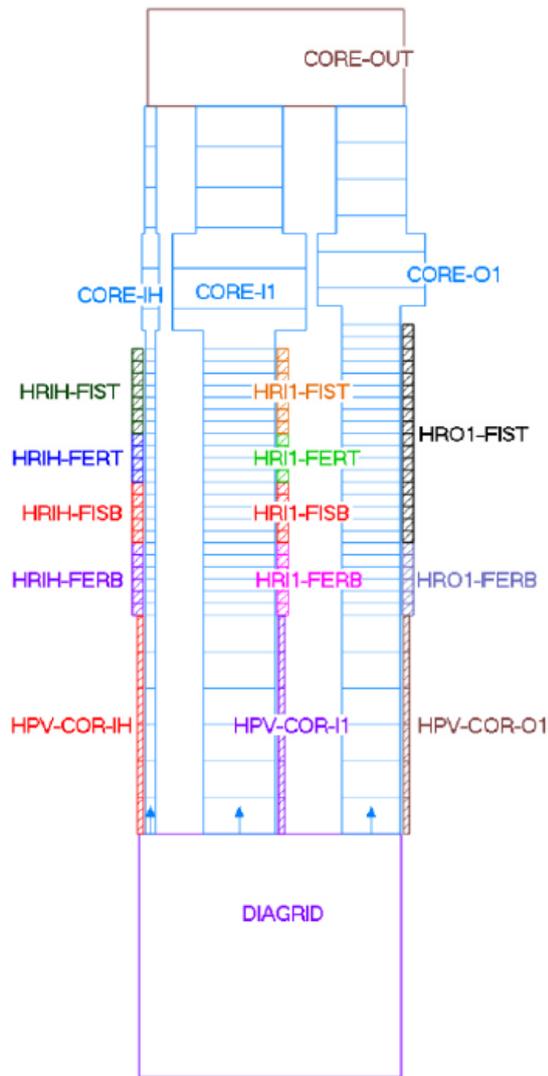


Abb. 6.6 Nodalisierung des Reaktorkerns des ASTRID-Designs

Als spezielle Rückwirkungen wurden die thermische Ausdehnung des Diagrids (radiale Ausdehnung), der Kontrollstäbe sowie der Brennelemente berücksichtigt. Abb. 6.7 zeigt für den Spaltbereich einen Vergleich der detaillierten Bestimmung der drei Feedbacks und ihrer Summe mit der vereinfachten Berechnung (gestrichelt) auf Basis einzelner, lokaler Fluid- bzw. Oberflächentemperaturen. Die recht gute Überstimmung verdeutlicht, dass in dem hier betrachteten Fall einer langsamen Temperaturtransiente die ausgewählten lokalen Temperaturpositionen des vereinfachten Ansatzes eine gute Näherung der mittleren Strukturtemperaturen darstellen. Dies gilt jedoch nicht für die Rückwirkung der thermischen Ausdehnung des Kühlmittels (Abb. 6.8). Während die vereinfachte Darstellung (hier am Beispiel der Spaltzone) ein positives Feedback voraussagt, ist das tatsächliche Feedback negativ. Grund hierfür ist die negative Rückwirkung aus dem Bereich oberhalb der aktiven Kernzone (siehe Abb. 6.6) sowie das teilweise positive,

teilweise aber auch negative Feedback aus Bereichen innerhalb des Kerns, das durch Formfaktoren beschrieben wird. Diese Effekte können lediglich von der detaillierten Erfassung der Rückwirkungen mittels der neuen Implementierung in ATHLET realistisch erfasst werden.

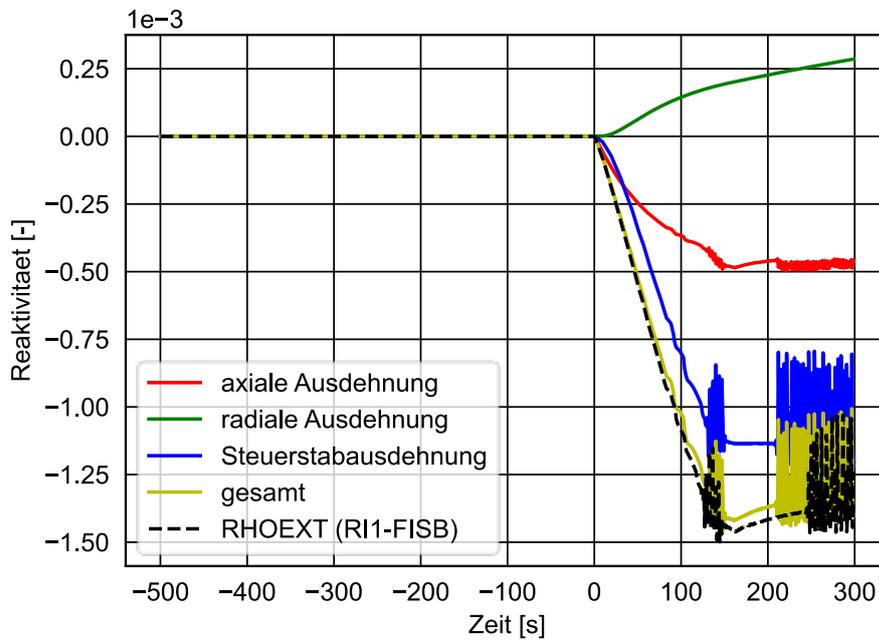


Abb. 6.7 Reaktivitätsbeiträge durch thermische Ausdehnung im ASTRID-Design. Vergleich der neuen Implementierung mit dem vereinfachten Ansatz (RHOEXT)

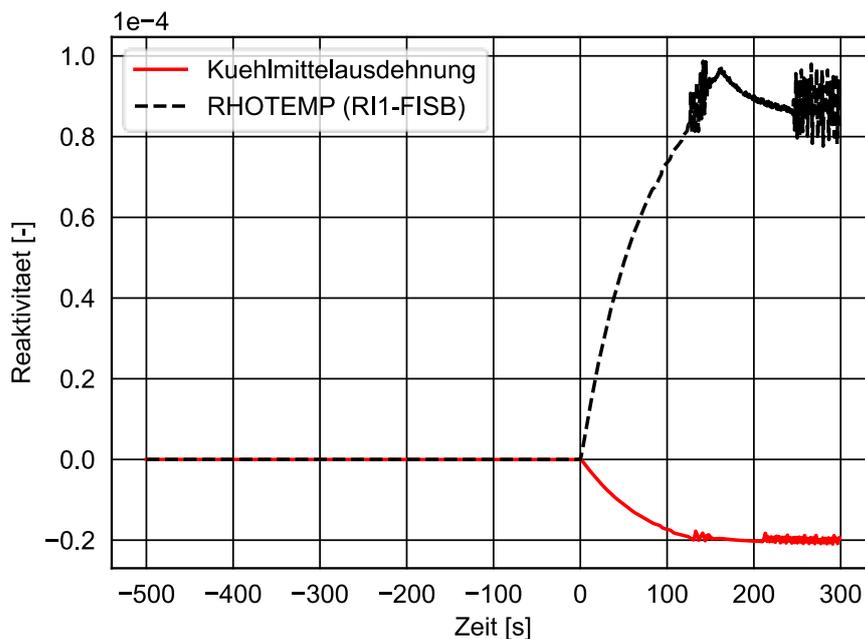


Abb. 6.8 Reaktivitätsbeitrag aufgrund temperaturbedingter Ausdehnung des Kühlmittels. Vergleich der neuen Implementierung mit dem vereinfachten Ansatz (RHOTEMP)

6.3 Modellertüchtigungen und -korrekturen

6.3.1 Strömungsdruckverluste im Kondensationsmodell

In Forschungsreaktoren kann es zu Strömungsinstabilitäten kommen, wenn der Kern-durchsatz abnimmt, Reibungs- und Beschleunigungsdruckverluste aber auf Grund von Dampfbildung zunehmen (onset of flow instabilities, OFI). Zu diesem Thema wurden mit ATHLET bereits vor vielen Jahren Simulationen mit zufriedenstellenden Ergebnissen durchgeführt /LER 07b/. Im Zuge der Aktualisierung der ATHLET-Validierungsbasis (siehe hierzu auch Kapitel 3.1) wurden diese Rechnungen wiederholt. Dabei stellte sich heraus, dass einige Simulationen – anders als früher – bei kleinen Zeitschrittweiten verharren.

Teile des Quelltextes von ATHLET wurden in den vergangenen Jahren restrukturiert, um über viele Jahre gewachsene Programmteile zu modernisieren. Dabei wurden auch die Programme für die Berechnung des Massen- und Energieaustauschs zwischen Wasser und Dampf überarbeitet /LAN 16/. Die Kondensationsrate hängt in diesem Modell u. a. von der Strömungsturbulenz auf Grund von Wandreibungs- und Formverlusten ab.

Beide Terme werden hier (als CV-bezogene Größe) vergleichsweise grob berechnet, während eine deutlich genauere Variante (leitungsbezogene Größe) für die Verwendung in der Impulsgleichung existiert. Beim Versuch, die beiden Programmteile zu vereinheitlichen, schlich sich ein Fehler ein, der den Einfluss des Terms auf die Kondensationsrate stark überschätzte. Trotz umfangreicher und wiederkehrender Programmtests wurde der Fehler nicht entdeckt, da der Term für die meisten Anwendungen von untergeordneter Bedeutung ist. OFI-Simulationen werden jedoch stark von Wandverdampfung und gleichzeitig stattfindender Bulk-Kondensation im unterkühlten Wasser geprägt. Nach der Korrektur des Fehlers liefen die Simulationen ähnlich stabil wie früher.

6.3.2 ECCMIX Modell

Bei einer Anlagenrechnung schien ein Massendefekt im kalten Strang (KS) aufzutreten. Unter weitgehend stationären Bedingungen nahm der Durchsatz auf dem Weg von der HKP zum RDB ab. Eine genaue Analyse zeigte, dass es nicht wirklich zu einem Massenfehler kam, sondern dass das Modell `ECCMIX` für diesen Effekt verantwortlich war. Das Modell simuliert die Durchmischung von kaltem, im KS eingespeisten Notkühlwasser mit dem im Primärkreis vorliegenden, warmen Kühlmittel sowie den Transport dieses Gemisches am Boden des KS direkt zum RDB (ggf. in Gegenströmung zum Kühlmittel im kalten Strang). Das Besondere an dem betrachteten Reaktortyp ist, dass die Boreinspeisung des Notborierungssystems über die ECCS-Anschlussleitung erfolgt, für welche das `ECCMIX`-Modell aktiviert war. Dieses Modell berechnete für das eingespeiste, hochborierte Wasser fälschlicherweise auch bei hoher Strömungsgeschwindigkeit im KS einen `ECCMIX`-Effekt mit Transport direkt zum RDB. Das Modell berücksichtigte bereits CCFL zwischen warmer Strömung vom RDB zur Einspeisestelle und kälterer Gemischströmung zum RDB, ließ dabei allerdings die globale KS-Strömung außer Acht. Durch Einbeziehung der globalen KS-Strömung in die CCFL-Berechnung konnte erreicht werden, dass der `ECCMIX`-Effekt nur noch bei sehr kleinen KS-Geschwindigkeiten auftrat.

6.3.3 Bortransportmodell

Zur Verringerung der sog. numerischen Diffusion beim Transport von Borsäure im Kühlkreislauf, welche in einem Lumped-Parameter-Code wie `ATHLET` unvermeidlich ist, werden verschiedene Transportmodelle bereitgestellt. Diese Modelle wurden von HZDR anhand von Messdaten aus Mischungsversuchen in der `ROCOM`-Versuchsanlage überprüft. Bei diesen Versuchen wurde zur Simulation einer Deborierungstransiente die

kalte Leitung eines Stranges an zwei Stellen mit Schiebern abgesperrt und gleichzeitig ein parallel liegender Rohrabschnitt mit deutlich geringerer Borkonzentration (im Versuch nachgebildet durch Kühlmittelzusätze mit anderer elektrischer Leitfähigkeit) geöffnet.

Dabei stellte sich heraus, dass eines der Modelle Mischungsorkonzentrationen berechnete, die wiederholt deutlich höher waren als die maximalen Ausgangswerte vor der Mischung.

Das betreffende Bortransportmodell erzeugt in jedem CV auf einem eigenen „Untergitter“ mit einer vom Nutzer vorzugebenden, räumlichen Auflösung (typischerweise ≤ 0.1 m) ein Profil der lokalen Borkonzentration. Dieses Gitter wandert mit der KM-Geschwindigkeit (profile shift method) entlang der Hauptleitung. Das Modell versagte, da diese Hauptleitung durch die Schieber unterbrochen und der KM- und Bortransport nun vollständig von einem ‚Abzweig‘ übernommen wurde. Das Bortransportmodell wurde nun geeignet erweitert, um diese spezielle Situation erfassen zu können

Das von dem Modell berechnete örtliche Borkonzentrationsprofil wurde bisher schon laufend angepasst, so dass dessen Integral die mittlere Borkonzentration im CV wiedergibt, ein Bormassenbilanzfehler somit verhindert wird. Diese Anpassung wurde verfeinert. Insbesondere wird nun der Tatsache Rechnung getragen, dass die beiden Endstützwerte des Gitters eines CVs jeweils nur halb zum Integral beitragen, die Korrektur dort also doppelt vorgenommen werden muss. Außerdem zeigte sich, dass eine additive Korrektur vor allem bei stark variierenden Borkonzentrationen leichter zu handhaben ist als eine (bisher verwendete) multiplikative.

6.3.4 Simulation bei überkritischem Druck

Im Rahmen von Arbeiten der TUM, Lehrstuhl für Energiesysteme, werden Wärmeübergangskorrelationen für überkritisches Wasser bewertet bzw. neu entwickelt. Dabei werden verschiedene WÜ-Korrelationen via Plugin in ATHLET integriert und deren Ergebnisse mit Experimenten der HIPER-Versuchsanlage verglichen. Der KM-Druck dieser Versuche lag mit ca. 22,6 MPa nur knapp über dem kritischen Druck. Während der Berechnung des stationären Zustandes durch die ATHLET-Startrechnung wurde immer wieder zweiphasige Strömung berechnet, was dann häufig zum Abbruch der Rechnung führte (ausschließlich während der Startrechnung, nicht während der transienten Rechnung). Hintergrund hierbei ist, dass die Approximation der Wasser-Stoffwerte aus zwei Abschnitten besteht: Für unterkritisches Wasser wird ein aufwendiges Programmpaket

verwendet, das auch die metastabilen Zustände von Wasser und Dampf detailliert, konsistent und modellgerecht beschreibt und umfangreich validiert worden ist. Überkritisches Wasser wird immer als einphasiges „Liquid“ betrachtet; es kennt also keine metastabilen Zustände, muss aber die starken Stoffwertänderungen entlang der pseudo-kritischen Linie und insbesondere am kritischen Punkt hinreichend genau, aber auch „programmverträglich“ wiedergeben.

Um die Einphasigkeit bei überkritischem Druck sicherzustellen, wird in ATHLET eine künstliche Sättigungstemperatur verwendet, die zwischen 23 und 24 MPa auf 2.000 °C angehoben wird und damit das KM in den unterkühlten, einphasigen Zustand zwingt. Der Druck in der Versuchsanlage war mit 22,6 MPa kleiner als dieser Übergangsbereich, was je nach Heizleistung und Temperaturniveau zur Zweiphasigkeit führen konnte. Die Grenzen für die Anhebung der Sättigungstemperatur wurden auf 22,2 und 22,7 MPa abgesenkt. Damit können Simulationen nun näher am kritischen Punkt gestartet werden.

6.3.5 Separator mit nicht-kondensierbaren Gasen

Bei der Simulation eines PKL-Experiments zum Ausfall der Nachwärmeabfuhr in einer abgeschalteten Anlage bei Mitte-Loop-Betrieb durch das HZDR kam es zu einem Abbruch der Simulation. Eine genauere Analyse hat ergeben, dass ursächlich für den Abbruch eine fehlerhaft berechnete Energiebilanz im für die Simulation der Dampferzeuger genutzten Separatormodell bei Einströmung von nicht-kondensierbaren Gasen war. Die Energiebilanz – und somit das Separatormodell – wurde für Gase entsprechend erweitert und dem HZDR eine korrigierte Programmversion zur Verfügung gestellt.

6.4 Weitere Programmverbesserungen

6.4.1 Asymmetrische Leistungsverteilung im Reaktorkern

Im Zuge von Reaktoranalysen mit detaillierten Kernmodellen mit zahlreichen Parallelkanälen wurde beobachtet, dass die Vorgabe einer radial asymmetrischen Anfangsleistungsverteilung durch den Nutzer unter bestimmten Umständen zu einem ungewünschten und falschen Anfangszustand nach der stationären Startrechnung oder sogar zum Programmabbruch führen kann. Ursächlich hierfür war das während der Startrechnung eingesetzte iterative Lösungsverfahren, das nicht hinreichend stabil zu einem nahe der Anwendervorgabe liegenden Endzustand hin konvergierte. Um dies zukünftig zu

verhindern, wurde eine neue Nutzereingabe (eine sog. hardware action) bereitgestellt, mit der es dem Nutzer ermöglicht wird, mit einer symmetrischen Leistungsverteilung im Eingabedatensatz zu starten und diese erst während einer Nulltransiente zu modifizieren. Zu diesem Zweck wurde das Schlüsselwort `RODCO` unter dem Kontrollwort `ROD` im Eingabedatensatz erweitert. Das Vorgehen erleichtert die Datensatzerstellung erheblich und reduziert die Gefahr von Anwenderfehlern. Es kann zukünftig in analoger Form auch für gekoppelte 3D-Neutronenkinetikprogramme verwendet werden. Mittelfristig ist geplant, die Methodik der stationären Startrechnung grundsätzlich zu überprüfen und nach Möglichkeit zu verbessern. Hierzu sind Arbeiten im Rahmen des vom BMWi unterstützten Projekts *Funktions- und Strukturausbau der AC²-Numerik (RS1593)* geplant.

6.4.2 Vorgabe von Randbedingungen mittels TDV

ATHLET bietet dem Anwender die Möglichkeit, über zeitabhängige Kontrollvolumen, sog. Time Dependent Volumes (TDV), Randbedingungen für Druck und Enthalpie an den Grenzen des Simulationsgebiets, z. B. dem Containment, vorzugeben. Nach der stationären Startrechnung zu Beginn einer ATHLET-Simulation wird die gefundene, stationäre Lösung im TDV mit der vom Anwender vorgegebenen Randbedingung für Druck und Enthalpie verglichen. Hiervon ausgehend erfolgte für beide Größen bisher eine automatische Korrektur der Anwendereingabe, über die in der Programmausgabe informiert wurde. Dieses Vorgehen der automatischen Korrektur von Randbedingungen hat sich in der Vergangenheit gelegentlich als anwenderunfreundlich oder sogar fehleranfällig herausgestellt. Dies gilt insbesondere bei der Kopplung mit weiteren Programmen wie bspw. COCOSYS, bei denen das externe Programm die Randbedingungen im TDV liefern soll.

Das Programm wurde nun derart ergänzt, dass eine Korrektur der vorgegebenen Druck- und Enthalpiewerte im TDV nur innerhalb bestimmter Grenzen automatisch erfolgt. Bei darüber hinaus gehenden Korrekturen wird die Simulation angehalten und der Anwender informiert, da seine Eingaben zum Anfangszustand offensichtlich nicht hinreichend konsistent sind. Darüber hinaus hat der Anwender nun optional die Möglichkeit, die Korrekturgrenzen selbst festzulegen, also besonders enge oder auch besonders weitgefaste Anpassungen zuzulassen. Zu diesem Zweck wurde das neue Schlüsselwort `CORRLIMIT` unter dem Kontrollwort `TIMEDVOL` im Eingabedatensatz eingeführt. Außerdem besteht für den Nutzer die Möglichkeit, die Korrektur der Randbedingungen komplett auszuschalten. Dies kann zwar zu einer Unstetigkeit beim Übergang von

stationärer Startrechnung zur transienten Rechnung führen und somit (starke) Oszillationen zur Folge haben. Allerdings wird hierbei sichergestellt, dass exakt diejenigen Randbedingungen zum Tragen kommen, die vom Anwender (oder vom gekoppelten Programm) gefordert werden. Diese Weiterentwicklung dient letztlich der Vermeidung von Anwenderfehlern und der leichteren Durchführung gekoppelter Simulationen mit COCOSYS, bei denen die Kopplung häufig über ein TDV erfolgt.

6.4.3 Vermeidung von Programmabbrüchen nach Rundungsfehlern bei der Bestimmung der FEBE-Zeitschrittweite

Im Rahmen der bereits in Kapitel 5.4.3 erwähnten Simulationen zu einem Brennelement-lagerbecken wurden einige Rechnungen mit dem Hinweis $T_{\text{BEGIN}} \geq T_{\text{END}}$ aus der ATHLET Zeitintegration abgebrochen. Die Abbrüche traten immer dann auf, wenn von den Modellen HXX = True (Anforderung einer Zeitschrittreduzierung) während der Jacobi-Matrixberechnung gesetzt wurde. Grund hierfür war die oben beschriebene extreme Überhitzung der Flüssigkeitsphase.

Analyse und Abhilfe: Da bei gesetztem HXX-Flag die Jacobi-Matrix nicht berechnet werden kann (die Funktionsroutine wird dann nicht vollständig ausgeführt), schaltet das Integrationsverfahren FEBE vorübergehend auf explizite Zeitintegration um und muss dafür eine geeignete Schrittweite vorschlagen (die u. U. sehr viel kleiner sein muss als bei impliziter Zeitintegration). Dabei orientiert sich FEBE an der vom User im Eingabedatensatz vorgegebenen minimalen Grenzschriftweite. Da diese im vorliegenden Fall sehr klein vorgegeben wurde (10^{-12} s), die aktuelle Problemzeit aber relativ groß war (10^{+5} s), konnte auf Grund begrenzter Genauigkeit der Gleitkommazahldarstellung $T+DT=T$ (d. h. $T_{\text{BEGIN}} \geq T_{\text{END}}$) werden. Die berechnete Schrittweite für die explizite Zeitintegration wird nun geeignet nach unten begrenzt, so dass unter Berücksichtigung der von der Rechnerarchitektur abhängigen Genauigkeit der Zahlendarstellung die Problemzeiten zweier Integrationsschritte immer verschieden sind.

6.4.4 HTML-Ausgabedaten

Die HTML Printausgabe von ATHLET wurde umfassend überarbeitet. Dies betrifft:

- a) die Kompatibilität mit Browsern unter Microsoft® Windows 10;
- b) zusätzliche Verlinkungen (Anchors) und neues Layout des Menüs;

- c) Neues Argument “-html” als ATHLET-Startparameter zur Aktivierung des html-Outputs.

6.5 ATHLET Utilities

6.5.1 AIG-2

Die neue ATHLET Input Graphic (AIG) wurde zur erstmaligen generellen Verteilung an alle ATHLET-Nutzer vorbereitet und mit der aktuellen Programmversion ATHLET 3.2 verteilt. Notwendige Anpassungen von AIG in Folge der kontinuierlichen Weiterentwicklung des ATHLET/ATHLET-CD Programms wurden durchgeführt. Hierunter fallen z. B. der für die Darstellung dynamisierter Bilder und Diagramme in ATLAS notwendige SVG-Export wie auch die Möglichkeit, die permanente Reskalierung des graphischen Bearbeitungsbereiches zu deaktivieren.

6.5.2 Plotting

Im Zuge der Modernisierung der Postprocessing-Tools wurde die Neuentwicklung eines Plottools priorisiert, das aus bisherigen Erfahrungen der Entwickler und Anwender folgende Hauptziele umsetzt:

- Alle Plots sollen standardmäßig einer einheitlichen Layoutrichtlinie der GRS folgen.
- Es soll skriptfähig sein, damit die Erstellung von Plots leicht und reproduzierbar durchgeführt und in automatisierte Arbeitsprozesse integriert werden kann.
- Die Hürde zum Anlegen einfacher, qualitativ hochwertiger Standard-Plots sollte so gering wie möglich sein.
- Gleichzeitig soll das Tool so flexibel sein, sodass auch komplexere Erweiterungen durch fortgeschrittene Nutzer möglich sind.
- Perspektivisch soll das Tool für alle Komponenten von AC² einsetzbar sein.
- Die Unterstützung generischer Datenformate, insbesondere HDF5 soll gegeben sein.

Daraus wurde in einem ersten Schritt das Konzept eines Python-basierten Plottools mit dem Arbeitstitel Batchplot erarbeitet und in einem ersten Entwurf umgesetzt. Das

Programm besteht aus einem Rahmenprogramm, das als Pythonpaket zur Verfügung steht und für die allgemeine Steuerung zuständig ist.

Es benötigt folgende Dateien vom Anwender, um einen Plot erstellen zu können:

1. Die Plotdaten im Format HDF5 oder CSV/ASCII-Format.
2. Eine Beschreibungsdatei in Python, die auf die zu plottenden Größen verweist.
3. Optional eine Formatvorlage, in der das graphische Layout beschrieben ist, falls die vordefinierte GRS-Vorlage nicht verwendet werden soll.

Als Backend wurde die etablierte Matplotlib-Bibliothek (<https://matplotlib.org>) verwendet. Mittels des Pythonpakets Setuptools und der GitLab-CI wird automatisch ein aktuelles Anwenderpaket erzeugt, das ohne vorinstallierte Python-Installation von Entwicklern heruntergeladen und eingesetzt werden kann.

6.5.3 Ausgabedatenformat HDF5

Ein neues Ausgabedatenformat für Plotdaten wird seit der Programmversion ATHLET 3.2 angeboten. Es handelt sich um das strukturierte und speichereffiziente Binärformat HDF5 - ein Standardformat für wissenschaftliche Anwendungen (siehe <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>). Ein Plugin wurde implementiert, um den ATHLET-Plotvektor als Scope in eine HDF5-Datei umzuwandeln. Das Plugin kann optional vom Anwender aktiviert werden, ergänzend zur oder anstatt der Ausgabe der Plotdaten im bisherigen GRS-eigenen pd-Format. Das HDF5-Plugin ist kompatibel mit anderen bereits vorhandenen Programmteilen wie ATHLET-CD oder CONDRU. Ein Speicherplatzgewinn größer als 25 % (je nach ATHLET-Modell) mit geringem Performanceverlust beim Schreiben konnte im Rahmen numerischer Analysen beobachtet werden. Das Python Paket "h5py" ermöglicht das Laden des HDF5-Files in einer Python-Umgebung zum sehr leichten und effizienten lesen, plotten oder bearbeiten der Daten. Mit der aktuellen ATHLET-Version 3.2 wurde ein einfaches Beispielskript an die Nutzer verteilt, dass die Verwendungsmöglichkeit der HDF5-Datei zum Plotten mittels Python illustriert.

