

**Validierung von
COCOSYS im
Programmsystem AC²**

Validierung von COCOSYS im Programmsystem AC²

Abschlussbericht

Siegfried Arndt
Ivan Bakalov
Sebastian Band
Sara Beck
Dimitar Iliev
Walter Klein-Heßling
Chuanhe Lu
Holger Nowack
Nils Reinke
Claus Spengler
Jörn Stewering

Oktober 2023

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1579 durchgeführt.

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

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

Deskriptoren

AC²; Beton-Schmelze-Wechselwirkung, Brand, COCOSYS, Containment, Iod und Aerosolverhalten; passive Systeme, SMR, Thermohydraulik

Kurzfassung

Dieser Bericht dokumentiert die Arbeiten zum BMUV geförderten Projekt RS1579 mit dem Titel „Validierung von COCOSYS im Programmsystem AC²“ und beinhaltet die fortgeführte Validierung und Qualifizierung der weiterentwickelten und an den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik sowie an internationale Entwicklungen neuer Reaktorkonzepte angepassten Rechenprogramme und Modelle. Die Schwerpunkte der Arbeiten lagen auf den folgenden fachlichen Themenkomplexen:

- Fortsetzung der Validierung von AC²/COCOSYS entsprechend dem Entwicklungsfortschritt einzelner Modelle/Module und verfügbarer Experimente, u. a. in der deutschen THAI-Anlage bei Becker Technologies. Dies beinhaltet die Simulation von Experimenten zu thermohydraulischen Phänomenen (z. B. Schichtung einer Leichtgaswolke), zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten, zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung, zum Abbau von H₂ und CO in passiven autokatalytischen Rekombinatoren sowie zur H₂-Verbrennung.
- Erprobung der Anwendbarkeit von AC²/COCOSYS auf fortschrittliche und innovative Anlagenkonzepte/passive Systeme. Ein großes Themengebiet stellen die in verschiedenen fortschrittlichen Reaktorkonzepten eingesetzten passiven Systeme zur langfristigen Nachwärmeabfuhr aus Kühlkreislauf und Containment bei Stör- und Unfällen dar. Entsprechende Experimente zu z. B. passiven Containment-Kühlsystemen wie Gebäudekondensatoren (PASI, INKA) oder auch Containment-Außenkühlung (WAFT) sind mit COCOSYS analysiert und der Modellstand bewertet worden. Einen weiteren Schwerpunkt bildete die Anwendung und Bewertung von CoPool zur Simulation dreidimensionaler Strömungen in großen Wasserpools mit COCOSYS/CoPool.
- Qualifizierung von AC²/COCOSYS durch beispielhafte Analysen repräsentativer Stör- oder Unfallabläufe für DWR. Anwendungsrechnungen stellen für Simulationsprogramme aufgrund ihrer vielseitigen Wechselwirkungen eine besondere Herausforderung dar. Am Beispiel eines generischen DWR KONVOI wurden COCOSYS-Rechnungen auf Plausibilität überprüft sowie die Stabilität der numerisch-mathematischen Kopplungsmethodik getestet.

Neben diesen fachlichen Schwerpunkten zieht die GRS zudem einen erheblichen Nutzen aus der Begleitung nationaler und internationaler experimenteller Projekte. Dazu

zählen insbesondere Aktivitäten der OECD/NEA wie die experimentellen Programme THAI, ESTER und PRISME.

Das Gesamtpaket einer qualifizierten Programmentwicklung und -validierung beinhaltet auch die Dokumentation und Anwenderunterstützung. Zum Dokumentationspaket gehören die COCOSYS-Kurzbeschreibung, das User Manual, das Handbuch zur Modellbeschreibung sowie die Dokumentation zum Regressionstesten. Die entsprechenden Dokumente werden kontinuierlich aktualisiert und vervollständigt und im Zuge der Veröffentlichungen neuer AC²-Versionen bereitgestellt.

Abstract

This report documents the work on the BMUV-funded project RS1579 entitled “*Validation of the COCOSYS programme in the programme system AC²*”. It describes the continued qualification and validation of the computational programmes and their models, which were further developed and adapted to the current state of science and technology and to international developments of new reactor concepts. The work focused on the following topics:

- Continuation of the validation of AC²/COCOSYS according to the development progress of individual models/modules and available experiments, e. g. at the German THAI facility at Becker Technologies: This included the simulation of experiments on aerosol and fission product behaviour, melt-concrete interaction, the decomposition of H₂ and CO in passive autocatalytic recombination, and H₂-combustion. In addition, typical scenarios resulting from a postulated accident and the associated thermohydraulic phenomena (e. g. stratification of a light gas cloud) were used for validation by accompanying corresponding THAI experiments.
- Testing the applicability of AC²/COCOSYS to advanced and innovative plant concepts/passive systems: The passive systems used in various advanced reactor concepts for the long-term removal of residual heat from the cooling circuit and containment in the event of incidents and accidents represent a major topic. Corresponding experiments (PASI, INKA) on e. g. passive containment cooling systems such as building condensers or containment external cooling (WAFT) were analyzed with COCOSYS and the model status was evaluated. Another topic was the application and evaluation of CoPool for the simulation of 3-dimensional flows in large water pools.
- Qualification of AC²/COCOSYS by means of exemplary analyses of representative incidents or accident sequences for PWRs: Application calculations pose a particular challenge for simulation programmes due to their manifold interactions. By applying COCOSYS using the example of a generic PWR KONVOI, the results were checked for plausibility and the stability of the numerical-mathematical coupling methodology was tested.

In addition to these technical points, GRS considerably benefits from the support of national and international experimental projects. These include OECD/NEA activities such as the experimental programmes THAI, ESTER, and PRISME.

The overall package of a qualified programme development and validation also includes code documentation and user support. The documentation package comprises the COCOSYS short description, the user manual, the reference manual, and the regression test documentation. These documents are continuously updated and completed and provided with the release of each new AC² version.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	III
1	Einleitung	1
1.1	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele	1
1.2	Stand des Wissens / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens	5
2	Validierung von AC²/COCOSYS	15
2.1	Validierung von Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten	15
2.1.1	THAI TH-29 zur kritischen Wasserstoffanreicherung in Containmentbereichen von DWR.....	15
2.1.2	THAI HR-57 zum Rekombinatorverhalten in H ₂ /CO-haltiger Atmosphäre	28
2.1.3	THAI Iod-31 zur Anwendung des ATM_FULL-Modells.....	35
2.1.4	PANDA ST3_2 zur sprühstrahlinduzierten Schichtungsauflösung.....	40
2.1.5	THAI TH-35 zur Analyse von Gegenströmungen	53
2.2	Validierung der Iod- und Aerosolmodellierung in NewAFP	58
2.2.1	OECD THAI-3 Iod-32.....	58
2.2.2	THAI Iod-37 zur thermischen Stabilität von Iodoxiden (IOx).....	67
2.2.3	THAI Iod-33 zur inhomogenen Ausbreitung von Iod.....	70
2.2.4	OECD/NEA THEMIS WH-33 zur Spaltproduktrückhaltung in Wasserpools.....	74
2.2.5	THAI AW-4 zu Kondensationsvorgängen an Containmentstrukturen	77
2.2.6	Umsetzung der Regressionstestdatensätze auf NewAFP an Beispielen...	85
2.3	Validierung des CCI-Moduls in COCOSYS	104
2.3.1	ACE-Experimente	104
2.3.2	Erprobung der Anwendbarkeit des Kernfänger-Modells in COCOSYS auf das EPR™-Konzept.....	140
2.4	OECD/NEA PRISME zu Kabelbrandexperimenten	159
2.4.1	Durchführung einer blinden COCOSYS-Vorausrechnung für ein Kabelbrandexperiment (FIRE/PRISME-Benchmark Step#2).....	159

2.4.2	Durchführung einer offenen COCOSYS-Rechnung anhand des realen Brandszenarios aus der Datenbank OECD/NEA FIRE (FIRE/PRISME-Benchmark Step#3)	175
3	Erprobung von AC²/COCOSYS auf fortschrittliche und innovative Anlagekonzepte/passive Systeme.....	181
3.1	Passive Containmentwärmeabfuhr für fortschrittliche Anlagekonzepte ..	181
3.1.1	WAFIT-Experimente zur Nachrechnung und Bewertung des Rivulet Modells	181
3.1.2	Erstellung generischer Datensätze und Nachrechnungen von Szenarien für ein (von außen) geflutetes Containment mit SMR typischen Randbedingungen	185
3.2	Passive Wärmeabfuhrsysteme fortschrittlicher Anlagekonzepte	238
3.2.1	PASI-Versuche zur Validierung des GEKO-Modells	238
3.2.2	INKA-Experimente mit dem GEKO-Modul in COCOSYS	243
3.2.3	INKA-Experiment EASY-4 mit gekoppelter Anwendung und Vergleich mit alter Modellierung	276
4	Qualifizierung von AC²/COCOSYS anhand beispielhafter Analysen von Stör- oder Unfallabläufen in DWR	293
4.1	Generischer DWR-KONVOI.....	293
4.1.1	Simulationsergebnisse.....	296
4.2	THAI-Detailstudien zum Wärmeübertragungsmodell CO1	303
4.3	Fazit.....	304
5	Querschnittsaktivitäten	305
5.1	Begleitung nationaler und internationaler experimenteller Programme ..	305
5.1.1	OECD/NEA THAI	305
5.1.2	OECD/NEA STEM/BIP und ESTER.....	306
5.1.3	OECD/NEA PRISME-3	306
5.2	Koordination AC ² /COCOSYS-Anwendungsgruppe und Support.....	306
6	Qualitätssicherung und Projektmanagement	309
6.1	Qualitätssicherung	309

7	Zusammenfassung	311
7.1	Validierung von Einzelmodellen in COCOSYS.....	311
7.2	Erprobung von AC ² /COCOSYS auf fortschrittliche und innovative Anlagenkonzepte/passive Systeme	315
7.3	Qualifizierung von AC ² /COCOSYS anhand beispielhafter Analysen von Stör- oder Unfallabläufen für DWR	317
7.4	Querschnittsaktivitäten.....	317
7.5	Abschließendes Fazit	318
	Literaturverzeichnis.....	321
	Abbildungsverzeichnis.....	337
	Tabellenverzeichnis.....	353
	Abkürzungsverzeichnis.....	355

1 Einleitung

Die Gesamtzielsetzung des BMUV geförderten Projekts RS1579 mit dem Titel „*Validierung von COCOSYS im Programmsystem AC²*“ umfasst die fortgesetzte Validierung bzw. Qualifizierung neu entwickelter oder verbesserter Modelle in COCOSYS (**Containment Code System**) /WOL 22/. Dies betrifft in erster Linie die Validierung anhand der Begleitung und Nachrechnung entsprechender Experimente, die Bewertung der Modellbasis bei Anwendungen auf innovative Systeme einschließlich neuer fortschrittlicher Reaktorkonzepte, aber auch die gezielte Anwendung von COCOSYS im Rahmen gekoppelter Rechnungen mit AC² (ATHLET-CD – COCOSYS) für generische Anlagenrechnungen /WIE 19/. Weiterhin tragen die Mitarbeit in nationalen und internationalen versuchsbegleitenden Arbeitsgruppen insbesondere der OECD/NEA sowie die Koordination der externen Validierung des Codes zur Qualifizierung bei. Dadurch leistet die GRS einen substantziellen Beitrag zur Gestaltung der Reaktorsicherheitsforschung, national wie international, und zur Aufnahme aktueller Fragestellungen für die Codeentwicklung und Validierung.