6.5.4 AIE

Für die Unterstützung des Nutzers bei der Eingabe und Bearbeitung von ASCII-Eingabedatensätzen wurde der AC² Input Editor in seiner Funktionalität erweitert. Neben einer vollständigen Erkennung aller elementaren Hierarchie-Elemente bzw. Schlüsselworte (control word C----, keyword K----, sub-keyword S---- und pseudo-keyword -----) war die Weiterentwicklung ebenfalls auf die strukturierte Erfassung der nutzerseitig implementierten Objekte (Parameter, Thermofluid-Objekte, Wärmeleitobjekte, Prioritätsketten und GCSM-Objekte) ausgerichtet, um zukünftig den starken Vernetzungsgrad und die hinterlegten Eigenschaften dieser Objekte dem Nutzer durch eine graphische Informationsaufbereitung (Eingabemasken, Netzwerk-Darstellung) zugänglich zu machen. Der überarbeitete Eingabebereich des Editors (B in Abb. 6.9) bietet neben der farblichen Kennzeichnung der nutzerseitig verwendeten Objektamen nun auch die Möglichkeit, einzelne Hierarchie-Elemente während der Bearbeitung in der Darstellung zu kollabieren (Code-Faltung durch rote Punkte im Zeilen-Nummerierungsbereich), um nicht bearbeitete Datensatz-Bereiche zusammenzufassen. Durch die implementierte Baumstruktur (A) ist dem Nutzer die Möglichkeit für einen schnellen Zugriff auf die verwendeten Hierarchie-Elemente und Objekte im Datensatz gegeben. Das im unteren Bereich des AC² Input Editors befindliche Fenster (D) dient dem Auffinden von Suchbegriffen im Datensatz, wobei der Begriff samt auftretender Zeilennummer im Anschluss an die Suche ausgegeben und durch Selektion im Datensatzfenster (B) angesprungen wird. Eine weitere Unterstützung des Nutzers bei der Dateneingabe ist durch die zusätzliche Implementierung eines PDF-Viewer (D) und Kopplung mit dem Eingabebereich (B) im AC² Input Editor gegeben. Durch Aktivierung dieser Funktionalität wird in Abhängigkeit von der aktuell bearbeiteten Eingabekarte (B) automatisch die entsprechende Information in der Eingabebeschreibung (ATHLET Input Description) aufgerufen. Somit erhält der Nutzer einen schnellen Zugriff auf diejenigen Informationen, die für die Bearbeitung der aktuell selektierten Karte benötigt werden. Dem verwendeten PDF-Viewer ist im oberen Bereich zusätzlich ein Drop-Down-Menü (ATHLET) hinterlegt, um unabhängig von der bearbeiteten Karte einen Zugriff auf die verschiedenen ATHLET-Komponentenbeschreibungen zu erhalten.

The screenshot displays the AC2 Input Editor interface, which is divided into several main sections:

- Control Word Tree (Left):** A hierarchical list of control words and their line numbers. The 'TOPOLOGY' section is expanded, showing various circuit and system parameters.
- Code Editor (Center):** A window showing the source code for the 'TOPOLOGY' section. It includes include statements, a circuit definition for 'CIRCUIT1', and a table of parameters.

Line	Code	Value	Unit	Unit
309	IPRIO	1		
310	ISYS0	1		
311	SB00(I)			
312	ANAM0(I)			
313	SE00(I)			
314	IART0(I)			
315	'FV-UP-4'	0.0	%IEQ1%	
316	'PI-HL'	10.784	%IEQ1%	
317	'PI-SG-IN1'	0.0	%IEQ1%	
318	'PI-SG-IN2'	1.087	%IEQ1%	
319	'PI-SG-IN3'	0.0	%IEQ1%	
320	'PI-SG-IN4'	1.774	%IEQ1%	
321	'PI-SG-IN5'	0.0	%IEQ1%	
322	'PI-SG-OUT1'	11.06	%IEQ1%	
323	'PI-SG-OUT2'	0.0	%IEQ1%	
324	'PI-SG-OUT3'	1.774	%IEQ1%	
325	'PI-SG-OUT4'	0.0	%IEQ1%	
326	'PI-SG-OUT5'	1.087	%IEQ1%	
327	'PI-SG-OUT6'	0.0	%IEQ1%	
328	'PI-CL'	32.546	%IEQ1%	
329	'FV-DC-11'	0.0	%IEQ1%	
330	'FV-DC-12'	4.877	%IEQ1%	
331	'FV-LF-1'	0.0	%IEQ1%	
332	'FV-LF-2'	0.9	%IEQ1%	
333	'FV-LF-3'	0.0	%IEQ1%	
334	'FV-LF-4'	3.905	%IEQ1%	
335	'FV-BRANCH2'	0.0	%IEQ1%	
336	'FV-UP1'	2.551	%IEQ1%	
337	'FV-UP-4'	0.0	%IEQ1%	
- Help Window (Right):** A window titled '7 Topology Data (CW TOPOLOGY)' containing text and a bulleted list of purposes for the TOPOLOGY data.
 - The TOPOLOGY data have several purposes:
 - Definition of all active TFOs and their interconnections.
 - Assignment of the TFOs to the autonomous and fluidynamic systems.
 - Setting of the priority chains (PCs).
 - Definition of the type of PC (TPR11).

Large blue letters 'A', 'B', 'C', and 'D' are overlaid on the interface to highlight specific areas: 'A' on the Control Word Tree, 'B' on the code editor table, 'C' on the help window, and 'D' on the bottom status bar.

Abb. 6.9 Benutzeroberfläche des AC² Input Editors

6.6 AC²-Starter-Benutzeroberfläche

Mit der Entwicklung der AC²-Starter-Benutzeroberfläche wird dem Anwender eine benutzerfreundliche und einheitliche Methode zur Verfügung gestellt, übliche Aufgaben im AC² Kontext zu bewältigen.

Dies umfasst das Starten einzelner AC²-Komponenten bis hin zur gekoppelten Rechnung. Dabei wählt der Nutzer die zu verwendenden AC²-Komponenten aus und spezifiziert jeweils die Eingabedatensätze und Ausgabedateinamen. Damit bei wiederholten Rechnungen bisherige Ausgabedateien nicht überschrieben werden, ist standardmäßig die "Auto"-Option aktiviert. Diese kombiniert den Ausgabedateinamen mit einer fortlaufenden Nummer, sodass der Name stets eindeutig bleibt. Anschließend führt die AC²-Starter-Benutzeroberfläche einige Plausibilitätstests durch und warnt vor bzw. verhindert ungültige oder nicht unterstützte Nutzereingaben. Zum Beispiel ist die Auswahl von bisher nicht miteinander kombinierbaren AC² Komponenten wie COCOSYS und NuT ausgegraut und somit nicht auswählbar. Nach dem Starten wird der laufenden Simulation ein neuer Reiter mit Log-Fenster und Steuerelementen zugewiesen. Im integrierten Log-Fenster erscheint zuerst der konkret verwendete Kommandozeilenaufwurf der eigentlichen AC²-Komponenten. Damit hat der Anwender eine funktionierende Startkonfiguration, mit der auch ohne Benutzeroberfläche der konfigurierte Simulationslauf gestartet werden kann. Das ist besonders für die automatisierte Stapelverarbeitung hilfreich. Die Konsolenausgaben der Rechnungen werden umgeleitet und im zugehörigen Log-Fenster zusammengefasst ausgegeben. Warnungen oder Fehlerausgaben werden in roter Farbe hervorgehoben. Über dem Log-Fenster befinden sich je nach Verfügbarkeit Steuerelemente, mit denen beispielsweise das Erstellen eines Restartpunktes oder das Pausieren der Rechnung zur Laufzeit möglich ist.

Über das Menü sind weitere Hilfsprogramme wie die ATHLET-Utilities für das Post-Processing, sowie GCSM und ATHLET Input Graphics direkt aufrufbar. Hinzu kommt die Dokumentation von ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und NuT. Die Menüeinträge werden automatisch aus der Verzeichnisstruktur der AC² Installation generiert und angezeigt. Die Erweiterung oder Anpassung der Hilfsprogramme oder der Dokumentation kann damit wartungsarm ohne Anpassungen am AC²-Starter selbst geschehen.

Im Menüpunkt Hilfe befindet sich ein Hinweis zur aktuellen Version, sowie weitere Referenzen auf die Softwarelizenzen Dritter, die im AC² Paket eingesetzt werden.

Der AC²-Starter ist in C++ geschrieben und basiert auf einer aktuellen Version der freien Open Source Bibliothek Qt 5 (<https://doc.qt.io/qt-5/qt5-intro.html>). C++ und Qt sind weit verbreitet und haben eine aktive Community, was Grundvoraussetzung dafür ist, dass die darauf aufbauende Software lange und nachhaltig bestehen kann.

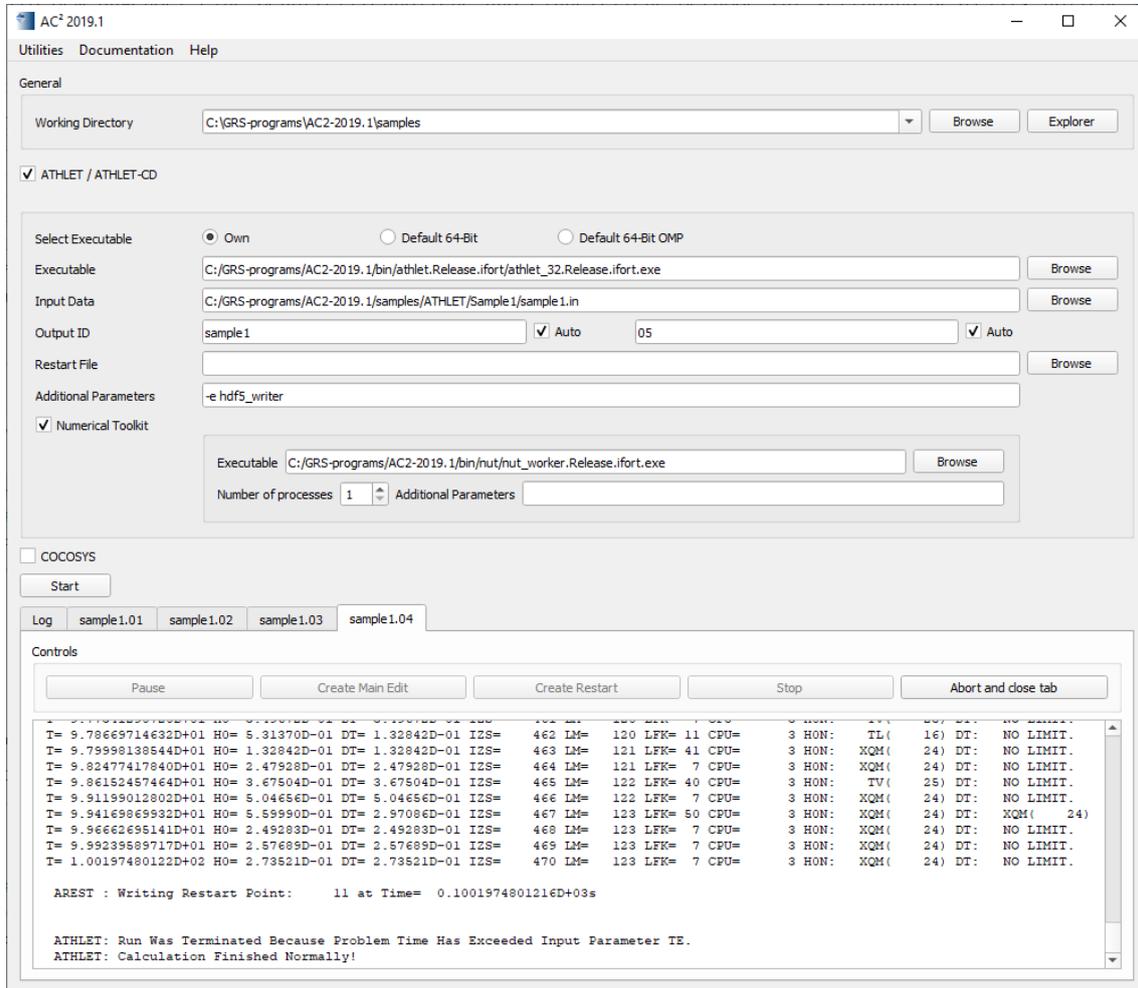


Abb. 6.10 AC²-Starter-Benutzeroberfläche nach Ausführung einer Simulation

6.7 AC² Installationspaket

Aufgabe des Installationspaketes ist es, ein einsatzfähiges AC² Komplettpaket für den Anwender zur Verfügung zu stellen. Bestandteil des Installationspaketes ist die Festlegung der Zielplattformen, die dortige Einrichtung der Entwicklungsumgebung, die die Anforderungen aller Projekte erfüllen muss, das Zusammenstellen und Herunterladen sämtlicher Quellcodes aller Projekte in der korrekten Version, das Kompilieren/Erstellen der Projekteartefakte, die Extrahierung der Artefakte und Einordnung in die

AC²-Distribution und abschließend das Konfigurieren und Erstellen des ausführbaren Installationspaketes mithilfe jeweiliger plattformspezifischer Werkzeuge.

Die AC²-Codes sollten auf einem gewöhnlichen aktuellen Anwendersystemen ohne spezielle Voraussetzung installierbar und lauffähig sein. Daher ist es wichtig, dass alle erforderlichen Abhängigkeiten, die normalerweise nur auf einem Entwicklersystem vorinstalliert sind, mit ausgeliefert werden und dies auf Vollständigkeit überprüft wird. Zum Testen wird für jede Zielplattform ein Referenzsystem definiert, das dem eines durchschnittlichen Anwendersystems möglichst nahekommt. Für Windows® kam ein frisch installiertes Windows 7® und Windows 10® zum Einsatz und als weit verbreitete generische Linux-Distribution wurde Ubuntu 16 verwendet. Zusätzlich war die Lauffähigkeit auf dem internen GRS-Rechencluster Manni erforderlich. Dieser ist aufgrund seiner älteren Systembibliotheken nicht mit Ubuntu 16 kompatibel und muss daher separat behandelt werden, wird jedoch noch in 2021 ersetzt werden. Insgesamt ergeben sich daraus drei Installationspakete pro Veröffentlichung: Windows®, Linux und GRS-Rechencluster Manni.

Die Installationspakete der beiden letzten Programmveröffentlichungen AC²-2019.0 und AC²-2019.1 umfassen folgende Hauptkomponenten:

- AC²-Starter
- ATHLET Programm
 - Plugin Schnittstellen
 - ATHLET Werkzeuge, AIG, GIG, APTPLOT
 - ATHLET Beispieldatensätze
- ATHLET-CD Programm
- COCOSYS Programm
 - COCOSYS Werkzeuge
 - COCOSYS Beispieldatensätze
- Numerical Toolkit
- ATLAS
- libadt/makelt

- OpenFoam-Erweiterung und Beispiele
- Laufzeitbibliotheken
- Programmdokumentation
- Lizenzinformationen zu Softwarekomponenten Dritter

Die gelisteten Komponenten liegen überwiegend in Form von Quellcode vor und müssen zuerst in Artefakte übersetzt werden. Das können ausführbare Anwendungen, Bibliotheken, aber auch Dokumentationen in PDF-Form sein. Dafür wird eine funktionsfähige Entwicklungsumgebung benötigt, die den Anforderungen aller Komponenten gerecht wird. Im Wesentlichen werden folgende Entwicklerwerkzeuge für die AC²-2019.x Programmpakete benötigt:

- Microsoft® Visual Studio 2015 64/32-bit ([Visual Studio IDE, Code-Editor, Azure DevOps und App Center - Visual Studio \(microsoft.com\)](#)) und Cygwin (Windows) (<https://www.Cygwin.com>)
- GCC 7.2.0 Compiler ([GCC 7 Release Series - GNU Project - Free Software Foundation \(FSF\)](#)) und Maketools (Linux) (<https://maketools.com/>)
- Intel® Fortran Compiler 2016 Update 4 (<https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/oneapi/components/fortran-compiler.html>)
- Intel® MPI SDK 2018 Update 4 (<https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/oneapi/components/mmpi-library.html>)
- Qt 5.12.4 (https://wiki.qt.io/Qt_5.12_Release), MOTIF (Linux) (<https://motif.ics.com/>) und MFC (Windows) (<https://docs.microsoft.com/de-de/cpp/mfc/mfc-desktop-applications?view=msvc-160>) für grafische Oberflächen
- Subversion (<https://www.collab.net/>), Git /CHA 20/ und Python 3 (<https://www.python.org/download/releases/3.0/>)
- Pandoc (<https://pandoc.org/>), R (<https://www.r-project.org/>), chmProcessor (<https://sourceforge.net/projects/chmprocessor/>), Latex Distribution (<https://www.latex-project.org/get/>) für die Dokumentation

Die Entwicklungsumgebungen wurden auf Jenkins Linux, Jenkins Windows /JEN 21/ und dem Manni-Cluster eingerichtet. Die Verwendung der Jenkins-Systeme hat den Vorteil, dass es sich zum einen um ein weitgehend unabhängiges und zentrales System handelt und sich zum anderen die Erstellung der Installationspakete voll automatisieren lässt. Dadurch kann es von mehreren Entwicklern eingesehen und eingesetzt werden. Durch die Automatisierung ist das Erstellen des Installationspaketes selbst dokumentierend, wodurch der Fall vermieden wird, dass nur ein einziger Entwickler in der Lage ist, das Installationspaket anzufertigen.

Als Bestandteil der Entwicklungsumgebung wurden die Open-Source Bibliotheken PETSc /BAL 21/, HDF5 und Qt kompiliert. Letztere wurde mithilfe eines Dockerfiles für Windows und Linux kompiliert und ermöglicht die Übersetzung von Qt genau zu reproduzieren. Dies unterstützt die Einhaltung der LGPL 3.0 Lizenz /FSF 07/ und steht dem Anwender bei Bedarf auf der User-Area zur Verfügung.

Im nächsten Schritt wird für jede Komponente die passende Entwicklungsumgebung geladen und alle spezifischen Befehle zum Erstellen des Projektes ausgeführt. Nach Überprüfung der fehlerfreien Übersetzung werden die benötigten Dateien in die spätere Zielverzeichnisstruktur kopiert. Die Verzeichnisstruktur wurde so angelegt, dass keine Konflikte zwischen den Komponenten auftreten und zeitgleich von mehreren Komponenten genutzte Bibliotheken auch gemeinsam genutzt werden können, ohne Duplikate zu erzeugen.

Die fertig zusammengestellten Programme, Hilfswerkzeuge, Dokumentationen und Beispiele werden nun zum fertigen AC² Installationspaket zusammengefasst. Dieser Schritt gewährleistet den sicheren und einfachen Transfer zum Anwender. Die Größe sämtlicher Dateien wird durch Kompression verringert und diese dann in eine einzelne Datei gepackt, die dadurch komfortabel und schneller herunterladbar ist. Beim Entpacken wird zudem die Integrität der Dateien mithilfe von Prüfsummen sichergestellt, sodass Übertragungsfehler keine negativen Auswirkungen auf den Betrieb haben können. Anschließend werden die minimalen Systemvoraussetzung durch den Installationsprozess überprüft, um die Erfüllung der Anforderungen an das Betriebssystem vor der Ausführung sicherzustellen. Andernfalls kann dies ebenfalls zu Fehlverhalten der Codes bis hin zum Absturz führen. Fehlende Bibliotheken werden daher entweder unmittelbar durch das Installationsprogramm automatisch mitinstalliert oder der Anwender bekommt eine klare Fehlermeldung mit Informationen darüber, wie die nicht gegebene Anforderung erfüllt werden kann. Außerdem werden die Installationspfade von ggf. vorinstallierten

Bibliotheken Dritter wie MPI ermittelt und systemweit gespeichert, sodass die AC²-Komponenten bei der Ausführung darauf gezielt zugreifen können. Zusätzlich werden je nach Betriebssystem durch das Installationsprogramm einige Komfortfunktionen angeboten. Dazu gehört das Erstellen von Desktopverknüpfung, die Möglichkeit das Programmpaket einfach wieder entfernen zu können und eine benutzerdefinierte Auswahl an zu installierenden Komponenten, falls eine volle Installation nicht gewünscht ist.

Unter Windows wird dafür das freie Programm InnoSetup verwendet [RUS 21]. Es erstellt aus dem Installationsverzeichnis und einem Konfigurationsskript ein ausführbares Installationspaket. Für die Linux Plattform wird diese Aufgabe mithilfe eines dafür entwickelten Skriptes übernommen.

Ein Großteil der Arbeiten bestand darin, die vielen Projekte, die völlige unterschiedliche Anforderungen haben und bisher unabhängig voneinander veröffentlicht wurden, zu einem großen Paket zu konsolidieren.

Besondere herausfordernd war der Umstand, dass auf dem derzeitigen GRS-Cluster „Manni“ eine sehr alte glibc Systembibliothek der Version 2.11.3 aus dem Jahre 2010 installiert ist. Diese kann nicht aktualisiert werden, ohne andere Programme zu beeinflussen und ist teilweise mit modernen Bibliotheken nicht mehr kompatibel. Aus dem Grund mussten dort beispielsweise die Programme mit grafischen Benutzeroberflächen gesondert modifiziert werden, damit sie lauffähig sind. Die sonst eingesetzte Bibliothek Qt der Version 5.12.4 konnte ebenfalls nicht kompiliert werden. Durch ausgiebiges Testen und Konfigurieren konnte allerdings die etwas ältere Qt Version 5.10.1 einsatzfähig gemacht werden. Zudem müssen auf dem Manni-Cluster der Erstellungsprozess des Installationspaketes und die anschließende Installation bisher manuell ausgeführt werden. Der Manni-Cluster wird Anfang 2021 durch das Nachfolgesystem Manitu abgelöst. Letzterer ist nach bisheriger Einschätzung voll kompatibel zu aktuellen generischen Linux-Distributionen, womit dieser Wartungsaufwand entfallen sollte.

Auch die Verwendung der Jenkins-Server für Continuous Integration erforderte erheblichen Pflegeaufwand. Zwischen den einzelnen Veröffentlichungen mussten beide Jenkins-Server aus Wartungsgründen komplett neu installiert werden, wodurch die gesamte Arbeit zur Einrichtung und Konfiguration der Entwicklungsumgebung verloren ging. Weiterhin kam erschwerend hinzu, dass die Jenkins-Server mehreren Projekten zur Verfügung stehen und Änderungen an der Entwicklungsumgebung durch andere Projekte nur schwer zurückverfolgt oder rückgängig gemacht werden können. Auch hier

musste die Entwicklungsumgebung wiederholt zeitaufwändig wieder funktionstüchtig gemacht werden. Für zukünftige Veröffentlichungen wird die Verwendung der GitLab-CI /GIT 21a/ angestrebt, wodurch sich die genannten Probleme vermeiden lassen können.

6.8 Tutorials

Zusätzlich zu der vorhandenen Programmdokumentation und den mit ATHLET verteilten Beispieldatensätzen wurden erstmalig Video-Tutorials als zusätzlicher Kanal zur Wissensvermittlung erstellt. Um neuen Anwendern die Einarbeitung in ATHLET zu erleichtern und die korrekte Programmanwendung nahezubringen, wurden dedizierte Schulungsvideos zur Bedienung von ATHLET und dem Post-Processing mit AIG und ATLAS erstellt.

6.9 Zusätzliche Samples

Grundsätzlich und unabhängig von ATHLET liegt eine wesentliche Fehlerquelle bei der Durchführung einer Simulation in der falschen Anwendung des eingesetzten Rechenprogramms. Um Anwenderfehlern entgegenzuwirken, werden zusammen mit dem ATHLET-Programm mehrere Anwendungsbeispiele verteilt, um exemplarisch u. a. die Nodalisierung des Kühlkreislaufs oder den Einsatz verschiedener Modelle im Rahmen einer Störfallsimulation zu illustrieren. Die Testfälle wurden durch zusätzliche Samples ergänzt, die durch schriftliche Tutorials dokumentiert sind, um somit insbesondere neue Programmanwender stärker als bisher bei der Einarbeitung zu unterstützen.

6.9.1 Generisches WWER-Sample

Vor dem Hintergrund, dass ATHLET von internationalen Institutionen u. a. für die Simulation von VVER eingesetzt wird, wurde ein Datensatz eines generischen VVER-1000 erstellt. Dieser Datensatz wurde zur Anwenderunterstützung in die ATHLET-Samples, welche ein Antragsteller üblicherweise zusammen mit dem ausführbaren Programm erhält, aufgenommen. Datenbasis für den generischen Reaktor waren Dokumentationsunterlagen zu konkreten Realanlagen; die dort enthaltenen, anlagenspezifischen Daten wurden unkenntlich gemacht – z. B. durch Mittelung verschiedener Größenangaben oder durch grobes Runden. Der Datensatz enthält einen Einkanal-Kern, einen Vierkanal-Downcomer, vier separate Loops mit Pumpen und horizontalen Dampferzeugern sowie einen Druckhalter mit Volumenausgleichsleitung als Komponenten des Primärkreises.

Die Dampferzeuger sind sekundärseitig als offene Systeme modelliert. Modellierte Systeme zur Nachzerfallswärmeabfuhr sind vier Hydro-Akkumulatoren als passive Komponenten des Emergency Core Cooling System (ECCS) sowie das Hoch- und Niederdruckeinspeisesystem als passive ECCS-Subsysteme. Die einzelnen Komponenten (Pumpen, Tanks, etc.) von Hoch- und Niederdruckeinspeisesystem sind durch GCSM-Signale abgebildet. Die Systeme BRU-K und BRU-A zur Druckbegrenzung sind ebenfalls modelliert. Der im Beispieldatensatz angelegte Störfall ist ein 200 cm² großes Leck im kalten Strang. Der wesentliche Ereignisablauf innerhalb der ersten 60 s nach Störfallbeginn ist wie folgt:

- Reaktorschnellabschaltung
- Turbinenabsperrung
- Abschalten der Hauptspeisewasserpumpen
- Thermische Leistung im Reaktorkern folgt Nachzerfallswärmekurve
- Abschalten der Hauptkühlmittelpumpen
- Aktivierung der Umleitstation BRU-K und Abblaseregelventile BRU-A
- Aktivierung aller ECC Systeme

Zusätzlich zum Beispiel-Datensatz wurde eine zur Anwenderführung geeignete kurze Datensatz- und Störfallbeschreibung erstellt.