1.1 Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele

Die wissenschaftliche Zielsetzung der in diesem Bericht dokumentierten Arbeiten ist die Validierung bzw. Qualifizierung der weiterentwickelten und an den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik sowie an internationale Entwicklungen neuer Reaktorkonzepte angepassten Rechenprogramme und Modelle.

Die Arbeiten sind eng verknüpft mit der Entwicklung in parallel laufenden Forschungsvorhaben, die durch das BMUV gefördert werden. Für COCOSYS sind dies RS1561 „*Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC²*“ /SPE 21/ und RS1598 „*Verbesserungen von Modellen zur Simulation von Containmentphänomenen mit dem AC²-Programm COCOSYS*“.

Aufbauend auf den aus der bisherigen Validierung und Anwendung von COCOSYS gewonnenen Erkenntnissen sowie dem Entwicklungsstand von AC² wurden in diesem Vorhaben die im folgenden Überblick genannten wissenschaftlich-technischen Arbeitsziele verfolgt:

- Fortsetzung der **Validierung von AC²/COCOSYS** entsprechend dem Entwicklungsfortschritt einzelner Modelle/Module und verfügbarer Experimente

insbesondere zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten, zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung und zum PAR-Verhalten.

- Erprobung der Anwendbarkeit von **AC²/COCOSYS** auf **fortschrittliche und innovative Anlagenkonzepte/passive Systeme**.
- Qualifizierung von AC²/COCOSYS durch ausgewählte Analysen repräsentativer **Stör- oder Unfallabläufe** für DWR.
- Querschnittsaktivitäten – **Begleitung nationaler und internationaler experimenteller Projekte** und Koordination der AC²/COCOSYS-Anwendergruppe sowie Support.
- **Projektmanagement und Qualitätssicherung** – Regressionstesten vor Freigabe einer neuen Codeversion, Aktualisierung der Validierungsmatrix, Dokumentation.

AP 1: Validierung von AC²/COCOSYS (s. Kap. 2, S. 15 ff.)

Die hier geplanten Validierungsarbeiten für COCOSYS konzentrierten sich u. a. auf neue und verbesserte Modelle insbesondere zum Aerosol-, Iod- und Spaltproduktverhalten und zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Letzterer Punkt ist eng verknüpft mit der Freisetzung von Spaltprodukten aus Schmelzepools sowie der Ausbreitung von Kernschmelze in Core-Catcher-Konzepten von Anlagen der Generation III/III+. Des Weiteren wurden generell auch für Unfallabläufe relevante Phänomene, wie z. B. H₂-Verbrennung oder H₂/CO-Rekombination betrachtet und neue Erkenntnisse aus Experimenten einbezogen. Begleitend zur fortschreitenden Umstrukturierung und Erweiterung des Spaltprodukt- und Aerosol-Moduls AFP in COCOSYS zu NewAFP, zukünftig AFP2, sind die Modelle einer umfänglichen Validierung unterzogen worden. Für die Validierung aller Modelle/Module wurden dabei Ergebnisse aus nationalen (THAI, INKA, Laborversuche FRAMATOME, MOCKA) und internationalen (OECD/NEA THAI, BIP, STEM, CCI bzw. Nachfolgeprojekte) experimentellen Programmen genutzt.

AP 2: Erprobung der Anwendbarkeit von AC²/COCOSYS auf fortschrittliche Anlagenkonzepte/passive Systeme (s. Kap. 3, S. 181 ff.)

In verschiedenen fortschrittlichen Reaktorkonzepten ist die passive Wärmeabfuhr über die Außenwand des Containments als ultimative Wärmesenke bei Stör- und Unfällen vorgesehen. Beim AP1000 von Westinghouse oder den auf dieser Technik basierenden

chinesischen Anlagen CAP1400 mit größerer Leistung wird die Außenseite der Stahl-schale des Containments durch einen herablaufenden Wasserfilm im Gegenstrom zu einem Luftstrom gekühlt und so die Restwärme sicher abgeführt. Zur Berechnung der Kontaktfläche wurde am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) ein Rivulet-Modell für COCOSYS entwickelt /HUA 15/ und implementiert, das einen ablaufenden Wasserfilm und dessen Auflösung in Rivulets (Wassersträhnen) auf Strukturen simuliert. Zielsetzung war es, die Validierung fortzusetzen oder in Anlagenszenarien zu testen. Experimente sind z. B. in der chinesischen WAFT-Anlage (Water Film Test Facility) durchgeführt worden.

In fortschrittlichen Reaktorsystemen kommen darüber hinaus verstärkt auch passive Systeme zur Nachwärmeabfuhr aus dem Reaktorkühlkreislauf und zum Druckabbau im Containment zur Anwendung, wobei an den Reaktorkühlkreislauf angeschlossene Wärmetauscher große Wasserpools im oder außerhalb des Containments als Wärmesenke nutzen. Des Weiteren werden z. B. bei fortschrittlichen Reaktoren russischer Bauart vom Typ WWER passiv arbeitende Systeme zur Wärmeabfuhr im Containment eingesetzt. In Reaktorkonzepten wie z. B. dem KERENA™ sind Gebäudekondensatoren (GEKO) vorgesehen, an denen die im Verlauf von Stör- und Unfällen ins Containment freigesetzte Dampfmassenströme kondensieren und die hierbei freiwerdende Wärme an das Absetz-becken abführen. Je nach Szenario und Störfallablauf unterscheiden sich die Randbedingungen, z. B. die Konzentration der nicht kondensierbaren Gase, und beeinflussen so den Wärmeübergang an der Primärseite des GEKO und letztlich dessen Wirksamkeit. Die Grenzen bezüglich ihrer Fähigkeit, die erforderlichen Wärmelasten auch unter denkbar ungünstigen Situationen abzutragen, müssen nachgewiesen werden.