6.9.2 Einstiegsdatensätze

Neben den bereitgestellten generischen und teilweise stark vereinfachten Anlagendatensätzen wurden dem Programm weitere Einstiegsdatensätze mit einfachen thermohydraulischen Netzwerken hinzugefügt, die insbesondere Anwendern ohne Erfahrung mit thermohydraulischen Rechencodes den selbstständigen Einstieg in ATHLET erleichtern sollen.

7 Anwenderunterstützung, nationale und internationale Zusammenarbeit

7.1 Anwenderunterstützung und Erfahrungsrückfluss

Um den wichtigen persönlichen Austausch zwischen Programmentwicklern und -anwendern einerseits sowie zwischen Programmanwendern verschiedener Organisationen andererseits zu fördern, organisiert die GRS in regelmäßigen Abständen internationale Anwendertreffen in den Räumlichkeiten der GRS. Im November 2018 wurde ein dreitägiges Meeting in der GRS Garching mit ca. 50 externen Teilnehmern erfolgreich durchgeführt. Im Rahmen dieser mehrtägigen Veranstaltung stellten sowohl GRS-Mitarbeiter als auch GRS-externe Nutzer aktuelle Fortschritte und Ergebnisse bei der Programmentwicklung bzw. der Programmvalidierung und -anwendung vor. Im Rahmen zahlreicher bilateraler Gespräche wurden aktuelle Fragen diskutiert und nächste Arbeitsschritte festgelegt.

Darüber hinaus wurden zahlreiche Programmanwender bei ihrer Arbeit mit ATHLET unterstützt. Die Arbeiten umfassten u. a.:

- Unterstützung bei der Erstellung eines PKL-Datensatzes (KIT)
- Unterstützung der am IKE durchgeführten Modellentwicklung zur Simulation innovativer, autarker Nachwärmeabfuhrsysteme
- Technische Unterstützung bei der Verwendung der neu von der GRS bereitgestellten Plugin Schnittstelle für Wärmeübergangskorrelationen zu überkritischem Wasser (KIT)
- Aktualisierung und Bereitstellung von speziellen Werkzeugen zur 3D-Visualisierung von Strömungsvorgängen im RDB (angefragt von HZDR)
- Unterstützung der Vorarbeiten zur Kopplung von ATHLET mit preCICE (TUM)
- Unterstützung bei der Simulation eines Wärmespeichers mit ATHLET (HSZG)
- Diverse Anwenderunterstützungen, z. B. bei der Simulation eines Lastabwurfes mit thermohydraulischem Turbinen- und Kondensatormodell (hier führten Anwenderfehler bei der Modellierung zu unrealistisch hohen Temperaturen im Kondensator)

- Bereitstellung der homologen Kurven (4-Quadrantenkurven) des Pumpenmodells im ASCCI-Format (in Ergänzung zu einem binären Format). Dies vereinfacht die Analyse der Daten für die Anwender.

Die im Rahmen der Anwenderunterstützung gewonnenen Erkenntnisse konnten in vielfältiger Weise zur weiteren Programmverbesserung genutzt werden. Neben der Flexibilisierung und Erweiterung des Einsatzbereichs verschiedener Modelle (siehe z. B. auch Kapitel 6.3 und 6.4) wurden an vielen Stellen Fehlerprüfungen des Eingabedatensatzes sowie Programmausgaben ergänzt, um den Nutzer stärker bei der Arbeit mit ATHLET zu führen. Somit hat sich die enge Zusammenarbeit mit der Programmanwendung als wichtiger Aspekt der kontinuierlichen Programmertüchtigung und -pflege zum langfristigen Nutzen aller Codeanwender erwiesen.

7.2 Unterstützung der externen Programmentwicklung

Um externen Entwicklern die Möglichkeit zu geben, ATHLET auf einfache Weise z. B. mit neuen Korrelationen für den Wärmeübergang zu erweitern, bietet ATHLET die Plugin-Technologie an. ATHLET wird mit einigen Beispielplugins ausgeliefert, die externe Entwickler als Basis für ihre eigenen Arbeiten verwenden können. Von dem Lehrstuhl für Energiesysteme der TU München kam der Wunsch, von diesen Plugins aus auf die ATHLET-Stoffwertberechnung zugreifen zu können, um von der selbst entwickelten Korrelation benötigte Stoffwerte für überkritisches Wasser bestimmen zu können. Diese Möglichkeit wurde von der GRS geschaffen und das MHTCEXT-Plugin beispielhaft mit entsprechenden Aufrufen ausgestattet. Die Neuentwicklung wurde dem Lehrstuhl zugänglich gemacht und sofort für die aktuellen Forschungsarbeiten genutzt.

Die RUB arbeitet aktuell an der Verbesserung der ATHLET-Modellierung zu Druckstößen. Zuletzt wurden Arbeiten zur Implementierung der instationären Reibung unterstützt, die für die Simulation der Druckverluste bei hochtransienten Vorgängen von Bedeutung ist.

Allen GRS-externen Programmentwicklern, zu denen u. a. auch HSZG (Stoffwertbibliothek, siehe Kapitel 5.5.2, das IKE (ATHLET-CD) und das HZDR (Kopplung ATHLET-DYN3D) zählen, wurde über Teamforge/Subversion bzw. nach dem Wechsel zu Git/GitLab /GIT 21b/ über einen zweiten GitLab-Server ein Zugang zum Quellcode eingerichtet, um gemeinsame Entwicklungen effizient betreiben zu können.

7.3 SAPIUM

7.3.1 Ausgangssituation

Die früheren internationalen Projekte des OECD/NEA/CSNI mit Bezug zu Unsicherheitsanalysen, vor allem BEMUSE, haben gezeigt, dass die Quantifizierung von Modellunsicherheiten eine entscheidende Rolle für die Qualität einer Unsicherheitsanalyse spielt. Aus diesem Anlass wurde das Projekt PREMIUM zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten definiert, um die Methoden zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten auf der Basis von Combined Effect Tests (CET) /SKO 13/ in einem Benchmark gegenüberzustellen. Die Ergebnisse des Benchmarks waren überraschend /SKO 19b/. Es hat sich gezeigt, dass:

- Die Ergebnisse der Quantifizierung der Modellunsicherheiten stärker abhängig waren von der Methode der Quantifizierung als von dem Systemcode, dessen Modellunsicherheiten quantifiziert wurden,
- Die Auswahl und Erstellung der experimentellen Daten für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten die Basis für eine erfolgreiche Quantifizierung bildete,
- Die Auswahl der Modellparameter sowie der geeigneten experimentellen Messungen für die Quantifizierung von großer Bedeutung waren,
- Die Qualität der Eingabedatensätze, die während der Quantifizierung genutzt wurden, die Ergebnisse stark beeinflusste.

Diese Erkenntnisse haben gezeigt, dass trotz der verwendeten, formalisierten Methoden die Art der Anwendung der Methoden, die Erstellung der experimentellen Basis und die Auswahl der Modelle und Parameter einen entscheidenden Einfluss auf die Ergebnisse der Quantifizierung haben.

Dies gab den Anstoß zur Bildung einer internationalen Gruppe im Rahmen des OECD/NEA SAPIUM Projekts mit dem Ziel der Entwicklung einer Methodik, die als „Good practice guide“ formuliert sein soll und die für die Quantifizierung der Modellunsicherheiten grundsätzlich empfohlen werden kann. Die Teilnehmer dieser Projektgruppe sind: IRSN, Tractebel, CEA, NINE, CSN/UPS, GRS, EdF und JAEA. Der „Good practice guide“ ist für die Durchführung von sogenannten „Best estimate plus uncertainty“ (BEPU) Analysen auf dem Gebiet Reaktorsicherheit und vor allem zur Unterstützung von Programmmanwendern gedacht /BAC 20a/. Deswegen unterscheidet sich die

Vorgehensweise von der in der GRS entwickelten Methodik, die die Quantifizierung von Modellunsicherheiten als erweiterte Code-Validierung betrachtet /SKO 19a/.

Im Rahmen des vorangegangenen Projekts RS1538 wurde an der Erstellung dieser Methodik gearbeitet. Die GRS war in die Ausarbeitung aller wesentlichen Bestandteile der Methodik involviert und hat Beiträge zur Erstellung der experimentalen Datenbasis, zur Durchführung der Quantifizierung, sowie zur Validierung der quantifizierten Unsicherheiten geliefert. Außerdem war die GRS federführend beteiligt bei Analysen zu Skalierungseffekten bei der Quantifizierung von Modellunsicherheiten.

7.3.2 „Good practice guide“ für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten

Die grundlegenden Konzepte und wichtigen Elemente der Methodik für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten wurden im internationalen Umfeld, auf Konferenzen und in den Zeitschriften präsentiert und zur Diskussion gestellt /BAC 19/, /OEC 19/. Auf der Basis der ausgearbeiteten Methodik wurde im Rahmen des Projekts SAPIUM ein „Good practice guide“ zur Quantifizierung von Modellunsicherheiten erstellt und veröffentlicht /BAC 20a/, /BAC 20b/. Die grundlegenden Elemente dieser Methodik sind in Abb. 7.1 dargestellt.

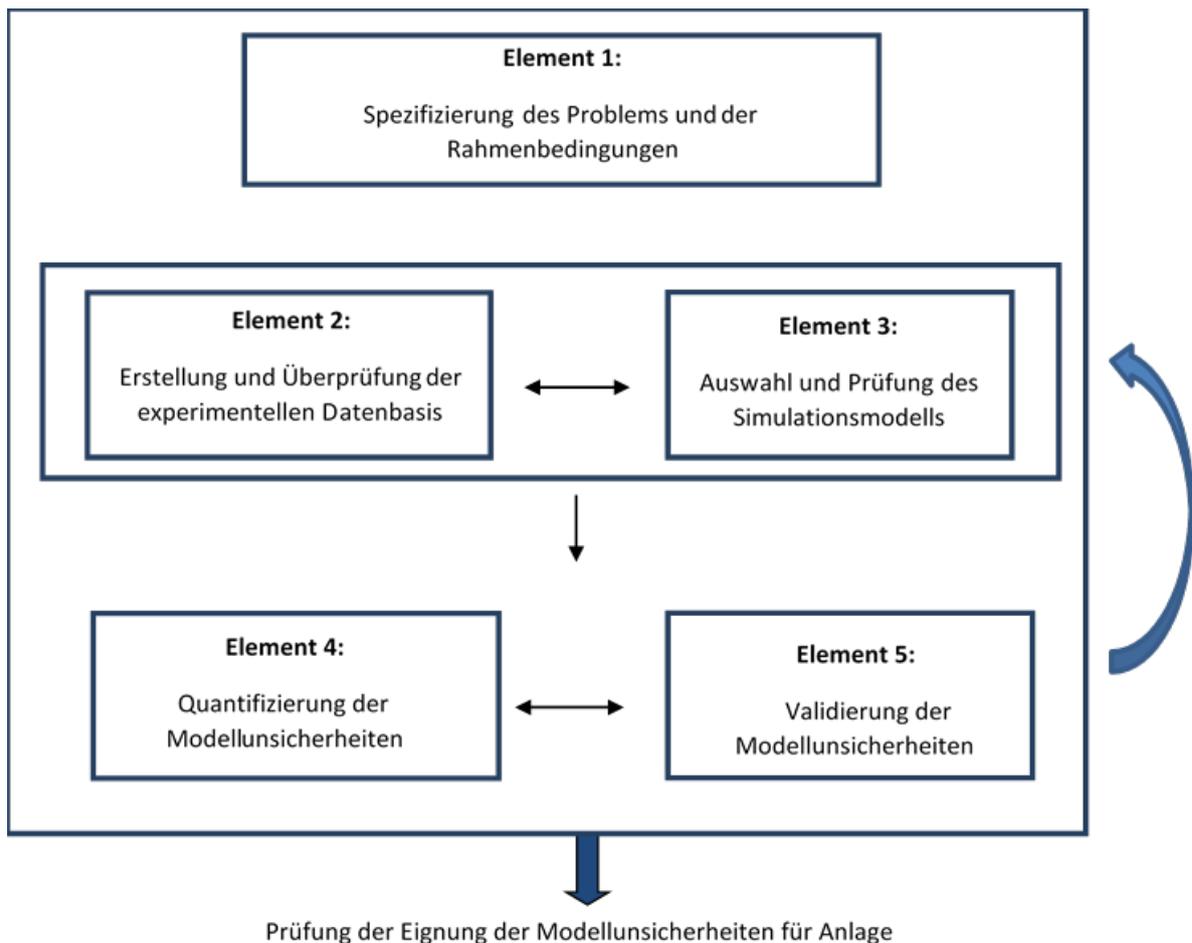


Abb. 7.1 Elemente der SAPIUM-Methodik

Jedes der fünf Elemente aus Abb. 7.1 ist in Schritte unterteilt, die wichtige Etappen einer Quantifizierung definieren.

Element I: Spezifizierung des „Inverted Uncertainty Problems“ und der Rahmenbedingungen.

- Schritt 1: Spezifizierung des Ziels der Modellunsicherheiten-Quantifizierung.
- Schritt 2: Auswahl der relevanten „System Response Quantities“
- Schritt 3: Identifizierung der wichtigen Phänomene

Element II: Erstellung und Überprüfung der experimentellen Datenbasis für die Quantifizierung von Modellunsicherheiten.

- Schritt 4: Auflisten zur Verfügung stehender Experimente und Erstellung einer einheitlichen Beschreibung für jedes Experiment

- Schritt 5: Überprüfung der Eignung der Datenbasis für die beabsichtigte Quantifizierung
- Schritt 6: Auswahl und Aufteilung der experimentellen Datenbasis für den Zweck der Quantifizierung und Validierung

Element III: Auswahl und Überprüfung des Simulationsmodells

- Schritt 7: Entwicklung und Überprüfung der Simulationsmodelle, insbesondere der Eingabedatensätze für die Simulation der Experimente aus der erstellten Datenbasis
- Schritt 8: Identifizierung der wichtigen unsicheren Eingabeparameter
- Schritt 9: Entwicklung und Überprüfung Fehlermetriken (für Vergleich Simulation – Experiment) und Festlegung der notwendigen/geeigneten Genauigkeit für die Qualifizierung der Simulationsmodelle

Element IV: Quantifizierung der Modellunsicherheiten durch „Inverted Uncertainty“

- Schritt 10: Zusammenfassung der Information von verschiedenen Experimenten und von dem Simulationsmodell zur Verwendung beim Verfahren der Inverted Propagation
- Schritt 11: Quantifizierung von Modellunsicherheiten durch Inverted Uncertainty Propagation
- Schritt 12: Zusammensetzung der Modelleingabeunsicherheiten für den Fall, dass mehrere Quantifizierungsprozesse durchgeführt worden sind
- Schritt 13: Bestätigung der Ergebnisse des Inverted Uncertainty Propagation Verfahrens

Element V: Validierung der quantifizierten Modellunsicherheiten

- Schritt 14: Identifizierung und Definition der Eingabeunsicherheiten, die bei der Vorwärts-Unsicherheitsanalyse (Validierung) berücksichtigt werden sollen
- Schritt 15: Unsicherheitsanalysen basierend auf Eingabeunsicherheiten aus Propagation
- Schritt 16: Vergleich der Ergebnisse der numerischen Analysen mit experimentellen Daten unter Verwendung der Validierungsindikatoren

- Schritt 17: Iterationsschritt Quantifizierung – Validierung für den Fall, dass die Akzeptanzkriterien nicht erreicht worden sind

Je nach Anwendung und Bedarf muss ggf. eine Überprüfung der Eignung der quantifizierten Modellunsicherheiten für die betreffende Anlage bzw. den Reaktor, für welchen die Unsicherheitsanalyse erfolgen wird, durchgeführt werden, unter besonderer Berücksichtigung von Skalierungseffekten.

Die detaillierte Darstellung der einzelnen Schritte inklusive entsprechender Empfehlungen ist in dem „Good practice guide“ ausführlich dargestellt, der als OECD/NEA/CSNI Bericht /BAC 20b/ veröffentlicht wurde.

7.4 OECD/NEA-RBHT-Benchmark

Die zum OECD/NEA RBHT (Rod Bundle Heat Transfer) Projekt gehörigen Experimente wurden an der gleichnamigen Testanlage an der Pennsylvania State University durchgeführt. Diese Experimente sollen in offenen und blinden Tests als Benchmark für eine Vielzahl von Simulationscodes dienen.

Die Anlage besteht aus einem vertikalen 7x7-Bündel, welches in einem quadratischen von unten mit Wasser durchflossen wird. Die vier Stäbe in den Ecken sind unbeheizt, die übrigen 45 besitzen ein dreieckiges verschobenes Leistungsprofil, dessen Leistungsmaximum bei 75 % der beheizten Länge liegt. Die maximale Leistung beträgt hierbei das Dreifache des oberen und unteren Endes.

Für die offenen Tests wurden 11 Experimente simuliert, in denen Heizleistung, Kühlmittelmassefluss, Kühlwassertemperatur und Initialtemperatur der Heizstäbe variiert wurden. Alle Experimente fanden bei etwa dem gleichen Druck statt.

Speziell verwendet O-7 einen oszillierenden und O-8 einen stufenweise abnehmenden Massefluss, der bereits nach kurzer Zeit sehr gering ist. Auch O-9 zeichnet sich durch sehr langsamen Kühlmittelfluss aus. Im Kontrast dazu wird in O-3, O-4, O-5 und O-11 ein relativ hoher Massestrom verwendet. O-10 ist der einzige Test, in dem die Heizleistung im Laufe des Experiments abnimmt.

Der experimentelle Aufbau wurde in ATHLET mit zwei durch ein Cross-Connection-Object verbundenen Kanälen reproduziert. Der innere Kanal enthält die zentralen 25 Heizstäbe, äußere Kanal enthält die übrigen 20 beheizten sowie die 4 unbeheizten Stäbe

und spiegelt die initiale Temperaturverteilung der Außenwand wider. Die beheizte Länge wurde hierbei in 21 Kontrollvolumen unterteilt. Die geometrische Verengung durch die verwendeten Spacer wurde ebenfalls in der Geometrie berücksichtigt. Die Nodalisierung ist in Abb. 7.2 dargestellt.

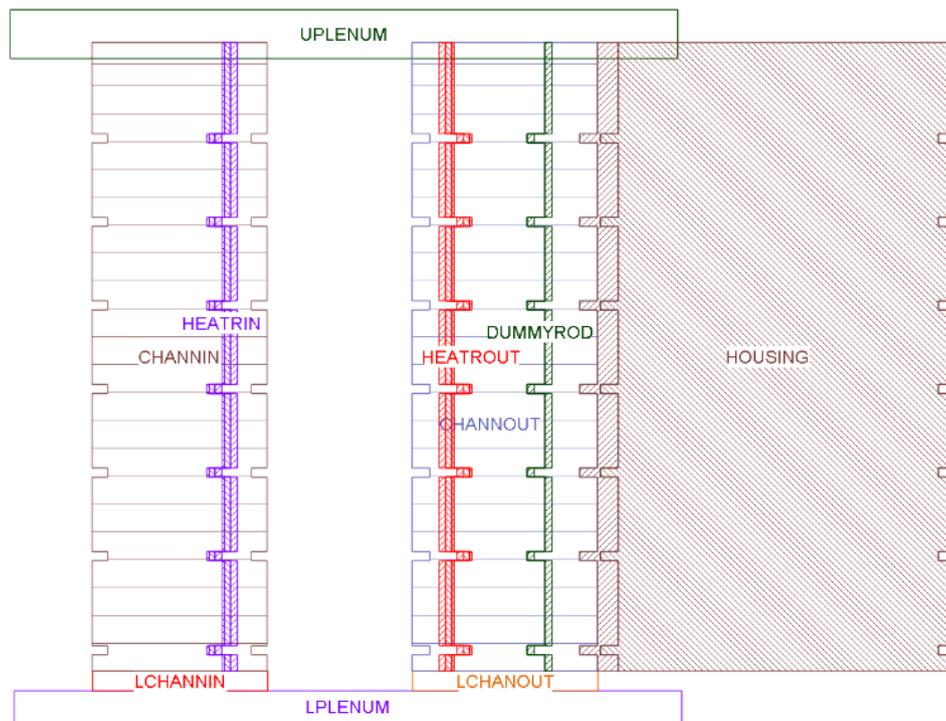


Abb. 7.2 Nodalisierung des RBHT-Aufbaus

Wesentliche Messgrößen im Experiment waren Oberflächentemperaturen auf den Heizstäben (nachfolgend mit Heizstabtemperatur bezeichnet), der Druckverlust über das Bündel sowie die aus dem Bündel ausgetragene Wassermasse.

Die experimentellen Ergebnisse konnten überwiegend gut reproduziert werden. Einen Überblick über alle Ergebnisse geben Abb. 7.3 und Abb. 7.4. Abb. 7.3 zeigt für alle Versuche einen Vergleich der maximalen Oberflächentemperaturen der Heizstäbe (PCT) zwischen Experiment und Simulation. Fast alle Nachrechnungen ergeben eine Abweichung von weniger als 5 %. Nur O-8 und O-9 zeigen größere Abweichungen. Ähnliches gilt für die Quenchzeit in Höhe der maximalen Leistung (Abb. 7.4). Mit Ausnahme von O-8 und O-9 weichen alle Nachrechnungen weniger als 10 % ab. O-8 und O-9 quenchen demgegenüber an der Position der maximalen Heizstabtemperatur mehr als 20 % zu früh.

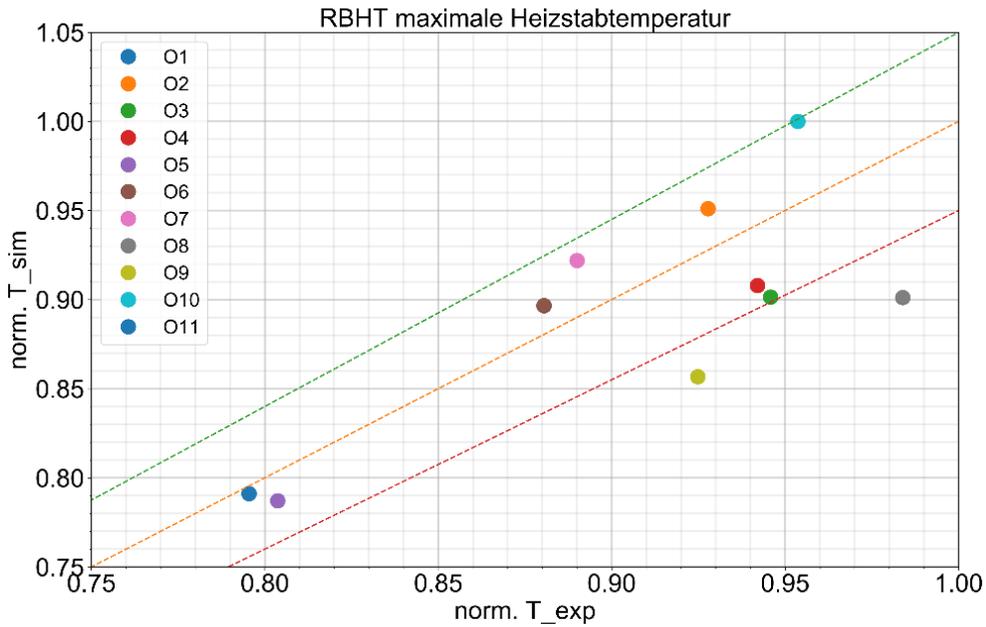


Abb. 7.3 Die normierten, maximal erreichten Heizstabtemperaturen in Experiment und Simulation. Die gestrichelten Linien markieren ein Verhältnis von 1 zu 1, sowie eine Abweichung von 5 % in beide Richtungen

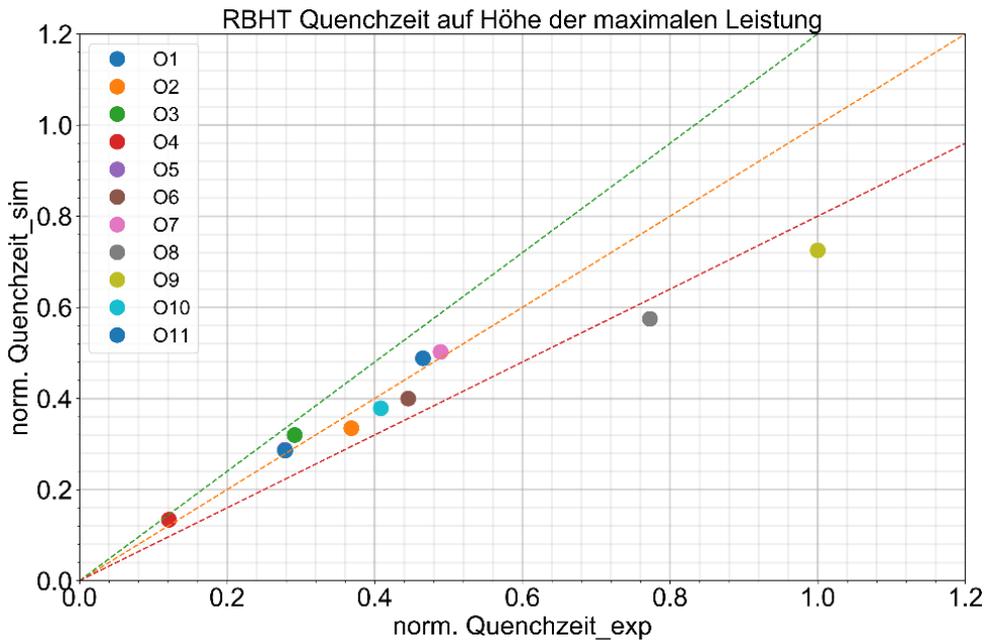


Abb. 7.4 Quenchzeiten an der Position der maximalen Leistung in Experiment und Simulation. Die gestrichelten Linien markieren ein Verhältnis von 1 zu 1, sowie eine Abweichung von 20 % in beide Richtungen

Eine detailliertere Analyse der einzelnen Nachrechnungen zeigt, dass die berechneten Temperaturverläufe der Heizstäbe insgesamt gut mit experimentellen Daten übereinstimmen. Die Abweichungen sind für den Großteil der Versuche gering, der

Abkühlprozess läuft tendenziell etwas zu schnell ab, wodurch die Sättigungstemperatur an der Heizstaboberfläche leicht verfrüht erreicht wird. Die Temperatur eines Heizstabes nahe der Position der höchsten Leistung ist für die Tests O-1 und O-10 in Abb. 7.5 und Abb. 7.6 dargestellt. Für diese beiden Tests wird die maximale Hüllrohrtemperatur geringfügig überschätzt, insgesamt aber sehr gut getroffen.

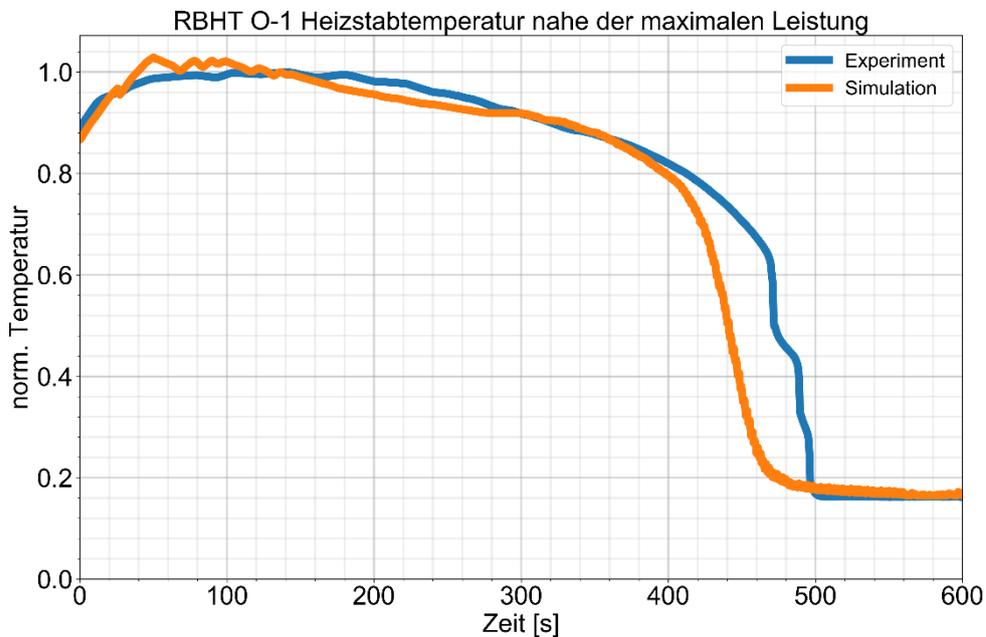


Abb. 7.5 Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-1

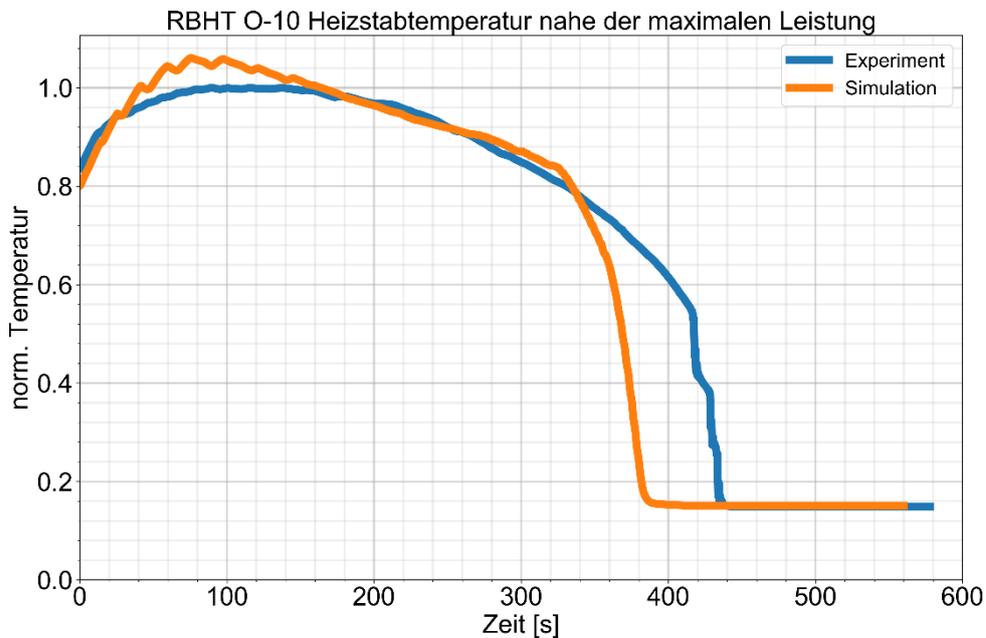


Abb. 7.6 Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-10

Die meisten Simulationen zeigen nach anfänglicher Überschätzung eine gute Übereinstimmung hinsichtlich des Anteils des austretenden flüssigen Wassers bezogen auf das eingespeiste Kühlmittel (Liquid Carryover Fraction). Die Ergebnisse für diesen Carryover-Anteil verbesserten sich sichtlich, nachdem der Datensatz von einer Simulation mit einem Kanal für das Bündel (Abb. 7.7) auf einen zentralen und einen peripheren Kanal umgestellt worden war (Abb. 7.8). Diese Modellertüchtigung erlaubt es außerdem, den Einfluss der unbeheizten Stäbe und Wärmeverluste an der Außenwand eher am Rand des Bündels statt in der stärker beheizten Mitte zu berücksichtigen und die anfängliche Temperaturverteilung in der Wand besser zu reproduzieren.

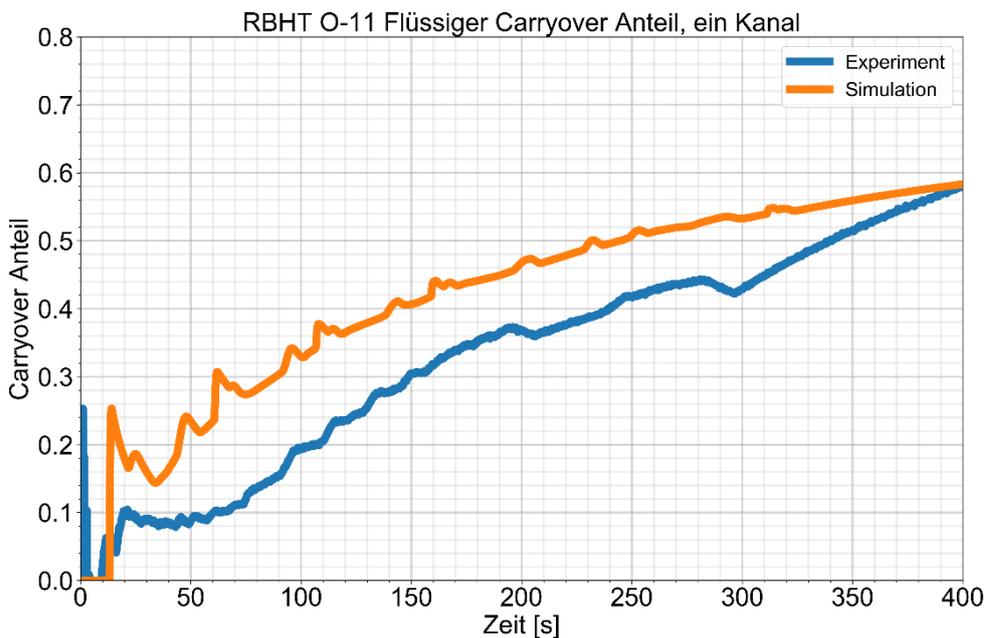


Abb. 7.7 Anteil des austretenden flüssigen Wassers bezogen auf die eingespeiste Kühlmittelmasse in Test O-1 mit 1-Kanalmodell

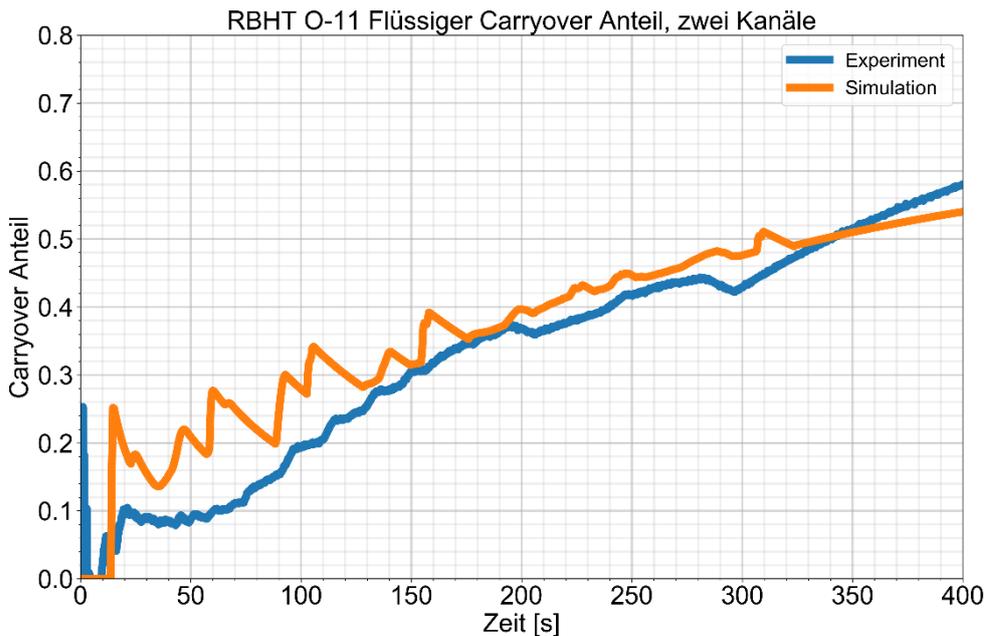


Abb. 7.8 Anteil des austretenden flüssigen Wassers bezogen auf die eingespeiste Kühlmittelmasse in Test O-1 mit 2-Kanalmodell

Ein weiterer Fokus bei der Entwicklung des Eingabedatensatzes lag auf dem Verlauf der Quenchfront, maßgeblich beeinflusst durch den Eingabeparameter C_{QHTWB} , welcher die maximal übertragene Wärme an der Quenchfront reguliert. Ähnliche Experimente zeigten bereits ein beschleunigtes Abkühlen mit dem für ATHLET vorgeschlagenen Standardwert von $3 \cdot 10^5$ und Ergebnisse konnten durch eine Reduktion des Wertes deutlich verbessert werden. Schließlich wurde ein Wert von $3 \cdot 10^4$ für die Simulation der meisten Tests gewählt, da sich für $2 \cdot 10^4$, der Untergrenze des empfohlenen Wertebereichs, eine stark verspätete Abkühlung des oberen Bereichs der Heizstäbe ausbildete, die leicht verbesserte Ergebnisse in der Mitte der Heizstäbe kompensierte. Die meisten Tests zeigen nun einen insgesamt gut mit dem Experiment übereinstimmenden Verlauf der Quenchfront mit leicht verfrühtem Quenching in der Mitte des Heizstabs. Ein Vergleich der mit angepasstem C_{QHTWB} -Wert erzielten Ergebnisse mit einer Rechnung mit Standard-Wert für C_{QHTWB} ist anhand des Tests O-1 in Abb. 7.9 und Abb. 7.10 dargestellt. Während vorher die simulierte Front (orange) der gemessenen (blau) leicht vorseilte, konnte durch die Anpassung eine deutlich verbesserte Übereinstimmung, insbesondere innerhalb der ersten ca. 150 s des Tests erzielt werden. Die im Experiment nach ca. 400 s gemessenen Schwankungen in der Quenchfront zeigen sich in ATHLET aufgrund der inhärenten Modellbeschränkungen jedoch nicht.

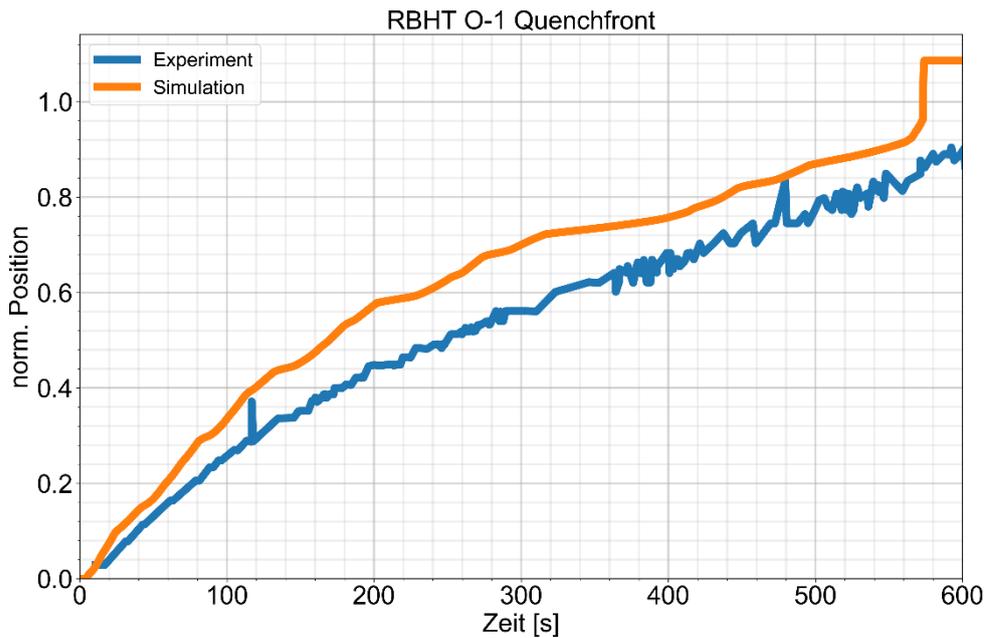


Abb. 7.9 Verlauf der Quenchfront für Test O-1 mit $C_{QHTWB} = 3 \cdot 10^5$

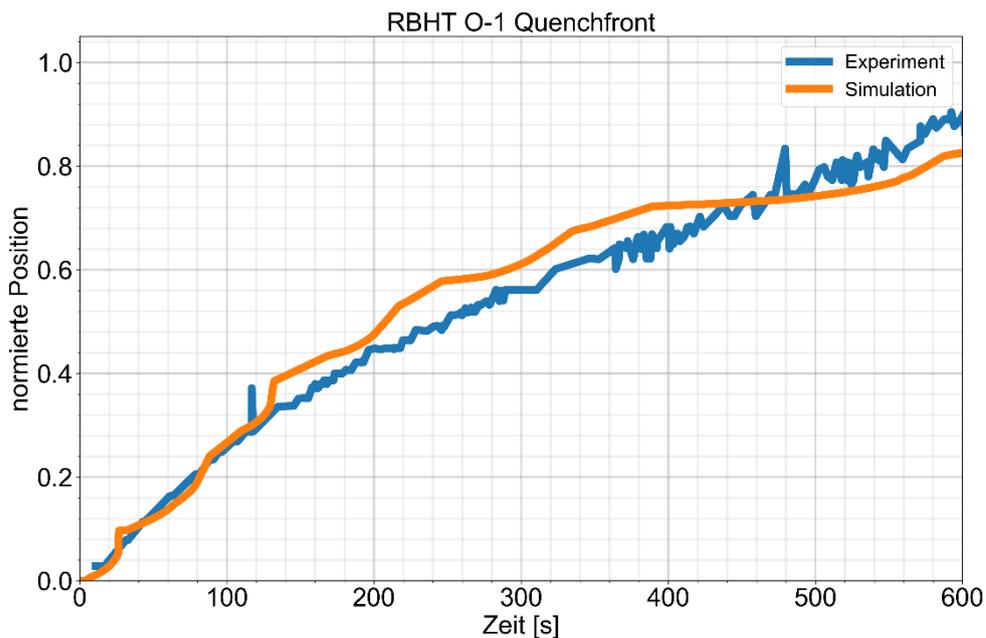


Abb. 7.10 Verlauf der Quenchfront für Test O-1 mit $C_{QHTWB} = 3 \cdot 10^4$

In fast allen Tests ist eine deutliche Unterschätzung des Druckabfalls über das Bündel zu beobachten. Beispielhaft ist in Abb. 7.11 der Druckunterschied für O-1 zu sehen. Während in der ersten Versuchsphase der Druckverlust sehr gut übereinstimmt, nimmt gegen Ende des Versuchs die Unterschätzung in der Simulation kontinuierlich zu. Ähnliche Beobachtungen wurden bereits früher bei der Simulation anderer Experimente gemacht. Ein maßgeblicher Grund hierfür scheint eine Überschätzung des

Dampfvolumengehalts im Bündel zu sein, der hauptsächlich von einer ungenauen Berechnung der Zwischenphasenreibung beeinflusst wird.

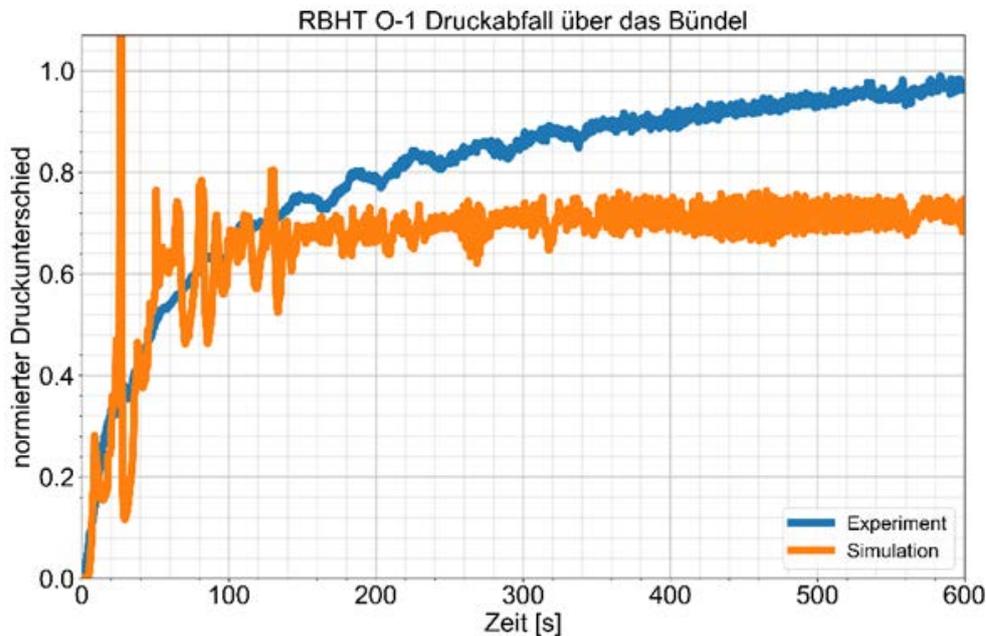


Abb. 7.11 Druckdifferenz über das Bündel in Test O-1

Für die Experimente mit hohem Kühlmittelfluss, nämlich O-3, O-4, O-5 sowie O-11, wurden zunächst deutliche Abweichungen der berechneten Heizstabtemperaturen vom Experiment festgestellt. Ursächlich hierfür waren Wassermittelseffekten, die in ATHLET nicht angemessen simuliert wurden. Da sich im Experiment größere Mengen von Wassertröpfchen oberhalb der Quenchfront befinden, findet ein vorzeitiges Abkühlen der höheren Bereiche der Heizstäbe statt. Durch massive Erhöhung des Eingabeparameters z_T , der die Anzahl von Wassertröpfchen in der Dampfphase reguliert, konnte dieser Effekt reproduziert und die Übereinstimmung der Temperaturverläufe bei hohem Kühlmittelfluss maßgeblich verbessert werden. Während die übrigen Versuche (bei niedrigem bis mittlerem Kühlmittelfluss) mit dem vorgeschlagenen Standardwert für z_T von $5 \cdot 10^9$ gerechnet wurden, wurde dieser für die oben genannten Versuchsnachrechnungen auf 10^{11} erhöht. Zur Illustration sind die Verläufe der Heizstabtemperatur für O-11 mit diesen z_T -Werten in Abb. 7.12 bzw. Abb. 7.13 dargestellt.

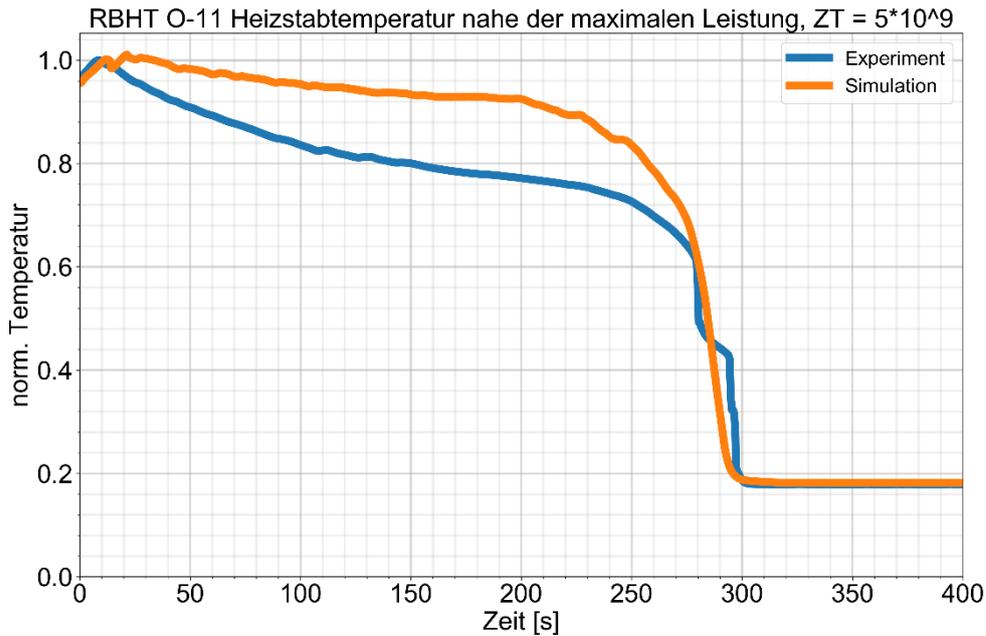


Abb. 7.12 Verlauf der Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für den Test O-11 mit $Z_T = 5 \cdot 10^9$

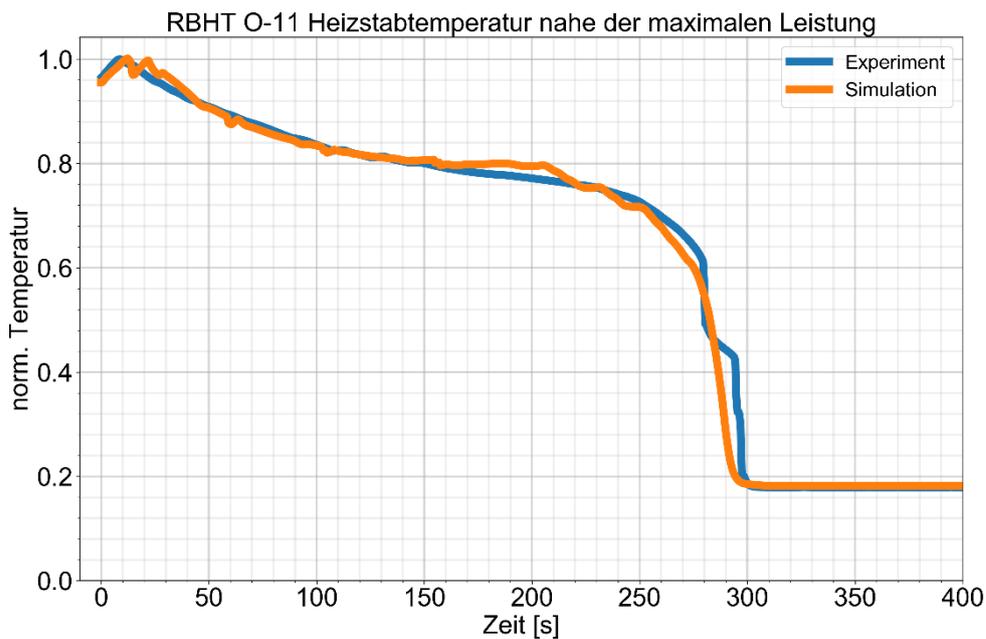


Abb. 7.13 Verlauf der Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für den Test O-11 mit $Z_T = 10^{11}$

Die weniger gut simulierten Tests O-8 und O-9 zeichnen sich durch einen besonders niedrigen Kühlmittelfluss aus. In beiden Simulationen ist ein deutlich verfrühtes Abkühlen zu beobachten, da die Quenchfront beschleunigt fortschreitet. In Abb. 7.14 ist die Heizstabtemperatur knapp unter dem Punkt der maximalen Leistung und in Abb. 7.15 der

Verlauf der Quenchfront dargestellt. Es ist zu erkennen, dass durch das zu schnelle Quenchen in der Simulation die maximale Hüllrohrtemperatur früher erreicht wird und die Höchsttemperatur geringer ausfällt. Die Ursache für dieses Verhalten konnte bisher nicht geklärt werden und erfordert weitere zukünftige Untersuchungen.