Im Verbundvorhaben EASY /BUC 18a/ wurden von der GRS neuere Modelle in COCOSYS und ATHLET sowie eine spezielle iterative Codekopplung für die Simulation unterschiedlicher passiver Wärmetauscher genutzt und dazu Versuche aus der INKA-Anlage nachgerechnet /BUC 18b/. Die erzielten Ergebnisse sind noch nicht in jedem Fall zufriedenstellend; die Validierung von AC² wurde unter Nutzung einer anderen Codekopplung fortgesetzt.

AP 3: Qualifizierung von AC²/COCOSYS durch beispielhafte Anlagenrechnungen repräsentativer Stör- oder Unfallabläufe für DWR (s. Kap. 4, S. 293 ff.)

Eine weitere Zielsetzung betraf neben der gezielten Validierung neuer oder erweiterter Modelle in COCOSYS auch die Qualifizierung des gesamten Programmsystems AC²

anhand der Nachrechnung von kompletten Anlagenszenarien für DWR. Besonderes Augenmerk lag dabei auf der Komplexität der miteinander wechselwirkenden Prozesse und Phänomene von Primärkreis und Containment einerseits aber insbesondere auch der Aerosol- und Spaltproduktvorgänge im Containment selbst, die einer detaillierten Analyse und Auswertung unterzogen werden sollten.

AP 4: Querschnittsaktivitäten – Begleitung nationaler und internationaler experimenteller Projekte und Koordination AC²/COCOSYS-Anwendergruppe und Support (s. Kap. 5, S. 305 ff.)

Durch vom BMUV geförderte Vorhaben wird sowohl eine kontinuierliche Begleitung Deutschlands an experimentellen Forschungsvorhaben der OECD/NEA sichergestellt (z. B. THAI, THEMIS, ESTER u. a.), als auch eine Förderung nationaler Programme (THAI national, PKL) vorgenommen. Dies erfolgt in vielen Fällen durch die GRS und im Rahmen ihrer Forschungsvorhaben zur Codeentwicklung und Codevalidierung. Zielsetzung war die Fortführung der Beteiligung an nationalen und internationalen Aktivitäten, insbesondere durch die Begleitung laufender oder in Planung befindlicher experimenteller Programme wie THAI national oder dem Nachfolger von OECD/NEA THEMIS. Darüber hinaus war eine Mitarbeit in fachlich relevanten Arbeitsgruppen der OECD/CSNI oder der IAEA vorgesehen. Durch die enge Verzahnung der Arbeiten bei der GRS mit entsprechenden Projekten sind die Einbindung Deutschlands in die internationale Forschungsgemeinschaft und ein steter Wissenstransfer und Kompetenzerhalt gewährleistet.

Komplementär zur internen Validierung in der GRS findet auch eine externe Validierung durch Partner (z. B. Ruhr-Universität Bochum, Arbeitsgruppe Plant Simulation and Safety) statt. Diese sollte wieder stärker systematisiert werden. Dies beinhaltete die Abstimmung bei der Auswahl der Versuche für eine externe Validierung von COCOSYS wie auch Diskussionen und Beratung bei der Durchführung der Analysen und der abschließenden Bewertung der Ergebnisse. Der Rückfluss aus diesen Arbeiten liefert wertvolle Beiträge für die Programmentwicklung und -validierung. Zur Unterstützung der Anwender war ferner auch die Organisation von regelmäßigen AC²-Workshops zum direkten Austausch der Anwender untereinander sowie zur Diskussion mit den Codeentwicklern in der GRS vorgesehen.

1.2 Stand des Wissens / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens

Das Programm COCOSYS ist in mehrere Module aufgeteilt (Abb. 1.1); THY für die Thermohydraulik, AFP bzw. NewAFP, zukünftig AFP2, für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten und CCI für die Beton-Schmelze-Wechselwirkung. Zielsetzung in COCOSYS ist, im Containment die Einzelphänomene sowie deren Wechselwirkung für Betriebszustände und bei Stör- und Unfällen möglichst detailliert (d. h. auf Basis mechanistischer Modelle) abzubilden.

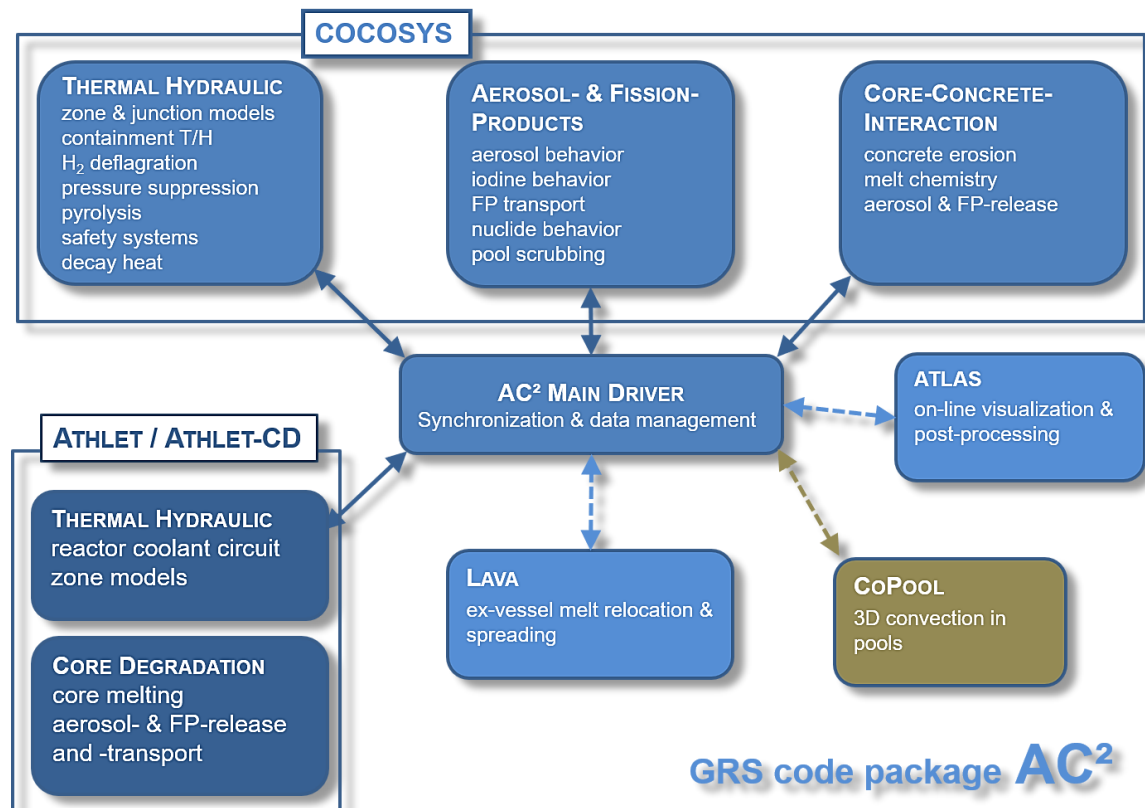


Abb. 1.1 Struktur des Programmsystems AC²

Durch die Ankopplung weiterer Rechenprogramme wird die Möglichkeit geschaffen, gezielt Einzelphänomene und Prozesse zu simulieren. Dazu zählt z. B. der beim Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM, Kaiserslautern) entwickelte Rechencode CoPool /KLE 17/ zur dreidimensionalen, einphasigen Simulation von Konvektionsvorgängen und der Temperaturverteilung in einer Wasservorlage oder auch der GRS-Code LAVA /SPE 01/, der die Schmelzeausbreitung in Räumen berechnet und für die Simulation der Ausbreitungsvorgänge beim EPR™ entwickelt wurde. Er fand zuletzt auch Anwendung bei Analysen für russische Reaktoren vom Typ WWER und wurde in einzelnen Punkten verbessert.

Schwerpunkte der Validierung im Vorläufervorhaben RS1544 /REI 19a/ orientierten sich an der aktuellen Codeentwicklung mit quelltermrelevanten Schwerpunkten bezüglich Aerosol- und Iodverhalten sowie der Modellierung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und thermohydraulischer Phänomene, z. B. Leichtgasschichtungen oder Wasserstoffverbrennung. Weiterhin spielte die erweiterte THAI-Anlage /FRE 16/ mit zwei gekoppelten Behältern (THAI⁺) eine wesentliche Rolle.

Validierungsstand der COCOSYS-Module THY und AFP

Zu den Modulen **THY** und **AFP** (bzw. zukünftig **AFP2**) wurde in der überwiegenden Zahl der Fälle auf Experimente aus den THAI-Programmen, z. B. THAI-V /GUP 17/, THAI-VI /POS 18/, und OECD/NEA THAI-3 /GUP 20/, zurückgegriffen, z. B.:

- zur Untersuchung der Ausbreitung freigesetzter unfalltypischer Dampf-Leichtgas-Gemische, des Schichtungsaufbaus und seiner Wiederauflösung,
- zur Untersuchung des Verhaltens eines Rekombinators (PAR) bei unterschiedlichen Anströmbedingungen insbesondere bei Gegenströmung,
- zur Untersuchung des Auswaschverhaltens von Iod aus der Containment-Atmosphäre durch Sprühen, des Abwaschens von Iod von Strukturen sowie des Einflusses des Sprühens mit kontaminiertem (iodhaltigem) Wasser im Rezirkulationsbetrieb,
- zur Untersuchung des Abwaschens von nicht löslichen Aerosolen von horizontalen und vertikalen Strukturen, oder
- zu H₂-Verbrennung in einer Raumkette in turbulenter, vorgemischter Atmosphäre in THAI⁺,

und auf solche aus OECD/NEA STEM-2 und BIP-3, z. B.:

- zu radiolytischen Reaktionen zwischen I₂ und Farbe auf Strukturoberflächen, hinsichtlich neuer Erkenntnisse z. B. der Anteile von physisorbiertem¹ oder

¹ Die Physisorption bezeichnet den Vorgang der physikalischen Adsorption, d. h. die Anreicherung von Stoffen aus Gasen oder Flüssigkeiten an der Oberfläche eines Festkörpers, bei der ein adsorbiertes Molekül durch physikalische Kräfte auf einem Substrat gebunden wird.

chemisorbiertem² Iod auf der Farbe oder des Einflusses der Dampfdichte (Wasser) auf die Chemisorption, und

- zur Untersuchung des I₂-Massentransfer aus einem siedenden Sumpf.

Analysen zur Auslegung von Versuchen an der THAI⁺-Anlage (Abb. 1.2) im nationalen Vorhaben THAI-VI als auch die Begleitung des Vorhabens OECD/NEA THAI-3 durch Voraus- oder Nachrechnung verschiedener Versuche waren Schwerpunkte der Validierung im abgeschlossenen Vorhaben RS1544 /REI 19a/.