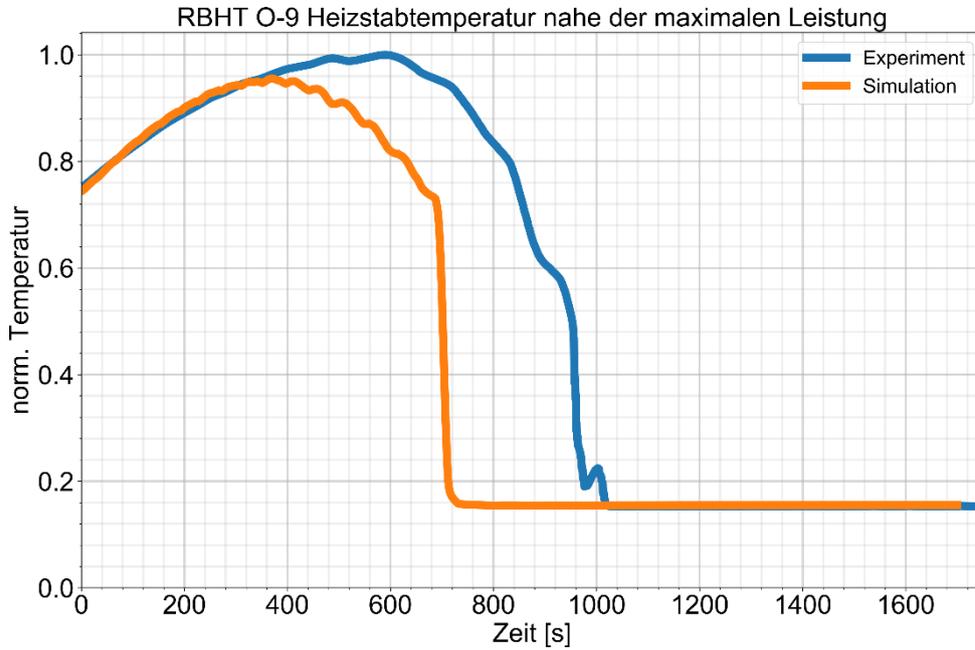


Abb. 7.14 Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-9

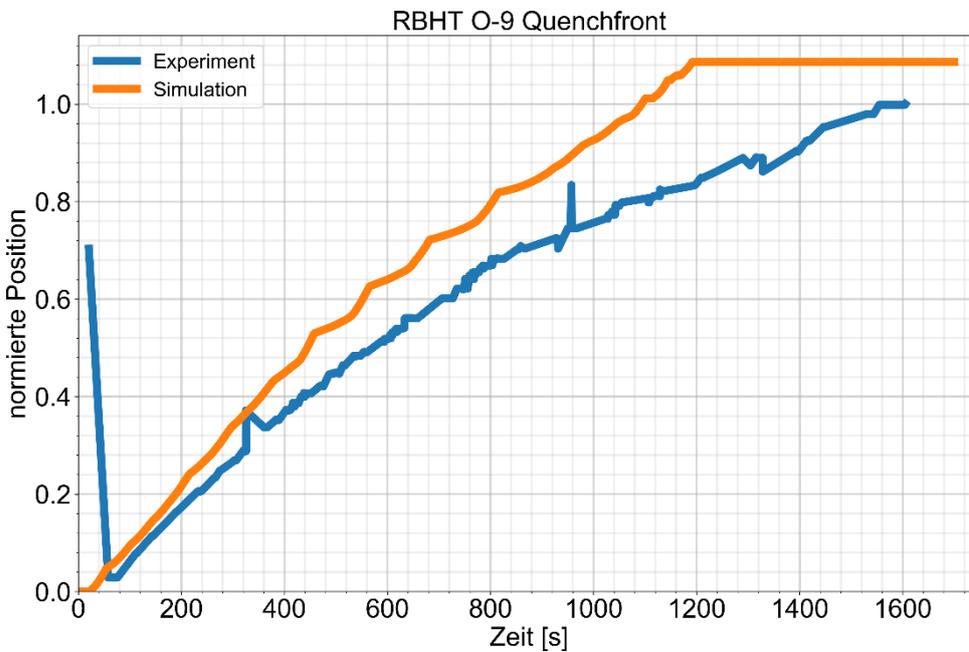


Abb. 7.15 Quenchfront-Verlauf des Tests O-9

Insgesamt sind die Simulationsergebnisse zufriedenstellend. Der zeitliche Verlauf der Heizstabtemperaturen konnte gut bis sehr gut reproduziert werden, mit Ausnahme der Versuche O-8 und O-9. Der Anteil des Kühlmittels, welcher das Bündel flüssig verlässt, wird bei Verwendung einer Zweikanalardarstellung des Bündels überwiegend treffend simuliert. Der Druckverlust über das Bündel wird leicht unterschätzt. Die Ergebnisse und Erkenntnisse aus den offenen Tests bieten eine solide Grundlage für die folgenden blinden Tests.

Als ein wesentliches Ergebnis der bisherigen Rechnungen kann festgehalten werden, dass der Modellparameter z_T , der als Tropfenzahl pro Volumen interpretiert werden kann, einen konstanten, optional vom Anwender vorzugebenden Wert besitzt. Ziel zukünftiger Weiterentwicklungen des Zwischenphasenaustauschs sollte sein, diesen Parameter dynamisch anhand der vorliegenden Strömungsbedingungen zu bestimmen, um die Vorhersagefähigkeit von ATHLET für vielfältige Anwendungssituationen zu verbessern.

7.5 SOAR zu 3D TH-Systemcodes

Im Rahmen des von OECD/NEA/CSNI initiierten Projekts 3DSYSTH zum aktuellen Entwicklungs- und Leistungsstand von thermohydraulischen 3D-Modellen in Systemrechenprogrammen wurden von der GRS mehrere Beiträge für einen Statusbericht (State-of-the-art Report – SOAR) verfasst. Der Bericht enthält neben einer Beschreibung der Modellimplementierungen innerhalb der verschiedenen Systemcodes auch Informationen zu Versuchsanlagen, die zur Validierung von 3D-Modellen herangezogen werden können, sowie Ergebnisse von Validierungsrechnungen. Die Zusammenarbeit hat Erkenntnisse zu bestehenden Modellschwächen, möglichen Modellverbesserungen sowie zukünftigen Anwendungsgebieten der 3D-Implementierungen gegeben. Neben dem Einsatz der 3D-Modelle für den RDB rücken auch bei anderen Organisationen passive Sicherheitssysteme stärker in den Blickpunkt, so dass Arbeiten zur Simulation großer Wasserpools mittels der 3D-Modelle geplant oder im Gange sind. Zu diesem Zweck wurde das 3D-Modell von ATHLET bereits im Vorgängervorhaben um ein Gemischspiegelmodell ergänzt. Der Statusbericht wird derzeit finalisiert und anschließend zur Prüfung an WGAMA weitergeleitet /BES 21/.

7.6 FONESYS-Aktivitäten

Die GRS beteiligt sich an Arbeiten der FONESYS (Forum and Network of SYS-TH Codes in Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics) Gruppe, die verschiedene Organisationen aus Europa, Asien und Nordamerika, die in der Systemcodeentwicklung aktiv sind, zusammenbringt. Halbjährliche Treffen dienen dem Erfahrungs- und Informationsaustausch. Hierbei werden aktuelle Programmentwicklungen diskutiert, Code-Benchmarks durchgeführt und erzielte Ergebnisse detailliert analysiert. Dies liefert neben zusätzlichen experimentellen Daten zur Programmvalidierung regelmäßig Hinweise für mögliche Modellverbesserungen. Ein Beispiel ist der im Rahmen von FONESYS durchgeführte Mantilla-Benchmark (siehe Kapitel 4.2.3), der Anstoß für verschiedene Entwicklungsarbeiten im Bereich der Strömungsberechnung in horizontalen Rohren gegeben hat (Kapitel 4.2). Die von den Partnern erzielten Ergebnisse werden im Rahmen einer gemeinsamen FONESYS-Session auf der bevorstehenden NURETH-22 Konferenz in Brüssel präsentiert werden.

8 Qualitätssicherung der Programmentwicklung

8.1 Etablierung von Softwarestandards

Mitte 2020 wurde die Verwendung der zentralen Softwareentwicklungsplattform Teamforge in der GRS eingestellt und durch die Open-Source basierte Plattform GitLab /GIT 21b/ ersetzt. Da GitLab die bis dahin eingesetzte Versionsverwaltung Subversion nicht unterstützt, wurden alle Codes in die neue Versionsverwaltung Git /GIT 21c/ überführt. Im Gegensatz zu Subversion, wo jedes Repository zentral auf einem Server gespeichert ist und Entwickler nur einzelne Versionen herunterladen können, handelt es sich bei Git um eine verteilte Versionsverwaltung, bei der jeder Entwickler stets ein vollständiges Abbild des gesamten Repositories erhält. Es beinhaltet daher jede Datei, in jeder Version, die jemals dem Repository hinzugefügt wurde. Dieser Ansatz erleichtert das Synchronisieren von Repositories und ermöglicht zudem das unabhängige Arbeiten in einer Offline-Umgebung. Gleichzeitig folgt daraus, dass sich große Repositories negativ auf die Leistung auswirken können. Da die Historie in Git invariant ist, kann ein zu großes Repository im Nachhinein nicht ohne Weiteres wieder verkleinert werden. Um die Größenzunahme zu beschränken, sollte ein Repository hauptsächlich für die Versionierung von Quellcode- bzw. Textdateien genutzt werden. Diese können sehr effizient gespeichert werden. Die Versionierung von großen, insbesondere abgeleiteten Binärdateien sollte vermieden werden. Diese können im Gegensatz zu Textdateien nicht gut komprimiert werden und neigen dazu sich regelmäßig vollständig zu verändern und damit die Arbeitskopie aller Entwickler zu vergrößern. Bei Subversion verhält es sich serverseitig ähnlich, fällt allerdings nicht so sehr ins Gewicht, da Entwickler nur die Dateien einer bestimmten Version herunterladen und nicht die gesamte Historie.

Umso geringer die Größe eines Git-Repositories ist, umso besser ist die Handhabung. Erfahrungsgemäß könnten Repositories unter 100 MB sehr schnell heruntergeladen und bearbeitet werden. Mit steigender Größe nimmt die Effizienz ab. Regelmäßig verwendete Repositories mit Quellcodes sollten aus diesem Grund eine Größe von 1 GB nicht überschreiten (siehe in /GIT 21a/ z. B.: <https://docs.gitlab.com/ee/topics/git/lfs/> oder <https://docs.github.com/en/github/managing-large-files/what-is-my-disk-quota#file-and-repository-size-limitations>).

Das ATHLET Repository auf Teamforge hat eine Größe von etwa 8 GB und musste daher für den Umzug umfangreich überarbeitet werden. Ziel war es, die Größe so weit wie

möglich zu reduzieren und gleichzeitig alle Informationen zur Entwicklungshistorie wie Code-Änderungen und Autorenschaft beizubehalten. Zusätzlich wurden bei der Gelegenheit optionale Projekte ausgelagert, die in einem separaten Repository besser gepflegt werden können. Insgesamt wurden folgende Schritte durchgeführt:

- Abgeleiteten Binär- und Plotdaten wurden aus allen Versionen entfernt.
- Aufbereitung von Branches, Tags und Reparatur von korrupten Branches.
- Aufbereitung von Metadaten wie inkonsistente Autorinformationen für eine zuverlässige Suche.
- Datensätze mit Versuchsdaten im Ordner Validierung und Plugins mit proprietären Daten wurden aus dem ATHLET Repository entfernt, um die Wartung und das Bereitstellen an Kooperationspartner zu erleichtern.
- Ein unbearbeitetes ATHLET Git-Repository wurde als Sicherung erstellt und dient als Archiv.

Durch diese Maßnahmen konnte die Größe des ATHLET-Repositories von 8 GB auf kompakte 23 MB reduziert werden und sichert dadurch eine gute Handhabung.

Um den Entwicklungs- und Kompilierungsprozess in Hinblick auf die steigende Komplexität und Anforderungen von AC² zu verbessern, wurde eine CMake-basierte Lösung entwickelt. CMake /KIT 20/ ist ein Werkzeug, das eine möglichst plattformunabhängige Erstellung von Software ermöglicht. Damit werden die bisher bestehenden und voneinander unabhängigen Buildsysteme Makefiles (Linux) und Microsoft Visual Studio Projekte (MS Windows) abgelöst. Zukünftig muss damit nur noch ein einziges Buildsystem entwickelt und gewartet werden. Gleichzeitig sind Anpassungen in der Regel plattformübergreifend und müssen nicht mehr händisch zwischen den verschiedenen Systemen synchronisiert werden.

Durch CMake wurde die Konsolidierung der AC²-Komponenten ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und NuT zu einer AC² Distribution weiter vorgebracht. Bisher mussten die benötigten Komponenten durch den Entwickler selbst zusammengestellt und auf Konsistenz, sowie Kompatibilität geprüft werden. Erschwerend kam hinzu, dass das Starten des Kompilierprozesses stark variierte, sodass sich die Entwickler in unterschiedliche Systeme einarbeiten mussten, wenn sie das gesamte AC²-Programmpaket kompilieren wollten. CMake bietet dafür ein standardisiertes Schema zum Konfigurieren und

Kompilieren aller AC²-Komponenten. Zudem werden die vom Entwickler benötigten Komponenten dynamisch zu einem großen Projekt zusammengefügt. Somit können Schnittstellen komfortabel und konsistent im gesamten Projekt zur Verfügung gestellt und gemeinsame Abhängigkeiten sinnvoll geteilt genutzt werden. Komponenten werden nur bei tatsächlichem Bedarf geladen. Damit ist es auch weiterhin möglich, an nur einzelnen AC²-Komponenten zu arbeiten, ohne das Gesamtpaket herunterladen zu müssen.

Alle offiziellen Plugins von ATHLET wurden auf CMake umgestellt. Den Entwicklern weiterer Plugins wurden Mustervorlagen zur Verfügung gestellt und Unterstützung bei der Umstellung geleistet. Der Umgang und Wartungsaufwand von Plugins konnte in diesem Zuge auch verbessert werden. Ein Plugin kann jetzt in einem separaten Repository abgelegt werden und sich von dort aus dynamisch die benötigten Komponenten von ATHLET herunterladen. Im Vergleich zu früher ist es jetzt nicht mehr notwendig, dass Änderungen der Plugins auch immer eine Änderung im ATHLET-Repository zur Folge haben. Folglich erhalten Plugin-Entwickler mehr Unabhängigkeit und Kontrolle über ihre eigenen Arbeiten. In diesem Rahmen wurden die Plugins `Teleperm` und `ATLAS-Process` in externe Repositories ausgelagert und können nun als echte ATHLET-Erweiterungen unabhängig entwickelt und gepflegt werden. Das Beispielplugin `N3KIN` zur Kopplung von 3D-Neutronenkinetikprogrammen wurde auf die wesentlichen Inhalte der Schnittstelle reduziert und kann von externen Projekten vereinheitlicht implementiert werden.

CMake bietet eine ganze Reihe von plattform- und toolspezifischen Generatoren /CHA 20/. Deren Aufgabe ist es, den durch CMake-Skripte generisch beschriebenen Erstellungsprozess eines Projektes, in ein verfügbares natives Format zu übersetzen. Dazu gehören Visual Studio Projekte 2008-2019, Makefiles, Ninja-Build. Sie sind teilweise mit weiteren IDEs wie Eclipse, CodeBlocks, Kate und Sublime Text kombinierbar. Damit entfällt der bisherige Aufwand für die Pflege von Projektdateien unterschiedlicher Visual Studio-Versionen. Gleichzeitig können die Entwickler auf ein deutlich größeres Angebot an Arbeitswerkzeugen zurückgreifen, die durch CMake gewartet und erweitert werden.

Neben den Entwicklerwerkzeugen wurde auch die Einbindung von Systembibliotheken verbessert. Statt sich auf eine strikte Windows®/Linux Unterscheidung zu verlassen und davon abhängig die üblicherweise verfügbaren Systembibliotheken einzubinden, werden

vor dem Kompilieren alle unterstützten Systembibliotheken einzeln auf das Vorhandensein getestet und entsprechend aktiviert. Dadurch wird das System deutlich flexibler und ermöglicht zusätzlich zu Windows® und Linux das Kompilieren auf weiteren Plattformen wie Cygwin und MacOS®.

Intels® Zusatzfunktion "Warn Interface" soll die Korrektheit aller impliziten Fortran-Schnittstellen sicherstellen, verhält sich aber bei inkrementellen Builds, die typisch für den Workflow eines Entwicklers sind, fehlerhaft. Daher wurde die Funktion für den normalen Entwickler deaktiviert und nur noch in den automatischen Tests verwendet, die keine inkrementellen Builds verwenden. Somit wird weiterhin Typsicherheit gewährleistet, ohne die Stabilität beim Kompilieren zu verschlechtern.

8.2 Continuous Integration

Die Programmverifikation parallel zur Programmentwicklung ist ein wesentlicher Bestandteil der Qualitätssicherung /GRS 20/. Als Testumgebung zur Sicherstellung der Programmqualität von AC² betreibt die GRS zwei Server zur Unterstützung von Continuous Integration unter Linux und Windows. Basierend auf den bisher vorhandenen Tools zur Erstellung von neuen ATHLET Programmversionen (Makefiles unter Linux bzw. Visual Studio Projektfiles unter Windows) werden automatisch die verschiedenen Programmkonfigurationen (ohne/mit Mehrprozessorunterstützung, Debug- und Release-Versionen) mit verschiedenen Compilern erstellt und automatisiert einfache Testrechnungen gestartet. Dies geschieht im Anschluss an jede Änderung im Quellprogramm von ATHLET. Zusätzlich werden mindestens wöchentlich Regressionstests gerechnet und deren Ergebnisse anhand zulässiger Ergebnisbandbreiten, z. B. abgeleitet aus Simulationen mit früheren Programmversionen, automatisch bewertet. Die hierbei durchgeführten Testrechnungen decken jedoch nicht den kompletten Modellumfang von ATHLET ab. Daher wurden zusätzliche Tests ergänzt. Als generische Tests mit analytisch ableitbarem Ergebnis werden neu gerechnet /WON 19/:

- Ransom-Faucet-Test: Dieser Test betrachtet den reibungsfreien Fall von Wassertropfen in einem vertikalen, mit Gas gefüllten Rohr und ermöglicht die Prüfung der Korrektheit der implementierten Impulsgleichung.
- Manometerschwingung: Dieser Test simuliert die Schwingung einer anfänglich ausgelenkten Wassersäule in einem U-Rohr. Er ermöglicht die Prüfung des

Gemischtspiegelmodells in Verbindung mit der Impulsgleichung und erlaubt anhand der Dämpfung der Schwingung Rückschlüsse auf den Einfluss numerischer Diffusion.

Weiterhin wurde ein PERSEO-Versuch in den Jenkins CI-Server eingepflegt, um eine fortwährende Validierung von ATHLET bezüglich passiver Systeme zur Wärmeabfuhr mittels Wärmeübergangs durch Kondensation innerhalb vertikaler Rohre zu gewährleisten. Außerdem neu implementiert wurde ein PERICLES-Test zum Reflooding.

Der Jenkins CI-Server baut in Ergänzung zu diesen Tests verschiedene Plugins und testet zusätzlich das HDF5-Plugin. Die bisherigen Erfahrungen zur Anwendung von CI für ATHLET wurden im Rahmen eines Beitrags auf der Konferenz *Continuous Lifecycle* präsentiert /HER 19/.

Mit GitLab erfolgt die Übernahme eines Entwicklungszweiges in den Hauptentwicklungszweig im ATHLET-Projekt nicht mehr direkt durch den Entwickler, sondern nur noch über sog. Merge Requests. Dort werden die vorgeschlagenen Änderungen öffentlich sichtbar gemacht und es anderen Entwicklern ermöglicht, diese zu prüfen und zu kommentieren. Parallel können im Hintergrund automatische Tests durchgeführt und deren Ergebnisse angezeigt werden. Für jedes Projekt können Regeln definiert werden, die erfüllt werden müssen, damit ein Merge Request akzeptiert werden kann. Die Annahme erfolgt in ATHLET grundsätzlich nur durch ein Mitglied der Gruppe Maintainer. Zusätzlich ist es notwendig, dass die automatischen Tests erfolgreich durchgeführt wurden und nach dem Vier-Augen-Prinzip mindestens eine Person, die nicht Autor ist, die Änderungen am Quellcode genehmigt hat. Damit verbessert sich die Chance erheblich, Fehler frühzeitig vor der Übernahme in den produktiven Hauptzweig zu finden und zu beheben. Zusätzlich sind Änderungen, Reviews, Tests und 4-Augen-Prinzip automatisch dokumentiert.

GitLab unterstützt neben der hauseigenen GitLab-CI /GIT 21a/ auch die Integration eines bestehenden Jenkins-Servers /JEN 21/. Beide Ansätze wurden getestet.

Für die Jenkins-Integration müssen zuerst SSH-Schlüssel zur projektbasierten Authentifizierung und Übertragung der Repositories in GitLab und Jenkins angelegt werden. Anschließend wird für jedes GitLab-Projekt ein zugehöriges Jenkins-Projekt angelegt und dessen Webhook auf GitLab konfiguriert. Darüber kann GitLab die Informationen an Jenkins übertragen, die notwendig sind, um eine Pipeline zu starten. Sobald eine Pipeline durchgelaufen ist, sendet Jenkins das Ergebnis ebenfalls per Webhook an das

jeweilige GitLab-Projekt zurück. Dazu muss vorher ein separates Jenkins-Konto auf GitLab eingerichtet werden, das mindestens Schreibrechte im jeweiligen Projekt besitzt. Die Integration von Jenkins in GitLab ist prinzipiell möglich, erfordert aber einen recht hohen individuellen Konfigurationsaufwand seitens GitLab und Jenkins. Dieser muss mit jedem weiteren Jenkins-Server, aktuell Windows® und Linux, separat durchgeführt werden. Gleichzeitig werden Berechtigungen zwischen Jenkins und GitLab lediglich auf Projektebene, nicht aber auf Nutzerebene vergeben. Folglich könnte ein Entwickler über den Jenkins-Server auf weitere Projekte zugreifen, für die er selbst nicht direkt berechtigt wäre.

Die GitLab-CI ist für den Betrieb in der Cloud entwickelt und bietet daher ein hohes Maß an horizontaler Skalierbarkeit. Dies wird erreicht, indem einem GitLab-Server ein oder mehrere weitere Server zur Verfügung gestellt werden, auf dem die Anwendung GitLab-Runner als Dienst ausgeführt wird. Gemeinsam bilden sie einen Rechenpool, auf dem die anfallenden Jobs verteilt abgearbeitet werden. Abgesehen von der eingesetzten Plattform Windows/Linux sind GitLab-Runner generisch und zustandslos, wodurch sie leicht konfigurierbar und austauschbar sind. Fällt ein Runner aus, wird die Arbeit auf die anderen verfügbaren Runner verteilt. Die CI-Konfiguration und die Vergabe von Nutzerrechten findet ausschließlich auf dem GitLab-Server selbst statt.

Zum Testen dieses Ansatzes wurden GitLab-Runner-Prototypen auf Windows® und Linux erstellt. Sie erhalten Testjobs von ATHLET und führen sie in einer jeweils frisch erstellten Dockerumgebung aus. Dadurch bleiben Builds jederzeit reproduzierbar und die Daten sind vor fremden Zugriffen geschützt. Die eingesetzten Docker-Images beinhalten die Installation von Toolchains und Buildtools zum Kompilieren von AC². Dazu gehören Intel/GCC Compiler, Microsoft Visual Studio, MPI, MinGW, CMake, Git, Python und Cygwin.

Für ATHLET gibt es bisher eine schnelle Pipeline, die bei jedem Merge Request ausgeführt wird und eine Laufzeit von etwa zwei Minuten hat. Sie überprüft die korrekte Git-Konfiguration durch den Entwickler und testet die konsistente Einhaltung von grundlegenden Formatierungsrichtlinien wie Vermeidung von zusätzlichen Leerzeichen am Ende einer Zeile und die korrekte Kodierung der Quellcodedateien in UTF-8. Abweichungen werden übersichtlich im Programmcode markiert. Parallel dazu wird ATHLET kompiliert, die Unit-Tests und Sample1 als minimaler Datensatz ausgeführt.

Vor dem Einbringen von Änderungen in den Hauptentwicklungszweig werden umfangreiche Tests durchgeführt. Es werden die AC²-Komponenten ATHLET, ATHLET-CD und NuT mit Intel Fortran (Windows/Linux) und MinGW übersetzt. Anschließend wird ebenfalls überprüft, ob ein minimaler Datensatz ohne Abbruch gerechnet werden kann.

Die bisherigen Arbeiten mit der GitLab-CI zeichnen ein positives Bild. Mittelfristig soll daher Jenkins von der hauseigenen und nahtlos integrierten GitLab-CI abgelöst werden. Daneben besteht die kontinuierliche Aufgabe, weitere Verifikationstests und Validierungsfälle in die CI-Umgebung zu integrieren und ggf. gestaffelte Prüfungen in Entwicklungsbranches, vor der Übernahme in den Master und automatische unterstützte Validierung auf dem Master und für Beta-Versionen durchzuführen.

8.3 Refactoring

Der Systemcode ATHLET wird von der GRS ständig weiterentwickelt. Entsprechend neuer Anforderungen der Programmanwendung und neuen Möglichkeiten der IT-Infrastruktur werden regelmäßig Anpassungen des Code-Designs vorgenommen und Programmteile technisch und inhaltlich modernisiert. Diese Arbeiten dienen auch der Verbesserung der Lesbarkeit und Erweiterbarkeit des Programms und reduzieren die Fehleranfälligkeit.

So wurde im Rahmen des vorliegenden Projekts das Multikomponentenmodell von ATHLET, das die Simulation von Gasen und Gasmischungen ermöglicht, restrukturiert. Hierzu wurde die Simulation von Mischungen auf eine beliebige Anzahl von Gasen (früher Limitierung auf fünf) erweitert und einige Gasstoffwerte wie Wärmeleitfähigkeit oder molare Masse, die bisher an mehreren Stellen im Code spezifiziert waren, wurden in Module ausgelagert und entsprechend neuer Literaturwerte aktualisiert. Die Arbeiten erfolgten im Zuge der Implementierung neuer Gaskomponenten (CO und CO₂) und vereinfachen die zukünftige Implementierung zusätzlicher Komponenten erheblich.

Im Rahmen verschiedener Projekte (innerhalb und außerhalb der GRS) laufen Entwicklungsarbeiten, die sich mit dem Heat Transfer Paket innerhalb des HECU-Moduls von ATHLET beschäftigen und dieses erweitern sollen. Hintergrund sind bspw. neue Anwendungen aus den Bereichen passive Systeme (Heat Pipe, vertikale/horizontale Wärmetauscherrohrbündel, SMR), neue Kühlmedien oder auch RDB-Außenkühlung.

Das Wärmeübergangspaket von ATHLET umfasst zahlreiche HTC-Korrelationen für verschiedene Wärmeübergangsregime wie erzwungene bzw. freie Konvektion, unterkühltes bzw. gesättigtes Blasensieden, Filmsieden oder Kondensation. Die Auswahl der Korrelation für den Wärmeübergang (WÜ) erfolgt automatisiert anhand verschiedener Kriterien wie Wandtemperatur, Geometrie (horizontal, vertikal, Bündel, ...), Fluid (Wasser, Flüssigmetall, ...) und Dampfvolumentgehalt bzw. Enthalpiequalität. Hierbei wird zwischen verschiedenen *WÜ-Levels* (*Kühlen, Pre-CHF, Übergangssieden, Post-CHF*) und *WÜ-Modes* (*unterkühlt, zweiphasig, überhitzt*) unterschieden und für einen stetigen Übergang interpoliert. Strömungsbilder werden mittels der erwähnten Unterteilung in Levels implizit berücksichtigt, jedoch der fluiddynamischen Modellierung nicht übergeben.