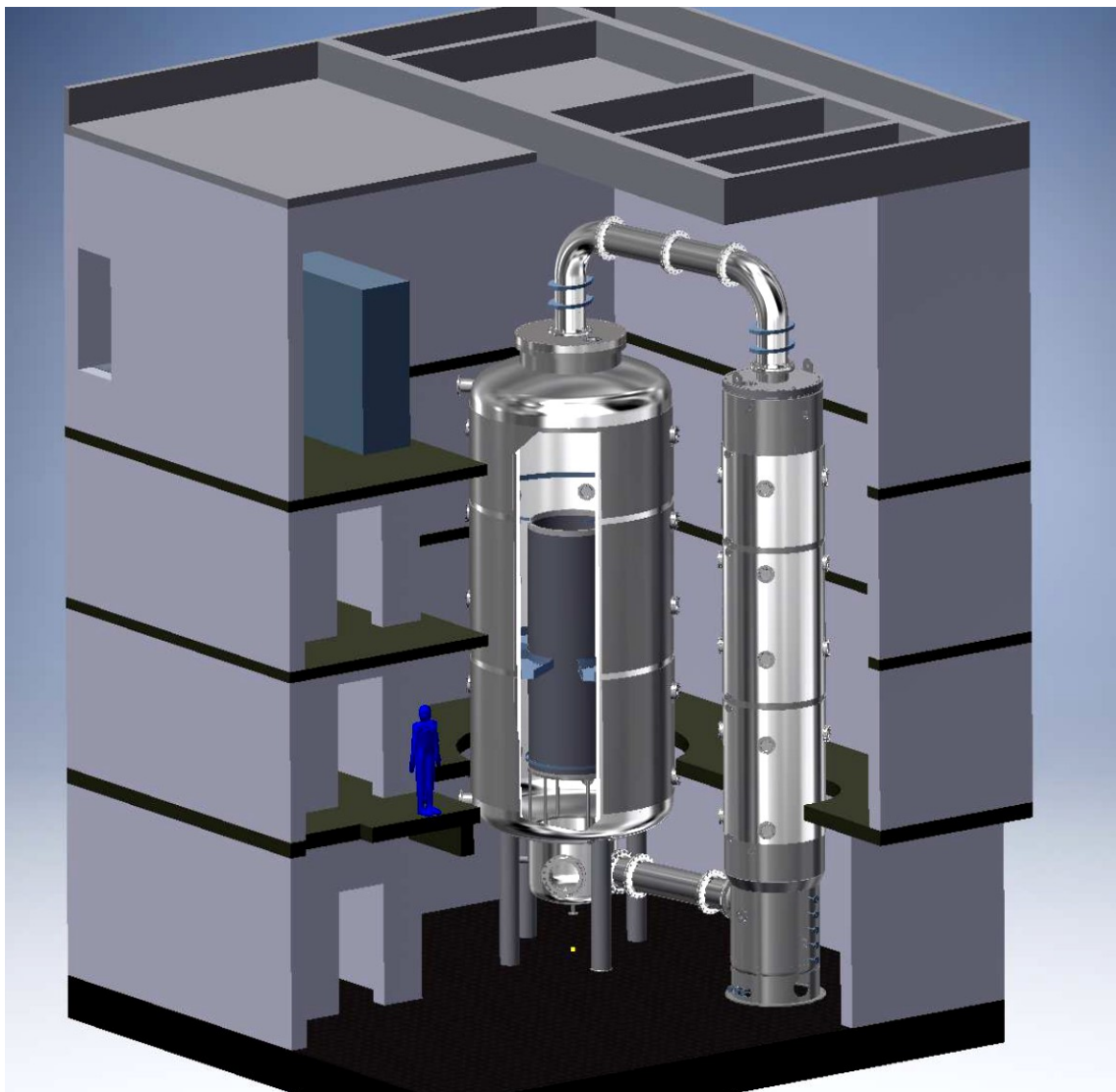


Abb. 1.2 THAI⁺-Anlage /GUP 19/

² Als Chemisorption wird der Prozess bezeichnet, bei dem sich das Molekül beim Auftreffen auf die Oberfläche chemisch verändert.

Die Arbeiten umfassten u. a. folgende Themen:

- Die Modellierung der Iodchemie ist charakterisiert durch eine Vielzahl miteinander wechselwirkender und rückkoppelnder Prozesse und Einzelphänomene. Durch neue Erkenntnisse und die historisch gewachsene Entwicklung war eine umfangreiche Neustrukturierung unumgänglich. Die Arbeiten sind weit vorangeschritten, müssen aber zunächst für nahezu jedes von AFP zu NewAFP transferierte Modell/Phänomen eingehend bewertet werden. Hierzu werden Einzeleffektexperimente zur Validierung herangezogen, ehe komplette Szenarien an ausgewählten Experimenten (z. B. Phebus-Versuchsreihe, THAI-Experimente) nachgerechnet werden können. Schon bei den Einzeleffektexperimenten lassen sich die Phänomene nicht komplett voneinander trennen, so dass bereits in diesem Stadium Wechselwirkungen zu berücksichtigen sind. Im Rahmen dieser Aktivitäten sind eine Vielzahl von Experimenten aus der Iod-Versuchsreihe in der THAI-Anlage nachgerechnet worden. Gemäß dem Erkenntnisgewinn der letzten Jahre im Rahmen von nationalen und internationalen Forschungsaktivitäten wurden auch schon neuere Experimente aus OECD/NEA THAI bzw. den nationalen THAI-V- und THAI-VI-Projekten begleitet. Themengebiete betrafen hier Analysen der Modellbasis zur Resuspension von Iod durch eine H_2 -Deflagration (THAI Iod-32), zur Wechselwirkung von Sprühen mit im Sprühwasser gelöstem Iod oder auch die inhomogene Ausbreitung in Raumketten.
- Weitere Arbeiten betrafen die begleitende Validierung/Qualifizierung einzelner Modelle des THY-Moduls. Hier sind das Modell zum Wärmeübergang zwischen Atmosphäre und Wand (CO1-Modell) sowie das Modell zum Auffüllen von Zonen (ATM_FULL-Option) zu nennen. Ersteres behandelt die jetzt konsistente Einbindung von Korrelationen zum Wärmeübergang auch unter kondensierenden Bedingungen und wurde z. B. am Versuch THAI TH-27 validiert. Letzteres die neu geschaffene Möglichkeit, z. B. große Wasserpools durch eine Vielzahl von einzelnen COCOSYS-Zonen abzubilden und komplett zu füllen. Dies wurde sowohl an einem Einzeleffekt-Experiment (GES-Wanne /REI 19a/) validiert als auch im Rahmen einer Anlagenrechnung überprüft. Beide Modelle haben einen zufriedenstellenden Zustand, müssen aber in zukünftigen Analysen unter anderen Randbedingungen weiter überprüft werden.
- Das Verhalten von Rekombinatoren (PAR) unter unterschiedlichen Strömungsbedingungen und bei H_2 -Rekombination mit geringen Sauerstoffkonzentrationen wurde untersucht. Hier wurde der Versuch THAI HR-49, der im Rahmen von OECD/NEA THAI-3 durchgeführt worden ist, zunächst blind gerechnet und später durch eine