Die technischen Aspekte der WÜ-Berechnung wie z. B. die Auswahllogik der HTC-Korrelation oder die Interpolation sind hierbei eng mit thermohydraulisch-physikalischen Aspekten verzahnt, was eine Wartung und Erweiterung des Pakets erschwert. Daher ist eine Restrukturierung des WÜ-Pakets eine vordringliche Entwicklungsaufgabe. Vor diesem Hintergrund wurde ein Konzept für eine neue Struktur erarbeitet /SCH 20/, das die zukünftige Erweiterbarkeit des WÜ-Pakets sicherstellt und somit dessen zukünftige Nutzung als Entwicklungsbasis für zahlreiche Forschungsarbeiten ermöglicht. Laufende bzw. kürzlich abgeschlossene Entwicklungen (siehe auch Kapitel 5.2) berücksichtigen bereits das neue Konzept. Die tiefgreifende Überarbeitung des bestehenden Wärmeübergangspakets ist innerhalb eines Nachfolgevorhabens geplant. Wesentliche Leitgedanken, die der Restrukturierung zugrunde liegen, sind hierbei:

- Eine modulare Gliederung soll die Möglichkeit bieten, dass Teile des Heat-Transfer-Pakets von anderen Codes genutzt (z. B. COCOSYS) bzw. durch andere Codes ersetzt/ergänzt (z. B. Plug-ins) werden können. Um dieses Ziel zu erreichen, erfolgt eine strikte Unterteilung des Heat Transfer Pakets nach technisch-numerischen Aspekten einerseits (Auswahllogik, Interpolation) und physikalischen Phänomenen andererseits.
- Alle Arbeitsmedien sollen dieselbe Auswahllogik mit Unterteilung in Levels und Modes verwenden (auch wenn einzelne Level/Modes (noch) nicht bedient werden, bspw. weil für verschiedene Flüssigmetalle keine Verdampfung gerechnet wird). Damit besteht die Möglichkeit, zweiphasige Fluide nachträglich zu ergänzen. Die Unterscheidung nach Fluid erfolgt dementsprechend erst bei der Auswahl der konkreten Korrelation (und nicht innerhalb der zentralen Steuerung der WÜ-Levels).

- Die Erweiterung des Heat Transfer Pakets durch vom Anwender bereitgestellte Plug-ins soll möglich sein, z. B. für neue Arbeitsmedien. Geeignete Schnittstellen werden für einzelne Modes (und Levels) verfügbar gemacht.
- Eine Ergänzung weiterer WÜ-Korrelationen im Fortran Quellprogramm soll einfach und transparent möglich sein.
- Jede WÜ-Korrelation wird in einer separaten Routine implementiert und dokumentiert. Damit kann diese für verschiedene Level/Modes wiederverwendet werden, was die Implementierung als auch die Validierung erleichtert.
- Die Auswahl einer speziellen WÜ-Korrelation gemäß User-Input soll einfach und transparent möglich sein. Die Auswahl erfolgt zunächst (wie bisher) für ein bestimmtes Wärmeübergangsphänomen (z. B. Kondensation). Zusätzlich soll die Auswahl der Heat-Transfer-Korrelation zukünftig auch anhand des Strömungsbildes bzw. auf Basis geeigneter dimensionsloser Kennzahlen möglich sein.

Die Ziele umfassen somit nicht nur die rein technische Überarbeitung des WÜ-Pakets, sondern bilden auch die Basis für die Nutzung von Synergieeffekten bei der Entwicklung der verschiedenen AC²-Programmteile, für die flexiblere Anwendbarkeit von ATHLET auf neue Fragestellungen und Anwendungen aus der Reaktorsicherheit, sowie für eine umfangreiche modelltechnische Erweiterung des Wärmeübergangs durch eine gemeinsame Betrachtung von WÜ-Regime einerseits und Strömungseigenschaften andererseits.

Weitere durchgeführte Arbeiten des Refactorings betreffen das HECU-Modul. Dieses beinhaltet verschiedene sog. Pool-Arrays, in denen eine Vielzahl globaler Variablen zusammengefasst sind. Einige dieser Arrays wurden aufgelöst, um Lesbarkeit und Erweiterbarkeit des HECU-Moduls zu verbessern.

8.4 Programmdokumentation

Zur Benutzerführung beinhaltet ATHLET eine detaillierte und umfassende Programmdokumentation. Diese umfasst neben einem Benutzerhandbuch mit zahlreichen Empfehlungen für eine erfolgreiche Programmanwendung auch eine umfangreiche Modellbeschreibung, ein Programmierhandbuch zur Erläuterung programmtechnischer Details und einen Validierungsband mit der Dokumentation des aktuellen Validierungsstands. Die Programmdokumentation wurde kontinuierlich aktualisiert und allen Anwendern

zusammen mit dem ATHLET-Rechenprogramm zur Verfügung gestellt. Mit der Freigabe der ATHLET-Version 3.2 wurden neue Kapitel u. a. zu neuen Software-Werkzeugen (ATHLET Input Graphic, AC²-GUI), zur Entwicklung und Verwendung von Plug-ins, zu in ATHLET verwendeter Drittanbietersoftware sowie zu Hinweisen der Programmanwendung ergänzt.

Da das bisherige Tool zur Dokumentation, das Programm Quicksilver, nicht mehr allen aktuellen Anforderungen an ein Dokumentationsprogramm gerecht wird, wurde mit der Migration der ATHLET-Dokumentation hin zu anderen Formaten begonnen. Das Benutzerhandbuch wie auch die Modellbeschreibung werden zukünftig in MS Word® erstellt. Dieser Umstieg soll nach Möglichkeit bis zur nächsten Release abgeschlossen sein.

8.5 Releasemanagement

Ein zentrales Element einer qualitätsgesicherten Programmentwicklung ist eine Versionsverwaltung mit einem transparenten Releasemanagement. Durch die Versionsverwaltung, die für AC² innerhalb des Projekts von Subversion auf das modernere Git /GIT 21c/ umgestellt wurde, wird sichergestellt, dass zu einem früheren Zeitpunkt erzielte Ergebnisse jederzeit auf eine bestimmte Programmversion zurückgeführt und somit auch reproduziert werden können. Unter Versionsverwaltung steht nicht nur der ATHLET-Quellcode, sondern auch alle weiteren Programmteile, die für eine Reproduktion früherer Entwicklungszustände und Ergebnisse wichtig sind. Dies umfasst z. B. das CMake-file, alle Tools zum Pre- und Postprocessing bis hin zu versionsspezifischen Eingabedatensätzen der Programmvalidierung und für die Testfälle der Continuous Integration unter Jenkins.

Das Releasemanagement trägt wiederum dafür Sorge, dass nur Programmversionen mit einem festgelegten und validierten Modellumfang freigegeben und anschließend für Anwendungsrechnungen eingesetzt werden. Im Rahmen des vorliegenden Vorhabens wurden, jeweils nach einer umfangreichen Programmvalidierung, folgende Programmversionen offiziell freigegeben und an die Programmnutzer verteilt:

- ATHLET 3.2 (enthalten in AC²-2019)
- ATHLET 3.2.1 (enthalten in AC²-2019.1)

ATHLET 3.2 als letzte Major Release enthält gegenüber der vorangegangenen Programmversion ATHLET 3.1A zahlreiche Programmweiterentwicklungen, die erstmals allgemein verteilt und somit allen Programmanwendern zugänglich gemacht wurden. Hierzu zählen insbesondere thermohydraulische Neuentwicklungen:

- Neue Arbeitsmedien für ein erweitertes Anwendungsspektrum
 - Natrium als zweiphasiges Arbeitsmedium
 - Überkritisches CO₂ (Erstimplementierung durch IKE)
 - Salzschnmelze (FLINAK, FLIBE)
 - Nutzer-definiertes Arbeitsmedium über Plug-in-Schnittstelle (beschränkt auf nicht-siedende Zustände)
- 3D-Modell kombiniert mit Gemischspiegelmodell zur Simulation von Wasserpools
- Erweitertes Bortransportmodell zur Simulation unterschiedlicher gelöster Stoffe, z. B. Natriumpentaborat als Neutronengift in SWR
- Verbessertes Wärmestrahlungsmodell zur Erfassung der Wärmeverluste an die Umgebung (insbesondere für HTR)
- Modifiziertes Kriterium zur Detektion von DNB/Dryout, ausschließlich auf Basis der kritischen Heizflächenbelastung ohne Berücksichtigung der minimalen Filmsiedetemperatur
- Zahlreiche neue Plug-in-Schnittstellen: XL-Korrelation (MASL), CHF-Korrelation, HTC-Korrelation für überkritisches Wasser

Weitere Programmverbesserungen in ATHLET 3.2 zielen insbesondere auf eine erhöhte Benutzerfreundlichkeit:

- Gemeinsames AC²-Installationspaket (Windows, Unix) (siehe Kapitel 6.7)
- Neue, gemeinsame graphische Benutzeroberfläche für AC² (siehe Kapitel 6.6)
- Neue, skalierbare Löser mittels Numerical Toolkit
- Neue ATHLET Input Graphics (AIG-2) erstmals für externe Anwender freigegeben (siehe Kapitel 6.5.1)
- HDF-5 Format (offener Standard für wissenschaftliche Anwendungen) als neues Ausgabedatenformat

- Zahlreiche neue Ausgabegrößen (Print- und Plotdaten)
- Neue Beispieldatensätze, u. a. generischer VVER-1000 (siehe Kapitel 6.9)

Der zuletzt freigegebene Programmpatch ATHLET 3.2.1 enthält im Wesentlichen verschiedene Korrekturen nicht-kritischer Programmfehler der Version 3.2, einige neue Ausgabevariablen, sowie als wichtiges neues Feature eine erleichterte Initialisierung einer asymmetrischen Leistungsverteilung im Reaktorkern durch den Programmanwender.

8.6 User Area und Codetransfer

Die freigegebenen ATHLET Programmversionen wurden über die User Area an alle Benutzer mit entsprechender Programmlizenz weitergegeben. Seit dem Releasezeitpunkt der Programmversion ATHLET 3.2 (AC²-2019) im Sommer 2019 konnte das Programm an knapp 40 Organisationen verteilt werden.

Die User Area dient der Kommunikation zwischen dem AC²-Entwicklungsteam und den GRS-externen Anwendern. Neben zugriffsbeschränkten Bereichen zur Programmweitergabe oder zum Dateiaustausch bietet sie u. a. ein Ticketsystem und Diskussionsforen zum Erfahrungsaustausch. Da ATHLET ausschließlich als Bestandteil von AC² bereitgestellt wird, wurde die ursprünglich für ATHLET aufgesetzte User Area nun für alle Programmteile des AC² Pakets ausgebaut und regelmäßig gepflegt. Diese Arbeiten umfassten u. a. die ständige Aktualisierung von Inhalt und Struktur der Webseiten und die Weiterführung der zentralen Nutzer- und Rechteverwaltung. Die Veröffentlichungen der Entwickler und Anwender von ATHLET wurden gesammelt und auf der User Area zusammengestellt, um eine größere Transparenz hinsichtlich Leistungsfähigkeit und Anwendungsspektrum des Programms zu erreichen und den gegenseitigen Erfahrungsaustausch – nicht zuletzt auch unter den Programmnutzern – zu intensivieren.

Die User Area ist auf Basis der Software Open Atrium umgesetzt, für die in 2021 der Support eingestellt werden wird. Vor diesem Hintergrund ist die Migration auf eine andere geeignete Plattform – voraussichtlich MS Sharepoint® – geplant, die im Rahmen eines Nachfolgevorhabens umgesetzt werden soll.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Die GRS entwickelt, validiert und verteilt zur Bearbeitung aktueller Fragestellungen der Reaktorsicherheit das Programmpaket AC², bestehend aus den Systemrechenprogrammen ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS sowie der Simulatorsoftware ATLAS. Es dient der Analyse des Normalbetriebs und des anomalen Betriebs, von Störfällen wie auch von Unfällen in Reaktoranlagen und anderen kerntechnischen Einrichtungen. Im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS1565 zur *Weiterentwicklung des AC² Thermohydraulik-Moduls ATHLET zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene* wurden insbesondere Modelle und Methoden für die realistische Simulation von Kernkraftwerken nach dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik für das thermohydraulische Systemrechenprogramm ATHLET entwickelt und verbessert.

Im Zentrum des Vorhabens standen die Weiterentwicklung und die Ertüchtigung von ATHLET zur Untersuchung bestehender und zukünftiger Reaktoren. Weitere Projektschwerpunkte waren die Unterstützung nationaler und internationaler Programmnutzer, die Kooperation im Rahmen internationaler Arbeitsgruppen sowie die Weiterentwicklung bestehender und Etablierung neuer Methoden zur Qualitätssicherung der ATHLET-Programmentwicklung. Entsprechend der in Kapitel 1.2 dargestellten Gliederung des Arbeitsprogramms werden die in den drei technisch-wissenschaftlichen Arbeitspaketen erzielten Ergebnisse und Erkenntnisse nachfolgend in separaten Abschnitten zusammengefasst. Eine Bewertung mit Ausblick auf zukünftige Arbeiten schließt den Bericht ab.

9.1 Modellierung komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene im Kühlsystem nukleartechnischer Anlagen

Eine wichtige Zielstellung des vorliegenden Projekts war die Entwicklung neuer thermohydraulischer Modelle, die eine verbesserte Simulation zweiphasiger Strömungsphänomene im Reaktorkühlkreislauf ermöglichen. Vor diesem Hintergrund wurde ein 3-Felder-Modell in ATHLET implementiert, das neben den kontinuierlichen Phasenanteilen von Wasser und Dampf auch ein Tropfenfeld mittels separater Bilanzgleichungen beschreibt. Auch wenn aktuell noch Weiterentwicklungsbedarf besteht, um das 3-Felder-Modell zuverlässig und flexibel für unterschiedliche Anwendungssituationen einsetzen zu können, so wird das Modell in der Zukunft die Möglichkeit bieten, insbesondere Strömungsvorgänge im Reaktorkern von DWR und SWR wie bspw. die Siedekrise oder das Wiederbenetzen der Brennstäbe detaillierter als bisher zu simulieren. In diesen

Situationen liegt die flüssige Phase sowohl als kontinuierlicher Anteil (z. B. Wasserfilm) wie auch in Form von Tropfen vor, wobei sich beide Anteile im mechanischen und thermischen Ungleichgewicht befinden. Letzteres kann durch das 3-Felder-Modell, nicht aber durch ein 2-Fluid-Modell, erfasst werden. Durch dedizierte Schließungsgleichungen für Tropfen kann das 3-Felder-Modell auch in anderen Anwendungssituationen, die hauptsächlich von einer Tropfenströmung bestimmt werden, zukünftig eine höhere Ergebniszuverlässigkeit liefern als die bisherige Modellierung. Mehrfeldermodelle werden aktuell in verschiedenen, international eingesetzten Rechenprogrammen implementiert. Sie gelten nach den derzeit als Standard zu betrachtenden 2-Fluid-Modellen mit 6-Gleichungen als nächste Entwicklungsstufe der Systemcodes. Die Implementierung des 3-Felder-Modells in ATHLET stellt somit auch sicher, dass mit der internationalen Entwicklung Schritt gehalten wird und ATHLET auch zukünftig ein konkurrenzfähiges Produkt bleibt.

Außerdem wurden zahlreiche Teile der bestehenden 2-Fluid-Modellierung erweitert und verbessert. Besondere Bedeutung kommt hierbei den Strömungsbildkarten zu, auf deren Basis anhand lokaler Strömungsparameter das vorliegende Strömungsbild bestimmt und automatisiert im Programm geeignete Schließungsgleichungen ausgewählt werden. Als zusätzliches Strömungsbild wurde die Ringströmung aufgenommen und durch entsprechende Schließungsgleichungen für die Berechnung und phasenspezifische Verteilung der Wand- und Zwischenphasenreibung ergänzt. Mit Blick auf vertikale Geometrien ist diese Erweiterung für eine detaillierte Simulation der Vorgänge im Reaktorkern während eines Störfalls von besonderer Bedeutung. Für horizontale Geometrien wurde darüber hinaus auch die Modellierung des Entrainments sowie der Wand- und Zwischenphasenreibung für stratifizierte und wellige Strömung überarbeitet. Die Entwicklung konnte im Rahmen eines internationalen Benchmarks innerhalb der FONESYS-Gruppe erfolgreich verifiziert werden und bietet Potential für eine deutliche Verbesserung der Strömungssimulation in horizontalen Rohren. Für diese Arbeiten hat sich erneut die große Bedeutung internationaler Kooperation gezeigt, durch die vorher unzugängliche experimentelle Daten verfügbar wurden und somit verborgene Programmdefizite aufgedeckt und behoben werden konnten.

Als Systemrechenprogramm mit einer überwiegend generischen, nicht anlagenspezifischen Modellbasis wird ATHLET nicht nur für Leistungsreaktoren, sondern auch zur Analyse von Forschungsreaktoren eingesetzt. Aufgrund der sich signifikant unterscheidenden Betriebsbedingungen und Kerngeometrie ist jedoch eine eigene Validierung und

in Teilen auch Modellentwicklung für Forschungsreaktoren erforderlich. Im Rahmen des vorliegenden Projekts wurden insbesondere die beiden Aspekte der Strömungsinstabilität und des DNB (Departure from Nucleate Boiling) in engen Kühlkanälen näher betrachtet. Es konnte gezeigt werden, dass ATHLET im Bereich typischer Wärmestromdichten im Kern das Eintreten einer Strömungsinstabilität zuverlässig vorhersagen kann. Für sehr hohe Wärmestromdichten hat sich jedoch gezeigt, dass das komplizierte Zusammenspiel von Wandverdampfung und Kondensation im unterkühlten Fluid von der bestehenden Modellierung nicht vollständig erfasst wird. Neu entwickelte und in ATHLET implementierte Modelle erzielen hier eine deutliche Ergebnisverbesserung, gleichwohl eine finale Implementierung, die generell an alle Nutzer freigegeben werden kann, noch gefunden werden muss. Hinsichtlich der kritischen Heizflächenbelastung, die üblicherweise durch brennelementspezifische CHF-Korrelationen beschrieben wird, wurde eine speziell für plattenförmige Brennelemente und niedrige Drücke geeignete Korrelation in ATHLET implementiert, die das Auftreten von DNB für die Bedingungen in Forschungsreaktoren genauer erfasst. Die durchgeführten Arbeiten liefern somit einen wichtigen Beitrag, um die Sicherheit von Forschungsreaktoren mit ATHLET zuverlässig bewerten zu können.

Darüber hinaus wurden zahlreiche neue Modelle bereitgestellt, die den Einsatzbereich von ATHLET erheblich erweitern. So wird das neue, maßgeblich von HSZG entwickelte Wasser-Dampf-Stoffwertpaket insbesondere für niedrige Druckbereiche, die z. B. für die Simulation passiver Systeme von Bedeutung sind, genauere Stoffwerte liefern. Durch die Kopplung externer Stoffwertbibliotheken stehen dem Anwender zukünftig weitere Arbeitsmedien zur Verfügung. Darüber hinaus wurden mit CO und CO₂ zwei neue Gas-Komponenten in ATHLET implementiert, die eine detailliertere Simulation von Unfällen insbesondere bei Kopplung mit COCOSYS ermöglichen. Ebenfalls mit Blick auf die Kopplung mit COCOSYS wurde insbesondere die Schnittstelle an Strukturoberflächen mit Wärmeübergang erweitert und anwenderfreundlicher gestaltet. Die Schnittstelle ist nicht auf COCOSYS beschränkt, so dass zukünftig auch andere externe Programme für neue Einsatzbereiche von ATHLET gekoppelt werden können. Für die Anwendung von ATHLET für flüssigmetallgekühlte Reaktoren wurden weitere inhärente Rückwirkungen auf die Neutronenkinetik, die durch thermische Ausdehnung von Strukturen und Kühlmittelzustände kommen, implementiert. Damit können derartige Systeme nun deutlich realistischer simuliert werden.

Für unterschiedliche Anwendungen wurden neue Wärmeübergangskorrelationen in ATHLET implementiert. So stehen dem Anwender spezielle Korrelationen für die Kondensation in vertikalen Wärmetauscherrohren, die bspw. in passiven Sicherheitssystemen zum Einsatz kommen, neu zur Verfügung. Auch existiert im Programm nun die Möglichkeit, von der Reynoldszahl abhängige, nicht konstante Formverluste abzubilden. Dies ist nicht zuletzt für die genauere Simulation von passiven Systemen von Bedeutung, da diese von nur geringen Kräften angetrieben werden. Die Programmerweiterung bietet außerdem eine Basis für die Vorgabe spezifischer Formverluste von neuen, auch passiven Komponenten. So kommen z. B. in verschiedenen fortschrittlichen Reaktordesigns Plattenwärmetauscher zum Einsatz, deren Formverluste durch spezielle Korrelationen unter Eingang der Oberflächenstrukturierung der Platten beschrieben werden. Mit der vorgenommenen Programmerweiterung können diese Komponenten zukünftig einfacher und genauer mit ATHLET simuliert werden.

Darüber hinaus konnten im Rahmen des Projekts zahlreiche Modelle, die für Sicherheitsanalysen von Leichtwasserreaktoren von besonderer Bedeutung sind, verbessert werden. Dies umfasst bspw. die Simulation der kritischen Ausströmung, die Berechnung der Wärmeströme und ihre Verteilung auf die beiden Phasen bei Filmsieden bei gleichzeitiger starker Dampfüberhitzung, die Modellierung der Wiederbenetzung und die Abbildung des Bortransports. Durch die vorgenommene Modellpflege wird die Leistungsfähigkeit von ATHLET kontinuierlich erhöht und neuen Anforderungen angepasst.

9.2 Unterstützung der Programmanwender und Verbesserung der Programmhandhabung

Ein wichtiger Arbeitspunkt des abgelaufenen Projekts betrifft die enge Kooperation mit den Programmanwendern und den GRS-externen Programmentwicklern, um deren Erfahrungen in die laufende und zukünftige Programmentwicklung einfließen und allen Nutzern zugänglich machen zu können. Zur Sicherstellung eines intensiven Austauschs und zur effektiven Nutzbarmachung externer Erkenntnisse wurden neben einem internationalen AC² Anwendertreffen in den Räumlichkeiten der GRS Garching im Jahr 2019 zahlreiche bilaterale Kontakte insbesondere zu deutschen Forschungseinrichtungen (z. B. IKE und HZDR) gepflegt, in deren Rahmen Programmanwender vielfältig beraten wurden. Für GRS-externe Modellentwicklungen wurden auf Anfrage verschiedenen Universitäten und Forschungseinrichtungen, bspw. TUM und KIT, bedarfsgerechte Schnittstellen auf Basis der Plug-in-Technik bereitgestellt. Darüber hinaus wurden externe

Entwicklungen zum neuen Stoffwertpaket (HSZG) oder zur Simulation von Druckstößen (RUB), die im Rahmen anderer vom BMWi geförderter Projekte erfolgen, umfangreich unterstützt mit dem Ziel, diese nach Abschluss der Entwicklung in die Hauptentwicklungslinie von ATHLET zu integrieren und allen Programmnutzern zur Verfügung zu stellen. Die kontinuierliche Unterstützung der verschiedenen Programmnutzer liefert daher einen wichtigen Beitrag zum zielführenden und erfolgreichen Einsatz von ATHLET im Rahmen verschiedener Projekte und Fragestellungen und trägt somit zum deutschen Kompetenzerhalt in der Reaktorsicherheit bei.

Die korrekte Anwendung von ATHLET für komplexe, sicherheitstechnische Fragestellungen stellt hohe Anforderungen an den Nutzer. Es ist daher ein kontinuierlicher, die Programmentwicklung begleitender Prozess, die Programmeingabe zur Einbindung spezieller Modelle möglichst einfach und transparent zu gestalten und an neue Anwendungen und Anforderungen anzupassen. So sind z. B. Anlagensimulationen sehr anspruchsvoll, da das Reaktorregelsystem zusammen mit dem Reaktorschutzsystem sehr umfangreich ist und in GCSM häufig mehrere Zehntausend Einzelregler zur Abbildung des gesamten Systems erfordert. Trotz der Bereitstellung grafischer Softwarewerkzeuge hat sich gezeigt, dass es für den Benutzer nicht immer einfach ist, alle Regler einschließlich Rückkopplungen in der (im Sinne von ATHLET) richtigen Struktur und Reihenfolge zu definieren. Um den Benutzer bei der Erstellung der Eingabedaten besser zu unterstützen und die Simulation des Regelsystems zu erleichtern, wurde ein Algorithmus entwickelt, der die Anordnung der Regler automatisch durchführt und der zukünftig in ATHLET integriert werden soll. Eine weitere Herausforderung für den Anwender, insbesondere mit Blick auf Analgenrechnungen mit massiver Parallelkanalnodalisierung des Reaktorkerns, war bisher die Vorgabe einer asymmetrischen Leistungsverteilung zu Beginn einer Transiente. Hierfür wurde eine neue Methode implementiert, die den Start aus einem symmetrischen Zustand und die einfache Einstellung der Asymmetrie während einer Nulltransiente ermöglicht. Weitere Erleichterungen für den Anwender betreffen die Vorgabe von Randbedingungen in sog. Time-Dependent-Volumes oder auch die Prüfung der Eingabedaten für Verzweigungsstellen. Insgesamt konnte die Programmhandhabung durch die vorgenommenen Maßnahmen deutlich vereinfacht und weniger fehleranfällig gestaltet werden.

Für eine erfolgreiche Durchführung und Bewertung von Sicherheitsanalysen spielt neben einem korrekt arbeitenden Simulationsprogramm auch die Anleitung und Führung des Nutzers durch die einzelnen Analyseschritte eine zentrale Rolle. Zu diesem Zweck

wurden zum einen der ATHLET-Distribution neue Beispieldatensätze und Tutorials hinzugefügt, die sowohl neuen Programmanwendern die erstmalige Arbeit mit ATHLET erleichtern als auch erfahrenen Anwendern konkrete Hilfestellung bei der Modellierung von Reaktoren, bspw. von VVER, bieten. Zum anderen beinhaltet das ATHLET-Rechenprogramm Werkzeuge des Pre- und Postprocessings, die den Anwender bei der Vorbereitung, Durchführung, Analyse und Visualisierung einer Störfallsimulation unterstützen. Die Werkzeuge werden gemeinsam mit ATHLET verteilt. Im Rahmen des abgeschlossenen Projekts konnte die umfangreich überarbeitete ATHLET Input Graphics erstmals an alle Programmnutzer verteilt werden. Darüber hinaus konnte der AC² Input Editor, der den Anwender zukünftig bei der Erstellung von Datensätzen unterstützen soll, weiterentwickelt werden. Ein Python-basiertes Plotprogramm wurde neu entwickelt und soll im Zuge der für 2021 geplanten Release von AC² an die Programmnutzer verteilt werden. Dieses Werkzeug nutzt die von ATHLET neuerdings im HDF5-Format erzeugten Ausgabedaten. Mit HDF5 wurde ATHLET um ein modernes, flexibles und vor allem für wissenschaftliche Anwendungen geeignetes Ausgabedatenformat erweitert, das von vielen Programmen gelesen und interpretiert werden kann, was dem ATHLET-Nutzer große Freiheiten bei der Auswahl seiner bevorzugten Postprocessing-Werkzeuge einräumt.