offene Analyse ergänzt. Bereits die blinde Rechnung zeigte nach Offenlegung der experimentellen Daten eine sehr gute Übereinstimmung des H_2 -Abbaus. Der Einfluss von CO aus der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und die Rekombination zu CO_2 sind dagegen noch nicht hinreichend untersucht; eine diesbezügliche Analyse des Modells ist deshalb angeraten.

- Ein weiterer Themenpunkt ist die Ausbreitung freigesetzter unfalltypischer Dampf-Leichtgas-Gemische und evtl. Schichtungsverhalten. Hier wurden verschiedene Experimente in der erweiterten THAI⁺-Anlage gerechnet. Für THAI⁺ wurde die THAI-Anlage, bisher bestehend aus einem Behälter (THAI Test Vessel – TTV), um einen zweiten Behälter (Parallel Attachable Drum – PAD) erweitert, so dass auch komplexe Strömungsverhältnisse (sog. Mehrraumtests) und Randbedingungen eingestellt werden können.
- Die größte Herausforderung bestand in der blinden Vorausrechnung des Tests THAI TH-27 im Rahmen eines internationalen Benchmarks. Auch hier zeigte sich die gute Prognosefähigkeit von COCOSYS. Die charakteristische Ausbildung einer Schichtung konnte bereits in dieser Phase gut vorausgesagt werden. Eine weitere Verbesserung konnte nach Offenlegung der experimentellen Daten aus der Erkenntnis erzielt werden, dass die wahren Strömungsverhältnisse im horizontalen Verbindungsrohr am oberen Ende der Behälter nicht genau genug wiedergegeben werden konnten. So bildete sich zeitweise eine Schichtenströmung aus, so dass sowohl Gas vom PAD in den TTV als auch umgekehrt strömen konnte. Dieses Phänomen tritt typischerweise in Rohrströmungen auf und fällt damit nicht in den klassischen Anwendungsbereich von COCOSYS für große Raumbereiche im Containment. Trotzdem wurde als Ergebnis dieser Erkenntnis ein entsprechender Modellansatz in COCOSYS implementiert, der den mit den gegenläufigen Strömungen auftretende Impulsverlust näherungsweise berücksichtigen kann. Mangels verfügbarer experimenteller Daten konnte das Modell bisher noch nicht validiert werden.
- Die Validierung des H_2 -Verbrennungsmodells für verschiedene Randbedingungen u. a. in Kombination mit Sprühen oder in Überlagerung mit einer umlaufenden Grundströmung durch die THAI⁺-Behälter war ein weiterer Themenpunkt. Die realistische Simulation der Verbrennung von Wasserstoff, speziell die Ausbreitung/Geschwindigkeit der Flammenfront, ist maßgeblich auch durch die Turbulenz in der Atmosphäre beeinflusst. Weitere Faktoren sind die örtlichen Verhältnisse (Blenden, Umlenkungen), die Atmosphärenzusammensetzung und die Ausbreitungsrichtung der Flamme (nach oben, unten oder seitlich). Die realistische Berechnung der Turbulenz kann mit

einem Lumped-Parameter (LP)-Programm wie COCOSYS nicht mit mechanistischen Ansätzen, wie es z. B. bei CFD-Programmen möglich ist, realisiert werden. Vereinfachende Korrelationen für die Turbulenz erlaubten in der Vergangenheit, integral betrachtet, eine gute Übereinstimmung mit Experimenten. Im Rahmen des Experiments THAI HD-44 wurde der Einfluss einer bereits bei Verbrennungsbeginn bestehenden umlaufenden Strömung durch die THAI⁺-Anlage auf den Verbrennungsprozess untersucht. Dazu wurde ein Gebläse in einem Behälter installiert. Die zunächst blinden Rechnungen zeigten teilweise größere Abweichungen zum Experiment. Nachträgliche Analysen wiesen auf einen maßgeblichen Einfluss der Modellierung des Lüfters hin. Das in COCOSYS verfügbare Modell, das die typischen Bedingungen z. B. der Umluftsysteme im Sicherheitsbehälter berücksichtigen soll, kann den sehr speziellen Gegebenheiten in der THAI-Anlage aber nur beschränkt Rechnung tragen. Durch eine speziell angepasste Nodalisierung konnte auch hier eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt werden. Weitere Untersuchungen sind insbesondere auch im Rahmen von Anlagenrechnungen angeraten. Die in den korrelativen Ansätzen verwendeten Parameter sind noch mit Unsicherheiten behaftet.