Darüber hinaus wurde eine neue, für alle Komponenten von AC² einheitliche grafische Benutzeroberfläche (GUI) entwickelt und mit der Freigabe von AC²-2019 erstmals an alle Programmanwender verteilt. Die plattformunabhängige Benutzeroberfläche ermöglicht das einfache Starten von (gekoppelten) AC²-Simulationen und bietet einen komfortablen Zugriff auf die unterschiedlichen Software-Werkzeuge wie auch die Programmdokumentation.

Alle Programmteile von AC² – dies umfasst u. a. die vier Programme ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und ATLAS, das Numerical Toolkit (NuT), Software-Werkzeuge, GUI und Plug-ins – werden in Form eines gemeinsamen Installationspakets, dessen Strukturierung und technische Umsetzung im Rahmen von RS1565 erfolgte, für MS Windows und Linux-Betriebssysteme an die Programmanwender verteilt. Die Installationspakete berücksichtigen nicht nur Abhängigkeiten unter den AC²-Komponenten, sondern auch Abhängigkeiten zu externen Bibliotheken. Der Nutzer kann bei der Installation diejenigen Programmteile auswählen, die er verwenden möchte, und erhält eine vollständig lauffähige Umgebung für seine Analysen mit AC² bzw. einzelnen Komponenten von AC².

9.3 Qualitätssicherung, Releasemanagement und internationale Zusammenarbeit

Als wichtiger Baustein der Programmentwicklung hat sich die Kooperation in internationalen Arbeitsgruppen gezeigt. Neben der Mitarbeit in der FONESYS-Gruppe hat sich die GRS im Rahmen des Projekts RS1565 innerhalb verschiedener Arbeitsgruppen der OECD/NEA beteiligt. Hierzu zählen SAPIUM, 3DSYSTH sowie der RBHT-Benchmark. Die enge Zusammenarbeit mit internationalen Partnern ermöglichte hierbei den Erfahrungsaustausch zu und die kritische Prüfung von aktuellen Entwicklungsarbeiten sowie die Initiierung zukünftiger, gemeinsamer Projekte zu Themen der Reaktorsicherheitsforschung. Sowohl FONESYS als auch der RBHT-Benchmark erlaubten der GRS den Zugang zu zusätzlichen experimentellen Daten und damit eine erweiterte Programmvalidierung, hier hinsichtlich der Strömungsformen in horizontalen Rohren und zum Fluten des Kerns nach einem Kühlmittelverluststörfall. Die durchgeführten Versuchsnachrechnungen konnten Verbesserungspotential in ATHLET aufzeigen und Programmertüchtigungen anstoßen. Die aktive Beteiligung in den verschiedenen Gruppen ermöglichte der GRS einerseits die Mitgestaltung und Ausrichtung internationaler Forschungsschwerpunkte. Andererseits diente sie der Spiegelung der internationalen Entwicklungsschritte auf die ATHLET-Programmentwicklung, womit Aktualität der eigenen Arbeiten sichergestellt und ATHLET als zeitgemäßes und konkurrenzfähiges Werkzeug etabliert wird.

Darüber hinaus wurden die Maßnahmen zur Qualitätssicherung der Programmentwicklung durch den Wechsel zu Git und GitLab erheblich ausgebaut. Die durchgängige Nutzung eines Issue-Trackers dokumentiert alle Änderungen im Quellcode und macht diese nachvollziehbar. Durch die verbindliche Integration von Merge Requests in den Entwicklungsprozess wird das Vieraugenprinzip umgesetzt. Dies dient neben der Qualitätssicherung auch dem Know-How-Erhalt und -Transfer, da Programmiererweiterungen von mindestens einem weiteren Mitglied des Entwicklungsteams überprüft und bewertet werden. Nach dem erfolgreichen Aufbau einer Continuous Integration Umgebung für automatisierte Programmtests zur Qualitätssicherung konnte der Umfang an Testdatensätzen während der Projektlaufzeit von RS1565 kontinuierlich ergänzt werden. Ziel ist, möglichst viele Modelle und Schnittstellen von ATHLET regelmäßig automatisiert zu prüfen. Die enge Verzahnung von Programmentwicklung einerseits und Prüfung durch Continuous Integration andererseits macht den Einfluss von Codeänderungen transparent, deckt mögliche Programmdefizite frühzeitig im Entwicklungsprozess auf und erhöht somit die Effizienz und Qualität der Codeentwicklung.

In Abhängigkeit vom Entwicklungsfortschritt und Anwenderbedarf werden in unregelmäßigen Abständen neue ATHLET-Programmversionen bereitgestellt und verteilt. Dabei wird für abgestimmte Releases neuer AC²-Versionen ein Zeitraum von etwa 2 Jahren angestrebt, mit wenigen Patches in der Zwischenzeit. Im Rahmen von RS1565 wurde die Version ATHLET 3.2 (enthalten in AC²-2019) sowie der erste Patch ATHLET 3.2.1 (AC²-2019.1) offiziell freigegeben. Die für die Qualitätssicherung wichtige, systematische Archivierung der ATHLET-Programmversionen erfolgte automatisch durch das Versionskontrollsystem Subversion (mittlerweile nach GitLab migriert). Die Portabilität der neuen ATHLET-Version wurde mit den in der GRS verfügbaren Rechnerarchitekturen, Betriebssystemen und Compilern geprüft. Um die Kompatibilität der einzelnen Programmmodule der neuen Version zu gewährleisten, wurden Regressionstests mit standardisierten Datensätzen sowie zahlreiche Validierungsrechnungen durchgeführt. Die derart qualitätsgesicherten Programmversionen wurden schließlich über die ständig gepflegte AC² User Area an alle Programmanwender mit gültiger Programmlizenz verteilt. Insgesamt haben bisher etwa 40 Organisationen aus 15 Ländern Zugang zur aktuellen Programmversion erhalten.

9.4 Fazit und Ausblick

Die im Projekt RS1565 zur *Weiterentwicklung des AC² Thermohydraulik-Moduls ATHLET zur Simulation komplexer, zweiphasiger Strömungsphänomene* vorgesehenen Themen und Arbeitsschwerpunkte konnten innerhalb der Projektlaufzeit von knapp drei Jahren erfolgreich bearbeitet werden. Alle wichtigen Vorhabensziele wurden in wesentlichen Punkten erreicht, gleichwohl nicht alle Entwicklungen abgeschlossen sind und daher in einem Nachfolgevorhaben weiterverfolgt werden sollen. Im Rahmen des Projekts wurden zahlreiche thermohydraulische Neuentwicklungen gestartet und Modellverbesserungen umgesetzt, um Leistungsfähigkeit und Zuverlässigkeit von ATHLET mit Blick auf ein ständig wachsendes Anwendungsspektrum für die Zukunft zu gewährleisten. Die weitere Intensivierung der Zusammenarbeit und Unterstützung der Programmanwender wie auch die Kooperation in internationalen Arbeitsgruppen hat wichtige Impulse für die Weiterentwicklung von ATHLET gegeben, die im Projektverlauf aufgegriffen und umgesetzt werden konnten. Einige der Programmverbesserungen konnten im Zuge der Freigabe neuer Programmversionen bereits an alle Anwender von ATHLET verteilt werden, andere werden mit der sich in Vorbereitung befindenden nächsten Release folgen. Die Maßnahmen zur Qualitätssicherung der Programmentwicklung wurden durch fortschrittliche Werkzeuge und überarbeitete Arbeitsabläufe signifikant erweitert, wodurch die

Effizienz und Qualität der Codeentwicklung wie auch der Know-How-Transfer gefördert werden, so dass ATHLET auch langfristig als qualitätsgesichertes Analysewerkzeug bereitgestellt werden kann.

Die Entwicklung von ATHLET wird auch nach dem Projektende von RS1565 fortgesetzt, um neuen Anforderungen seitens der Programmanwendung zu begegnen und bestehende Modelllücken auch mit Blick auf neue und evolutionäre Reaktordesigns zu schließen. Die im Rahmen von RS1565 begonnenen Entwicklungsarbeiten werden im Rahmen eines Nachfolgevorhabens aufgegriffen und konsequent fortgeführt. So soll das 3-Felder-Modell weiter ertüchtigt und validiert werden, um schließlich an alle Programmnutzer auch für Produktivrechnungen freigegeben werden zu können. Es ist ebenfalls geplant, ATHLET für den Einsatz für Forschungsreaktoren durch geeignete neue Modelle weiter zu qualifizieren. Aufbauend auf den in diesem Vorhaben geleisteten Arbeiten ist ein wesentlicher Aspekt der zukünftigen Entwicklung die Vereinheitlichung der verschiedenen, innerhalb der Fluidodynamik und des Wärmeübergangs eingesetzten Strömungsbildkarten, um konsistente Annahmen und Schließungsgleichungen in allen Modellen zu nutzen. Auf dieser Basis sollen außerdem zusätzliche Strömungsbildkarten, bspw. für Post-CHF-Zustände, mit entsprechenden Schließungsgleichungen in ATHLET implementiert werden, um die Vorhersagefähigkeit von ATHLET für verschiedene Anwendungen zu erhöhen. Mit Blick auf die Codepflege soll das Wärmeübergangsmodule von ATHLET restrukturiert werden, um es zukunftsfähig und für unterschiedliche neue Anwendungen besser nutzbar zu machen. Hierfür wurden im Rahmen von RS1565 ein Konzept erstellt und erste Vorarbeiten durchgeführt.

Darüber hinaus wird die Arbeit in internationalen Gruppen fortgeführt. Dies betrifft den OECD/NEA-RBHT-Benchmark zum Reflooding und die Aktivitäten innerhalb der FONESYS-Gruppe, die sich zuletzt auf Strömungsregime und Übergangskriterien in horizontalen Rohren konzentrierten. Das hierbei aufgedeckte Weiterentwicklungspotential, bspw. hinsichtlich der Kondensation bei unterkühltem Fluid oder der Modellierung des Entrainments, wird berücksichtigt und im Nachfolgeprojekt aufgegriffen.

Die allgemeine Freigabe einer neuen AC²-Programmversion AC²-2021, die die neue ATHLET-Version 3.3 enthalten wird, ist für Sommer 2021 avisiert. Viele der im Rahmen des vorliegenden Vorhabens RS1565 durchgeführten Modellentwicklungen, aber auch Entwicklungen aus anderen Forschungsprojekten, werden damit für alle Programmanwender verfügbar werden. Mit diesen Programmverbesserungen wird sichergestellt, dass den zahlreichen im Umgang mit ATHLET geschulten Anwendern auch zukünftig

ein leistungsstarkes, zuverlässiges und anwenderfreundliches Werkzeug zur Verfügung stehen wird, das die Durchführung von Sicherheitsanalysen nach dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik erlaubt.

Literaturverzeichnis

- /AKI 73/ Akiyama, M.: Bubble Collapse in Subcooled Boiling. Bulletin JSME, Bd. 16, Nr. 93, S. 570–575, DOI 10.1299/jsme1958.16.570, 1973.
- /ALS 13/ Al Sarkhi, A. M., Sarica, C.: Modeling of the droplet entrainment fraction in adiabatic gas-liquid annular flow. Multiphase Science and Technology, Bd. 25, Nr. 1, 2013.
- /AND 87/ Andritsos, N., Hanratty, T. J.: Influence of Interfacial Waves in Stratified Gas-Liquid Flows. AIChE Journal, Bd. 33, Nr. 3, S. 444–454, 1987.
- /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.
- /AVD 16/ Avdeev, A. A.: Bubble Systems. Mathematical Engineering, 466 S., ISBN 978-3-319-29288-5, DOI 10.1007/978-3-319-29288-5, Springer International Publishing: Cham, s.l., 2016.
- /BAC 19/ Baccou, J., Zhang, J., Fillion, P., Damblin, G., Petruzzi, A., Mendizábal, R., Reventós, F., Skorek, T., Couplet, M., Iooss, B., Oh, D.-Y., Takeda, T.: Development of good practice guidance for quantification of thermal-hydraulic code model input uncertainty. Nuclear Engineering and Design, Bd. 354, S. 110173, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110173, 2019.
- /BAC 20a/ Baccou J., et al.: SAPIUM: Development of a Systematic Approach for Input Uncertainty Quantification of the Physical Models in Thermal-Hydraulic Codes, Good Practices Guidance Report. NEA/CSNI, NEA/CSNI/R, NEA/CSNI/R(2020)16, NEA/CSNI/R(2020)16, 2020.
- /BAC 20b/ Baccou, J., Zhang, J., Fillion, P., Damblin, G., Petruzzi, A., Mendizábal, R., Reventós, F., Skorek, T., Couplet, M., Iooss, B., Oh, D.-Y., Takeda, T., Sandberg, N.: SAPIUM: A Generic Framework for a Practical and Transparent Quantification of Thermal-Hydraulic Code Model Input Uncertainty.

Nuclear Science and Engineering, Bd. 194, Nr. 8-9, S. 721–736, DOI 10.1080/00295639.2020.1759310, 2020.

- /BAL 16/ Bals, C.: Berücksichtigung der Bündelgeometrie und des Einflusses von Abstandhaltern bei der Bestimmung von CHF mit Hilfe der Look-up-Tabellen von Groeneveld. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-MIS-16/1, Januar 2016.
- /BAL 21/ Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M. F., Benson, S., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Constantinescu, E. M., Dalcin, L., Dener, A., Eijkhout, V., Gropp, W. D., Hapla, V., Isaac, T., et al.: PETSc Online FAQ – Why is my parallel solver slower than my sequential solver, or I have poor speed-up? erreichbar unter <https://petsc.org/release/faq/#why-is-my-parallel-solver-slower-than-my-sequential-solver-or-i-have-poor-speed-up>, abgerufen am 27. Oktober 2021.
- /BAS 05/ Basu, N., Warriar, G. R., Dhir, V. K.: Wall Heat Flux Partitioning During Subcooled Flow Boiling: Part II—Model Validation. Journal of Heat Transfer, Bd. 127, Nr. 2, S. 141–148, DOI 10.1115/1.1842785, 2005.
- /BES 17/ Bestion, D.: System thermalhydraulics for design basis accident analysis and simulation: Status of tools and methods and direction for future R&D. Nuclear Engineering and Design, Bd. 312, S. 12–29, DOI 10.1016/j.nucengdes.2016.11.010, 2017.
- /BES 21/ Bestion, D., et al.: State-of-the-art report on Simulation Capability of 3-D System-Scale Thermal-Hydraulic Analysis Codes (3DSYSTH). OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2021, Veröffentlichung in Vorbereitung.
- /BOR 17/ Bortot, S., et al.: Evaluation of the ASTRID core safety coefficients, Preparing ESNII for HORIZON 2020 - FP7-Fission-2013. 2017.
- /BUC 19/ Buchholz, S.: Nachrechnungen PERSEO Test 7 Part 1 und Part 2, TN-BUS-19/01. Technische Notiz, TN-BUS-19/01, Februar 2019.
- /CHA 20/ Chacon, S., Straub, B.: Pro Git, Second Edition, Everything you need to know about git. 2. Aufl., 521 S., 2020.

- /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.
- /CHI 73/ Chisholm, D.: Pressure gradients due to friction during the flow of evaporating two-phase mixtures in smooth tubes and channels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 16, Nr. 2, S. 347–358, DOI 10.1016/0017-9310(73)90063-X, 1973.
- /COL 96/ Collier, J. G., Thome, J. R.: *Convective boiling and condensation*. Oxford engineering science series, Bd. 38, 3. Aufl., 586 S., ISBN 0198562969, Clarendon Press: Oxford, 1996.
- /CRO 17/ Cron, D. von der, Langenfeld, A.: Literatur- und Machbarkeitsstudie zum Mehrfeldermodell, Technische Notiz ATHLET, 08.08.2017 - rev 5582. Technische Notiz, 44 S., 2017.
- /CRO 19/ Cron, D. von der: Meilensteinbericht M4F/M4G, Entwicklung und Validierung von Verdampfungs- und Kondensationsmodellen für den Systemcode ATHLET im Unterauftrag der TU Dresden im Verbundvorhaben PANAS (PANAS-GRS-01). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Garching, Januar 2019.
- /CRO 20a/ Cron, D. von der: Herleitung der Bilanzgleichungen für ein n-Felder-Modell in ATHLET, Technische Notiz, Revision 01. Technische Notiz: Garching, 2020.
- /CRO 20b/ Cron, D. von der: Alternative Formulierung der Wasserspiegelkraft in ATHLET, TN-VDC-20/01. Technische Notiz, Mai 2020.
- /DAL 78/ Dallman, J. C.: *Investigation of Separated Flow Model in Annular Gas-Liquid Two-phase Flows*. Ph. D thesis, University of Illinois at Urban-Champaign, 1978.

- /DIT 30/ Dittus, F. W., Boelter, L. M. K.: Heat transfer in automobile radiators of the tubular type. University of California publications in engineering, Vol. 2, No. 13, University of California press: Berkeley, Oktober 1930.
- /FER 02/ Ferri, R., Achilli, A., Gandolfi, S.: PERSEO PROJECT Experimental Data Report, SIET 01 014 RP 02. SIET, 20. Dezember 2002.
- /FSF 07/ Free Software Foundation, Inc. (FSF): GNU Lesser General Public License, Version 3, 29 June 2007. 3. Aufl., erreichbar unter <https://www.gnu.org/licenses/lgpl-3.0.de.html>, abgerufen am 15. März 2021.
- /GHI 16a/ Ghione, A., Noel, B., Vinai, P., Demazière, C.: Assessment of Critical Heat Flux correlations in narrow rectangular channels. In: Korean Nuclear Society (KNS): 11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-hydraulics, Operation and Safety, Proceedings. NUTHOS-11, Gyeongju, Korea, 9. - 13. Oktober 2016, 2016.
- /GHI 16b/ Ghione, A., Noel, B., Vinai, P., Demazière, C.: Assessment of thermal–hydraulic correlations for narrow rectangular channels with high heat flux and coolant velocity. International Journal of Heat and Mass Transfer, Bd. 99, S. 344–356, DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.03.099, 2016.
- /GIT 21a/ GitLab Inc: GitLab Docs. Erreichbar unter <https://docs.gitlab.com/ee/README.html>, abgerufen am 15. März 2021.
- /GIT 21b/ GitLab Inc.: GitLab Web page. Erreichbar unter <https://about.gitlab.com/>, abgerufen am 27. Oktober 2021.
- /GIT 21c/ Git Community: git --everything-is-local. Erreichbar unter <https://git-scm.com/>, abgerufen am 15. März 2021.
- /GNI 75/ Gnielinski, V.: Neue Gleichungen für den Wärme- und den Stoffübergang in turbulent durchströmten Rohren und Kanälen. Forschung im Ingenieurwesen A, Bd. 41, Nr. 1, S. 8–16, DOI 10.1007/BF02559682, 1975.
- /GRO 07/ Groeneveld, D. C., Shan, J. Q., Vasić, A. Z., Leung, L., Durmayaz, A., Yang, J., Cheng, S. C., Tanase, A.: The 2006 CHF Look-up Table. Nuclear

Engineering and Design, Bd. 237, Nr. 15-17, S. 1909–1922, DOI 10.1016/j.nucengdes.2007.02.014, 2007.

- /GRS 20/ Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Softwareentwicklung (TKP 03-05). Managementhandbuch, Kapitel 2.2.3.5, 17. April 2020.
- /GU 17/ Gu, J., Wang, Q., Wu, Y., Lyu, J., Li, S., Yao, W.: Modeling of subcooled boiling by extending the RPI wall boiling model to ultra-high pressure conditions. Applied Thermal Engineering, Bd. 124, S. 571–584, DOI 10.1016/j.applthermaleng.2017.06.017, 2017.
- /GUO 19/ Guo, L.: Integriertes Ablaufregime im ATHLET-Code. Technische Notiz, TN-GUO-19/01, Oktober 2019.
- /HAA 12/ Haas, C.: Critical Heat Flux for Flow Boiling of Water at Low Pressure on Smooth and Micro-Structured Zircaloy Tube Surfaces. Nr. KIT-SR 7627, 2012.
- /HAI 94/ A. Hainoun: Modellierung des unterkühlten Siedens in ATHLET und Anwendung in wassergekühlten Forschungsreaktoren. 160 S., Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik, Forschungszentrum Jülich, 1994.
- /HAI 01/ A. Hainoun, Schaffrath, A.: Simulation of subcooled flow instability for high flux research reactors using the extended code ATHLET. Nuclear Engineering and Design, Bd. 207, Nr. 2, S. 163–180, DOI 10.1016/S0029-5493(00)00410-6, 2001.
- /HER 19/ Herb, J.: How-to-keep legacy simulation codes alive and continue developing them: A continuous integration process for a nuclear safety analysis code system. Präsentation, Continuous Lifecycle: London, 2019.
- /HEW 87/ Hewitt, G. F., Owen, D. G.: EXPERIMENTAL DATA SET NO. 1: PRESSURE DROP AND ENTRAINED FRACTION IN FULLY DEVELOPED FLOW. Multiphase Science and Technology, Bd. 3, Nr. 1-4, S. 145–154, DOI 10.1615/MultScienTechn.v3.i1-4.60, 1987.

- /HEW 90/ Hewitt, G. F., Govan, A. H.: Phenomenological modelling of non-equilibrium flows with phase change. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 33, Nr. 2, S. 229–242, DOI 10.1016/0017-9310(90)90094-B, 1990.
- /HÖH 72/ Höhle, B.: Die physikalischen Eigenschaften von Gasgemischen mit H₂, CH₄, H₂O, N₂, CO und CO₂. Kernforschungsanlage Jülich GmbH (KFA), JÜL-847-RB, 98 S., April 1972.
- /IAP 18/ IAPWS: Revised Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. IAPWS R6-95(2018), 19 S., September 2018.
- /IAP 20/ The International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS): Guideline on the Use of Fundamental Physical Constants and Basic Constants of Water, Revision 2020. IAPWS G5-01(2020), September 2020.
- /INA 75/ Inayatov A.: Correlation of Data on Heat Transfer. Flow Parallel to Tube Bundles at Relative Tube Pitches of $1.1 < s/d < 1.6$. *Heat Transfer - Soviet Research*, Vol. 7, No. 3, S. 84–88, 1975.
- /ISH 75/ Ishii, M., Grolmes, M. A.: Inception criteria for droplet entrainment in two-phase concurrent film flow. *AIChE Journal*, Bd. 21, Nr. 2, S. 308–318, 1975.
- /ISH 79/ Ishii, M., Chawla, T. C.: Local drag laws in dispersed two-phase flow. Argonne National Laboratory (ANL), NUREG/CR-1230, Dezember 1979.
- /JEN 21/ Jenkins Project: Jenkins Web Page. Erreichbar unter <https://www.jenkins.io/>, abgerufen am 16. März 2021.
- /JOH 75/ Johnson, D. B.: Finding All the Elementary Circuits of a Directed Graph, Donald B. Johnson. *SIAM Journal on Computing*, Vol. 4, No. 1, 1975.
- /KAM 98/ Kaminaga, M., Yamamoto, K., Sudo, Y.: Improvement of Critical Heat Flux Correlation for Research Reactors using Plate-Type Fuel. *Journal of*

Nuclear Science and Technology, Bd. 35, Nr. 12, S. 943–951, DOI
10.1080/18811248.1998.9733966, 1998.

- /KAY 05/ Kays, W. M., Crawford, M. E., Weigand, B.: Convective heat and mass transfer, Indian Edition. McGraw-Hill series in mechanical engineering, 4. Aufl., 546 S., ISBN 978-1-25-902562-4, Tata McGraw Hill: New Delhi, 2005.
- /KIT 20/ Kitware: CMake Web page. Erreichbar unter <https://cmake.org/>, abgerufen am 23. Oktober 2020.
- /KLE 00/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Weber, G.: COCOSYS V1.2, Program Reference Manual. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3/2: Köln, 2000.
- /KRE 20/ Kretzschmar, H. J., Kunick, M., Gocht, U., Hänel, J.: Schnelle Berechnung realer Stoffeigenschaften im Programmsystem AC2 nach den neuesten Standards der IAPWS, Projekt SBRS-AC2 Abschlussbericht. Hrsg.: Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG), Institut für Prozeßtechnik, Prozeßautomatisierung und Meßtechnik, Reaktorsicherheitsforschung – Vorhaben-Nr. 150 1552, 30. September 2020.
- /LAN 10/ Lane J., J. W., Aumiller, D. L., Cheung, F.-B., Hochreiter, L. E.: A self-consistent three-field constitutive model set for predicting co-current annular flow. Nuclear Engineering and Design, Bd. 240, Nr. 10, S. 3294–3308, DOI 10.1016/j.nucengdes.2010.06.013, 2010.
- /LAN 16/ Langenfeld, A.: Entwicklung von ATHLET-32A, Restrukturierung der Subroutine MGAM0 und Modifikation einiger Modelle. Technische Notiz, TN-LAF-16/06, 2016.
- /LAU 82/ Laurinat, J. E.: Studies of the Effects of Pipe Size on Horizontal Annular Two-phase Flows. Ph.D thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1982.
- /LEE 17/ Lee, H. D., Lee, D.-H., Jeong, J. J., Kim, K. D., Lee, D. H., Lee, D.-H., Jeong, J. J., Kim, K. D.: On the Partition Method of Frictional Pressure Drop

for Dispersed Two-Phase Flows in the RELAP5/MOD3, TRACE V5, and Space Codes. Nuclear Technology, Bd. 198, Nr. 1, S. 79–84, DOI 10.1080/00295450.2017.1287503, 2017.

- /LEE 20a/ Lee, J.: A Suggestion for Reconstruction of the Flow Regime Map and Correlations of Drag Forces for Horizontal Flows. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-LEE-20-03, 2020.
- /LEE 20b/ Lee, J.: Simulation result of Mantilla experiments using ATHLET. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-LEE-20-02, 2020.
- /LER 98/ Lerchl, G., Hora, A., Papadimitriou, P., Skorek, T.: Separierte Impulsbilanzen in ATHLET. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-, Nr. 2546, Januar 1998.
- /LER 07a/ Lerchl, G.: Simulation des unterkühlten und gesättigten Siedens mit ATHLET, Nachrechnung von THTL-Versuchen zum Thema ‚Strömungsinstabilitäten in Forschungsreaktoren‘. Technische Notiz, TN-LER-03/07, 2007.
- /LER 07b/ Lerchl, G.: Simulation der Strömungsinstabilität in Forschungsreaktoren bei niedrigem Kühlmitteldruck mit ATHLET, Nachrechnung von KFA-Versuchen. Technische Notiz, TN-LER-06/07, 2007.
- /LIL 88/ Liles, D. R., Spore, J. W., Knight, T. D., Nelson, R. A., Cappiello, M. W., Pasamehmetoglu, K. O., Mahaffy, J. H., Guffee, L. A., Stumpf, H. J., Dotson, P. J.: TRAC-PF1/MOD1 Correlations and Models. Los Alamos National Laboratory (LANL), NUREG/CR-, Nr. 5069: United States, 1988.
- /LIN 97/ Linstrom, P.: NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database 69. DOI 10.18434/T4D303, National Institute of Standards and Technology, 1997.
- /LIU 91/ Liu, Z., Winterton, R.: A general correlation for saturated and subcooled flow boiling in tubes and annuli, based on a nucleate pool boiling equation.

International Journal of Heat and Mass Transfer, Bd. 34, Nr. 11, S. 2759–2766, DOI 10.1016/0017-9310(91)90234-6, 1991.

- /LOY 90/ Loy, D.: Das mögliche gewöhnliche Differenzialgleichungssystem für den ATHLET auf der Grundlage der separierten Massen- Energie und Impulsbilanzen. Technische Notiz, TN-LOD-90-1, 1990.
- /MAG 12/ Magrini, K. L., Sarica, C., Al-Sarkhi, A., Zhang, H. Q.: Liquid Entrainment in Annular Gas/Liquid Flow in Inclined Pipes. SPE Journal, Bd. 17, Nr. 2, S. 617–630, 2012.
- /MAN 74/ MANDHANE, J. M., GREGORY, G. A., AZIZ, K.: A Flow Pattern Map for Gas-Liquid Flow in Horizontal Pipes. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 1, S. 537–553, 1974.
- /MAN 08/ Mantilla, I.: Mechanistic Modeling of Liquid Entrainment in Gas in Horizontal Pipes. Dissertation, The University of Tulsa, 2008.
- /MAN 12/ Mantilla, I., Viana, F., Kouba, G., Roberts, R. (Hrsg.): Experimental investigation of liquid entrainment in gas at high pressure. Proc. of 8th BIER Group North American Conference on Multiphase, Banff, AB, Canada, 20. - 22. Juni 2012, 2012.
- /MAR 48/ Martinelli, R. C., Nelson, D. B.: Prediction of Pressure Drop During Forced Circulation Boiling of Water. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers, Bd. 70, S. 695, 1948.
- /MAR 72/ Markoczy, G.: Convective heat transfer in rod clusters with turbulent axial coolant flow, Konvektive Waermeuebertragung in laengsangestromten Stabbuendeln bei turbulenter Stroemung. T. 1. Bd. 5, Nr. 4, S. 204–212, 1972.
- /MAS 20/ Masterson, R.: Nuclear reactor thermal hydraulics, An introduction to nuclear heat transfer and fluid flow. 1354 S., ISBN 9781138035379, CRC Press: Boca Raton, 2020.

- /MIR 59/ Mirshak, S., Durant, W. S., Towell, R. H.: Heat Flux at Burnout. Savannah River Laboratory (SRNL), DP-355: Aiken, South Carolina, 1959.
- /NUC 01/ Nuclear Safety Analysis Division: RELAP5/MOD3.3 CODE MANUAL VOLUME I: CODE STRUCTURE, SYSTEM MODELS, AND SOLUTION METHODS. Idaho National Laboratory (INL), NUREG/CR-5535/Rev 1-Vol I: Rockville, Maryland, Idaho Falls, Idaho, Dezember 2001.
- /OEC 19/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): SAPIUM: Development of a Systematic Approach for Input Uncertainty Quantification of the Physical Models in Thermal-Hydraulic Codes, Good Practice Guidance Report. NEA/CSNI/R(2019)xx, 2019 (in publication).
- /OLE 13/ Oleksyuk, D., Kobzar, L., Bugaeva, V., Kireeva, D.: Investigations of axial distribution of fuel rod simulator temperature performed at a 37-rod FA model of reactor. 23rd Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, 2013.
- /PAN 02/ Pan, L., Hanratty, T. J.: Correlation of entrainment for annular flow in horizontal pipes. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 28, Nr. 3, S. 385–408, 2002.
- /PAP 10/ Papini, D., Cammi, A.: Modelling of Heat Transfer Phenomena for Vertical and Horizontal Configurations of In-Pool Condensers and Comparison with Experimental Findings. Science and Technology of Nuclear Installations, Bd. 2010, DOI 10.1155/2010/815754, 2010.
- /PAR 91/ Paras, S. V., Karabelas, A. J.: Droplet entrainment and deposition in horizontal annular flow. International Journal of Multiphase Flow, Bd. 17, Nr. 4, S. 455–468, DOI 10.1016/0301-9322(91)90042-2, 1991.
- /ROU 87/ Rousseau, J. C.: Multiphase Science and Technology Vol. 3, Flashing Flow (Experimental Data Set No.13). Hrsg.: Hewitt, G. F., et al., Hemisphere Publishing Corp.: New York, 1987.
- /RUS 21/ Russell Jordan: Inno Setup. Erreichbar unter <https://jrsoftware.org/isinfo.php>, abgerufen am 16. März 2021.

- /SCH 11/ Schöffel, P. J.: Entwicklung eines ATHLET-internen 2D/3D-Moduls. Technische Notiz, TN-SCO-01/11, 2011.
- /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.
- /SCH 20/ Schöffel, P. J.: Restrukturierung der Heat Transfer Berechnung im ATHLET-Modul HECU, TN-SCO-20/01. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Garching, 2020.
- /SEU 16/ Seubert, A., Bousquet, J., Herb, J., Hristov, H., Lerchl, G., Pasichnyk, I., Cron, D. von der: Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-, Bd. -417, Nr. 417, 299 S., ISBN 978-3-946607-99-0, September 2016.
- /SIE 36/ Sieder, E. N., Tate, G. E.: Heat Transfer and Pressure Drop of Liquids in Tubes. Industrial & Engineering Chemistry, Bd. 28, Nr. 12, S. 1429–1435, DOI 10.1021/ie50324a027, 1936.
- /SIE 01/ Siefken, L., Coryell, E. W., Harvego, E. A., Hohorst, J. K.: SCDAP/RELAP5/MOD 3.3 Code Manual, MATPRO - A Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis. Idaho National Engineering and Environmental Laboratory (INL), NUREG, NUREG/CR-6150, Vol. 4, Rev. 2, 2001.
- /SIM 94/ Siman-Tov, M., Felde, D. K., Farquharson, G., Kaminaga, M., McDuffee, J. L., McFee, M. T., Robinson, J. J., Ruggles, A. E., Wendel, M. W., Yoder, G. L.: FY 1993 progress report on the ANS thermal-hydraulic test loop operation and results. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL/M-3789, DOI 10.2172/10192477, 1994.
- /SKO 12/ Skorek, T.: Description of FEBA Test Facility and FEBA/SEFLEX Experimental Program, OECD/NEA PREMIUM Benchmark. Gesellschaft für

Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technical Note:
Garching b. München, Oktober 2012.

- /SKO 13/ Skorek, T., Crécy, A. de: PREMIUM - Benchmark on the quantification of the uncertainty of the physical models in the system thermal-hydraulic codes. In: OECD/CSNI (Hrsg.): Proceedings of OECD/CSNI Workshop 2013. OECD/CSNI Workshop 2013, NEA/CSNI/R(2013)8, 2013.
- /SKO 14/ Skorek, T.: OECD/NEA PREMIUM Benchmark - GRS Phase II Results. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technical Note: Garching b. München, 2014.
- /SKO 16/ Skorek, T., Tiborcz, L.: Validation of ATHLET system code – scaling effects by simulation of reflooding experiments. In: Korean Nuclear Society (KNS): 11th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-hydraulics, Operation and Safety, Proceedings. NUTHOS-11, Gyeongju, Korea, 9. - 13. Oktober 2016, 2016.
- /SKO 19a/ Skorek, T. (Hrsg.): The new critical discharge model for ATHLET. NURETH 18, Portland, August : Portland, 2019.
- /SKO 19b/ Skorek, T., Crécy, A. de, Kovtonyuk, A., Petruzzi, A., Mendizábal, R., Alfonso, E. de, Reventós, F., Freixa, J., Sarrette, C., Kyncl, M., Pernica, R., Baccou, J., Fouet, F., Probst, P., et al.: Quantification of the uncertainty of the physical models in the system thermal-hydraulic codes – PREMIUM benchmark. Nuclear Engineering and Design, Nr. 354, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110199, 2019.
- /SKO 20a/ Skorek, T.: Three Field 1-D Model - Constitutive equations, Technical note TN-SKT 1/20. Garching, 2020.
- /SKO 20b/ Skorek, T.: Coupling of two-fluid and 3 Field models, Technical Note TN-SKT 2/20. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Garching b. München, Mai 2020.
- /SKO 20c/ Skorek, T.: Development, implementation and validation of the closure relations for annular flow in the momentum equation, Technical Note TN-SKT

3/20. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
(GRS): Garching b. München, 2020.

- /STE 92/ Steiner, D., Taborek, J.: Flow Boiling Heat Transfer in Vertical Tubes Correlated by an Asymptotic Model. *Heat Transfer Engineering*, Bd. 13, Nr. 2, S. 43–69, DOI 10.1080/01457639208939774, 1992.
- /STE 20/ Steinhoff, T., Jacht, V.: Weiterentwicklung und Ausbau numerischer Strukturen in den AC2-Programmen ATHLET und COCOSYS. GRS, Bd. 600, 108 S., ISBN 9783947685868, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, August 2020.
- /SUD 93/ Sudo, Y., Kaminaga, M.: A New CHF Correlation Scheme Proposed for Vertical Rectangular Channels Heated From Both Sides in Nuclear Research Reactors. 1993.
- /TAI 76/ Taitel, Y., Dukler, A. E.: A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow. *AIChE Journal*, Bd. 22, Nr. 1, S. 47–55, DOI 10.1002/aic.690220105, 1976.
- /TU 02/ Tu, J. Y., Yeoh, G. H.: On numerical modelling of low-pressure subcooled boiling flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 45, Nr. 6, S. 1197–1209, DOI 10.1016/S0017-9310(01)00230-7, 2002.
- /ÜNA 76/ Ünal, H. C.: Maximum Bubble Diameter, Maximum Rate During the Subcooled Nucleate Flow Boiling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Bd. 19, S. 643–649, 1976.
- /VAL 11/ Valette, M., Pouvreau, J., Bestion, D., Emonot, P.: Revisiting large break LOCA with the CATHARE-3 three-field model. *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 241, Nr. 11, S. 4487–4496, DOI 10.1016/j.nuceng-des.2011.04.019, 2011.
- /VIA 17/ Viana, F.: Liquid Entrainment in Gas at High-Pressures. Dissertation, The University of Tulsa, 2017.

- /WAG 12/ Wagner, W.: Strömung und Druckverlust, Mit Beispielsammlung. Vogel-Fachbuch, 7. Aufl., 318 S., ISBN 3834332739, Vogel: Würzburg, 2012.
- /WAH 17/ Wahide, C.: Preparing ESNII for HORIZON 2020 (ESNII+), Project proposal. 2017.
- /WAL 69/ Wallis, G. B.: One-dimensional Two-phase Flow. McGraw-Hill: New York, 1969.
- /WAL 70/ Wallis, G. B.: Annular Two-Phase Flow, Part 1: A Simple Theory. Journal of Basic Engineering, Nr. 59, 1970.
- /WAR 06/ Warriar, G. R., Dhir, V. K.: Heat Transfer and Wall Heat Flux Partitioning During Subcooled Flow Nucleate Boiling—A Review. Journal of Heat Transfer, Bd. 128, Nr. 12, S. 1243–1256, DOI 10.1115/1.2349510, 2006.
- /WEB 21/ WebQC.Org: Chemical Portal. Erreichbar unter <https://www.webqc.org/>, abgerufen am 13. Januar 2021.
- /WEI 59/ Weisman, J.: Heat Transfer to Water Flowing Parallel to Tube Bundles. Nuclear Science and Engineering, Bd. 6, Nr. 1, S. 78–79, DOI 10.13182/NSE59-A25631, 1959.
- /WIE 19/ Wielenberg, A., Lovasz, L., Pandazis, P., Papukchiev, A., Tiborcz, L., Schöffel, P. J., Spengler, C., Sonnenkalb, M., Schaffrath, A.: Recent improvements in the system code package AC2 2019 for the safety analysis of nuclear reactors. Nuclear Engineering and Design, Nr. 354, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110211, 2019.
- /WIL 90/ Williams, L. R.: Effect of Pipe Diameter on Horizontal Annular Two-phase Flow. Ph.D thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1990.
- /WON 19/ Wong, K. W.: New Analytical Test for ATHLET – Manometer Oscillation and Ransom Faucet Problem. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-WON-19/12, 2019.

- /WON 20a/ Wong, K. W.: Recalculation of the THTL Flow Instability Experiment. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-WON-20/10, 23 S., 2020.
- /WON 20b/ Wong, K. W.: Implementation of the Sudo-Kaminaga Correlation. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-WON-20/11, 21 S., 2020.
- /WON 20c/ Wong, K. W.: Modification of ATHLET HECU Module for Bundle Factor, Subcooled/Saturated Boiling based on Kurchatov Institute VVER Fuel Bundle Experiment, updated Juni 2021. Technische Notiz, TN-WON-20/01, 2020.
- /WON 21/ Wong, K. W.: Simulation of flow instability with modification in ATHLET evaporation and interfacial condensation model. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), Technische Notiz, TN-WON-21-02, 26 S., 2021.
- /WÜR 78/ Würtz, J.: An experimental and theoretical investigation of annular steam-water flow in tubes and annuli at 30 to 90 bar. Riso National Laboratory, Riso Report, No. 372: Copenhagen, Denmark, 1978.
- /YAN 12/ Yang W.S.: FAST REACTOR PHYSICS AND COMPUTATIONAL METHODS. Nuclear Engineering and Technology, Vol. 44 No. 2, 2012.
- /ZEI 94/ Zeitoun, O.: Subcooled Flow Boiling and Condensation. Dissertation, Department of Mechanical Engineering, McMaster University, 1994.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Module des Programms ATHLET und wichtige Kopplungsschnittstellen	3
Abb. 2.1	Kopplung eines 6-Gleichungs-Pipes mit einem Dreifelder-Pipe. Oben: Vor der Kopplung; Unten: Nach der Kopplung. Die Kopplungs-Junction zwischen beiden Rechengebieten ist die Dreifelder-Junction.	34
Abb. 2.2	Schematische Darstellung der Harwell-LOTUS-Versuchsanlage /HEW 87/ und die Nodalisierung des Simulationsgebiets.....	37
Abb. 2.3	Dampfgehalt am Auslass bei Blasenströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,00234 kg/s.....	38
Abb. 2.4	Massenstrom am Auslass bei Blasenströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,00234 kg/s.....	39
Abb. 2.5	Dampfgehalt am Auslass bei Schwallströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0053 kg/s.....	39
Abb. 2.6	Massenstrom am Auslass bei Schwallströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0053 kg/s.....	40
Abb. 2.7	Dampfgehalt am Auslass bei Übergangsströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0137 kg/s.....	40
Abb. 2.8	Massenstrom am Auslass bei Übergangsströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0137 kg/s.....	41
Abb. 2.9	Dampfgehalt am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s	41
Abb. 2.10	Massenstrom am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s	42
Abb. 2.11	Dampfgehalt am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0114 kg/s	42
Abb. 2.12	Massenstrom am Auslass bei Ringströmung mit einer Gaseinlassrate von 0,0114 kg/s	43
Abb. 2.13	Entrainmentanteil am Auslass bei Ringströmung und einer Gaseinlassrate von 0,0686 kg/s.....	44
Abb. 2.14	Entrainmentanteil am Auslass bei Ringströmung und einer Gaseinlassrate von 0,114 kg/s.....	44

Abb. 3.1	Schematische Darstellung der THTL-Teststrecke /SIM 94/.....	50
Abb. 3.2	Vergleich der ATHLET-Vorhersage mit den experimentellen Daten der THTL-Anlage /WON 20a/.....	50
Abb. 3.3	Vergleich verschiedener ATHLET-Modifikationen mit dem Zeitoun-Experiment B4 ($m = 152,5 \text{ kgm}^2\text{s}$; $Q = 478 \text{ kWm}^2$; $Pein = 1,19 \text{ bar}$; $Tein = 79,8 \text{ }^\circ\text{C}$).....	56
Abb. 3.4	Vergleich verschiedener ATHLET-Modifikationen mit dem Zeitoun-Experiment B8 ($m = 263,8 \text{ kgm}^2\text{s}$; $Q = 596 \text{ kWm}^2$; $Pein = 1,2 \text{ bar}$; $Tein = 84,68 \text{ }^\circ\text{C}$).....	56
Abb. 3.5	Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment mit $5,3 \text{ MW/m}^2$	57
Abb. 3.6	Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von $7,4 \text{ MW/m}^2$	58
Abb. 3.7	Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 (mit Fehlerkorrektur im direkten Kondensationsmodell) und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von $12,15 \text{ MW/m}^2$	58
Abb. 3.8	Vergleich der OFI-Vorhersage mit ATHLET 3.2 (mit Fehlerkorrektur im direkten Kondensationsmodell) und der ATHLET-Entwicklungsversion für das THTL-Experiment von $14,9 \text{ MW/m}^2$	59
Abb. 3.9	Berechnungsschema für die Sudo-Kaminaga-Korrelation /SUD 93/.....	61
Abb. 3.10	Querschnitt des COSMOS-L-Experiment (beheizter Abschnitt).....	63
Abb. 3.11	ATHLET Input Modell für COSMOS-L-Experiment.....	64
Abb. 4.1	Schematische Darstellung der horizontal stratifizierten Strömung.....	73
Abb. 4.2	Beispiel für einen Wandreibungsverlust von Flüssigkeit (links) und Dampf (rechts), berechnet durch das bisherige Strömungsmodell und ein stratifiziertes Strömungsmodell	74
Abb. 4.3	Modellierung der Mantilla 2-Zoll-Testanlage	76
Abb. 4.4	Modellierung der Mantilla 6-Zoll-Testanlage	76
Abb. 4.5	Entrainmentrate bei zwei unterschiedlichen Leerrohrgeschwindigkeiten der Flüssigkeit (2-Zoll-Experiment)	78
Abb. 4.6	Gemessene und berechnete Entrainmentrate des 2-Zoll-Testabschnitts	79

Abb. 4.7	In ATHLET ermittelte Strömungsregime zur Berechnung der Grenzflächenreibung für das Mantilla 2-Zoll-Experiment. Unterlegt ist die Mandhane-Strömungskarte (oben: ATHLET 3.2, unten: modifizierte Modellierung).....	80
Abb. 4.8	In ATHLET ermittelte Strömungsregime zur Berechnung der Grenzflächenreibung für das Mantilla 6-Zoll-Experiment. Unterlegt ist die Mandhane-Strömungskarte (oben: ATHLET 3.2, unten: modifizierte Modellierung).....	81
Abb. 4.9	Gemessener und berechneter Druckabfall für das Mantilla 2-Zoll-Experiment	82
Abb. 4.10	Gemessener und berechneter Druckabfall für das Mantilla 6-Zoll-Experiment	83
Abb. 4.11	Leerrohrgeschwindigkeitsbereiche der Experimente aus der Entrainment-Validierungsmatrix	86
Abb. 4.12	Absoluter Mittelwert der relativen Fehler der vorhergesagten Entrainmentrate gegenüber den Versuchsdaten.....	87
Abb. 4.13	Gemessene und vorhergesagte Entrainmentrate von William - Luft/Wasser, 1 bar, 3 Zoll Durchmesser.....	87
Abb. 4.14	Vorausgesagte und gemessene maximale Entrainmentrate anhand der Reynoldszahl für die Leerrohrgeschwindigkeit.....	89
Abb. 4.15	Vertikale Strömungsbildkarte von RELAP, schraffierte Bereiche zeigen Übergänge /NUC 01/.....	91
Abb. 4.16	Nodalisierung der Testgeometrie	92
Abb. 4.17	Phasenmassenströme am Einlass.....	93
Abb. 4.18	Strömungsregime in den beiden Modellen für Kondensation/Verdampfung (Flächenmodell) und Scherkräfte für den Fall 2.....	94
Abb. 4.19	Strömungsregime im Fall 1 mit $d = 0,1$ m, $G = 0,1$ kg/s, $p = 1,0$ bar.....	95
Abb. 5.1	Moby-Dick-Experiment mit Diffusor: Relative Fehler der mit dem neuen Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: \square : Eintrittsunterkühlung 20 K; \diamond : Eintrittsunterkühlung 10 K; Δ : Sättigung am Eintritt	101
Abb. 5.2	Moby-Dick-Experiment mit Diffusor: Relative Fehler der mit dem alten Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: \square :	

	Eintrittsunterkühlung 20 K, \diamond : Eintrittsunterkühlung 10 K, Δ : Sättigung am Eintritt	101
Abb. 5.3	Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Relative Fehler der mit dem neuen Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: \square : Eintrittsunterkühlung 20 K, \diamond : Eintrittsunterkühlung 10 K, Δ : Sättigung am Eintritt	102
Abb. 5.4	Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Relative Fehler der mit dem alten Modell berechneten kritischen Massenstromdichte: \square : Eintrittsunterkühlung 20 K, \diamond : Eintrittsunterkühlung 10 K, Δ : Sättigung am Eintritt	102
Abb. 5.5	Moby-Dick-Experiment mit Expansion: Druckverteilung entlang der Düse: Test no 120EB305: \square : Experiment, _____: Rechnung; Test no 80J276: \diamond : Experiment, Rechnung; Test no 40J227: Δ : Experiment, ---- Rechnung; Test no 20EB192: \circ : Experiment, - . - . -: Rechnung	103
Abb. 5.6	Schema eines 90°-Krümmers mit Kennzeichnung des Biegeradius R_{Biege} und des Innendurchmessers d_{innen}	105
Abb. 5.7	Gemessene und berechnete Wärmeübertragerleistung (grüne Kurve: mit neuen Modellen zur Filmkondensation).....	110
Abb. 5.8	Verlauf des Wärmeübergangskoeffizienten entlang der Filmströmung von oben nach unten	111
Abb. 5.9	Schematische Darstellung der Kurchatov-Institut-Teststrecke /OLE 13/	112
Abb. 5.10	Axiale Verteilung der Oberflächentemperatur für Test #95 der Kurchatov-Institut-Versuchsanlage /WON 20c/	114
Abb. 5.11	Vergleich des spezifischen Volumens von Wasser, berechnet mit Standard-ATHLET (rot) und SBTL95 (grün).....	118
Abb. 6.1	Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur mit Vor- und Rückwärtsreferenz.....	123
Abb. 6.2	Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur im optimierten Fall	124
Abb. 6.3	Generische GCSM-Netzwerkstruktur	125
Abb. 6.4	Matrixdarstellung der GCSM-Netzwerkstruktur des Testanwendung im nicht optimierten Fall.....	127
Abb. 6.5	Matrixdarstellung nach Anwendung des Optimierungsalgorithmus	127

Abb. 6.6	Nodalisierung des Reaktorkerns des ASTRID-Designs.....	132
Abb. 6.7	Reaktivitätsbeiträge durch thermische Ausdehnung im ASTRID-Design. Vergleich der neuen Implementierung mit dem vereinfachten Ansatz (RHOEXT)	133
Abb. 6.8	Reaktivitätsbeitrag aufgrund temperaturbedingter Ausdehnung des Kühlmittels. Vergleich der neuen Implementierung mit dem vereinfachten Ansatz (RHOTEMP)	134
Abb. 6.9	Benutzeroberfläche des AC ² Input Editors	143
Abb. 6.10	AC ² -Starter-Benutzeroberfläche nach Ausführung einer Simulation.....	145
Abb. 7.1	Elemente der SAPIUM-Methodik	157
Abb. 7.2	Nodalisierung des RBHT-Aufbaus	160
Abb. 7.3	Die normierten, maximal erreichten Heizstabtemperaturen in Experiment und Simulation. Die gestrichelten Linien markieren ein Verhältnis von 1 zu 1, sowie eine Abweichung von 5 % in beide Richtungen	161
Abb. 7.4	Quenchzeiten an der Position der maximalen Leistung in Experiment und Simulation. Die gestrichelten Linien markieren ein Verhältnis von 1 zu 1, sowie eine Abweichung von 20 % in beide Richtungen	161
Abb. 7.5	Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-1	162
Abb. 7.6	Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-10	162
Abb. 7.7	Anteil des austretenden flüssigen Wassers bezogen auf die eingespeiste Kühlmittelmasse in Test O-1 mit 1-Kanalmodell	163
Abb. 7.8	Anteil des austretenden flüssigen Wassers bezogen auf die eingespeiste Kühlmittelmasse in Test O-1 mit 2-Kanalmodell	164
Abb. 7.9	Verlauf der Quenchfront für Test O-1 mit $C_{QHTWB} = 3 \cdot 10^5$	165
Abb. 7.10	Verlauf der Quenchfront für Test O-1 mit $C_{QHTWB} = 3 \cdot 10^4$	165
Abb. 7.11	Druckdifferenz über das Bündel in Test O-1	166
Abb. 7.12	Verlauf der Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für den Test O-11 mit $Z_T = 5 \cdot 10^9$	167
Abb. 7.13	Verlauf der Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für den Test O-11 mit $Z_T = 10^{11}$	167

Abb. 7.14	Heizstabtemperatur nahe der Position der maximalen Leistung für Test O-9	168
Abb. 7.15	Quenchfront-Verlauf des Tests O-9	168

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Formelzeichen in Abschnitt 2.1	9
Tab. 2.2	Subskripte in Abschnitt 2.1	10
Tab. 2.3	Die neun Lösungsvariablen für das Dreifeldermodell in ATHLET- Notation	11
Tab. 2.4	Anfangs- und Randbedingungen sowie Stoffeigenschaften	37
Tab. 2.5	Vergleich verschiedener Versuche mit unterschiedlichen Strömungsregimen	38
Tab. 3.1	Relative Fehler zwischen Experiment und Simulation bei OFI /WON 20a/	51
Tab. 3.2	Relativer Fehler zwischen Experiment und Simulation bei OFI nach Programmmodifikation /WON 21/	59
Tab. 3.3	CHF-Ergebnis für Tests mit niedrigem Massenstrom und niedrigem Druck im COSMOS-L-Experiment (SA = Small Annulus; LA = Large Annulus).	65
Tab. 4.1	Validierungsmatrix für Entrainment in horizontalen Rohren.....	85
Tab. 4.2	Verwendete Modellparameter	93
Tab. 5.1	Gleichungen zur Berechnung der Formverlustbeiwerte von Bögen, die aus 90°-Krümmern zusammengesetzt sind /WAG 12/.....	106

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de