- Der Wissensstand zum Abfließen von Wasser an vertikalen oder geneigten Strukturen ist durch Experimente vertieft worden. Dies beinhaltet auch die damit einhergehenden Phänomene im Zusammenhang mit dem Abwaschen von abgelagerten Aerosolen. In der THAI-Anlage wurden entsprechende Experimente (AW-Serie) durchgeführt und mit COCOSYS nachgerechnet und analysiert. Dabei waren die Entstehung und Ausbildung von Rinnsalen als wichtige Einflussgröße identifiziert worden. Nur unter bestimmten Bedingungen kann sich aus einem Rinnsal ein flächendeckender Wasserfilm ausbilden. Für die realistische Simulation des Abwaschens ist dafür eine verlässliche Prognose des Bedeckungsgrades einer Struktur durch den Wasserfilm wichtig. Die Entstehung und Ausbildung eines Rinnsals werden zukünftig durch ein Rivulet-Modell beschrieben werden. Bei KIT wurde für die Simulation der Containment-Außenkühlung bereits ein derartiges Modell entwickelt und in COCOSYS implementiert. Es ist aktuell für den Einsatz bei Wandkondensationsbedingungen erweitert worden und soll zukünftig in COCOSYS verfügbar gemacht werden.

Validierungsstand des CCI-Moduls

Mit dem CCI-Modul in COCOSYS kann eine realistische (sog. best-estimate) Simulation der wichtigsten physikalischen und chemischen Phänomene während der Beton-

Schmelze-Wechselwirkung (engl. Molten Corium Concrete Interaction – MCCI) in der Reaktorgrube nach RDB-Versagen durchgeführt werden. Die Wechselwirkung von Kernschmelze mit den Betonstrukturen im Containment war und ist Gegenstand intensiver internationaler Forschungs- und Entwicklungsprogramme, inklusive experimenteller und analytischer Untersuchungen. Für die Bewertung der Modellierung der Schmelze-Beton-Wechselwirkungen ist erstmalig eine Unsicherheitsanalyse durchgeführt worden, die durch eine zusätzliche Sensitivitätsanalyse ergänzt wurde, um diejenigen unsicheren Eingabeparameter zu identifizieren, die den größten Beitrag zur Unsicherheit der Code-Rechenergebnisse liefern. Diese Analyse wurde in zwei Arbeitsschritten für zwei verschiedene 2D-MCCI-Experimente (OECD/NEA CCI-3, MOCKA5.7) durchgeführt: Basierend auf den Sensitivitätsanalysen wurde festgestellt, dass insbesondere 5 unsichere Eingabeparameter einen dominanten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten COCOSYS/CCI-Rechenergebnisse haben. Die Betonzerstörungstemperatur und -enthalpie sowie die Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze (Betonwände und Schmelzeoberfläche) liefern dabei den größten Beitrag zur Unsicherheit der ausgewählten Ergebnisgrößen. Die hier durchgeführten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen stellen eine wichtige Grundlage für weitere Entwicklungsschritte dar. Dies ist aber von der Verfügbarkeit zusätzlicher experimenteller Daten abhängig.

Auch für die Simulation der Rückhaltung der Kernschmelze durch Kernfänger sind bereits Modelle in COCOSYS vorhanden und validiert, z. B. für die Ausbreitung der Schmelze beim Europäischen Druckwasserreaktor (EPR™) mit dem GRS Modell LAVA. Zielsetzung ist es, Erweiterungen bzgl. der Berechnung der Beton-Schmelze-Wechselwirkung in mehreren Reaktorgruben oder bei einer Überdeckung der Schmelze mit Wasser im Modul CCI als auch in LAVA zu validieren. Neben Versuchen aus bisherigen Projekten wie OECD/NEA CCI oder MOCKA wird auch eine Verwertung der Versuchsergebnisse aus dem geplanten OECD/NEA-Project ROSAU (Reduction of Severe Accident Uncertainties) angestrebt. Dort sollen Phänomene bei einem Schmelzeaustrag aus dem Reaktor ins Containment bei Wasserüberdeckung der Schmelze (Schmelzeausbreitung, MCCI) untersucht werden. Arbeiten zur Freisetzung von Spaltprodukten aus der Schmelze zeigen noch größere Lücken im Wissensstand der dabei wirkenden Mechanismen. Das in COCOSYS/CCI verfügbare Modell ist deshalb mit Unsicherheiten behaftet und bedarf weiterer Forschung zur Verbesserung und Absicherung der Modellierung.

Validierungsstand Anlagenrechnungen und fortschrittliche Anlagenkonzepte

Hinsichtlich der Übertragung der an Einzeleffektexperimenten validierten Modelle auf Reaktorbedingungen hat COCOSYS für laufende deutsche und europäische Anlagentypen (z. B. DWR KONVOI, SWR, WWER) mittlerweile einen sehr guten Anwendungsstand erreicht /KLE 16/, /REI 19a/. Darüber hinaus hat die Beteiligung Deutschlands am Vorhaben OECD/NEA BSAF (Benchmark Study of the Accident at the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station) mit gekoppelten ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen für SWR (baugleiche Blöcke 2 und 3) wichtige Hinweise bezüglich der Anwendbarkeit von AC² und noch erforderlicher Modellverbesserungen oder -korrekturen erbracht /SON 20/, /BAN 18/.

Weitere Analysen konzentrierten sich insbesondere auf die gezielte Bewertung der Rechenkette bei Anwendung des detaillierten mechanistischen Modells CoPool /FRA 21a/ zur dreidimensionalen, einphasigen Simulation von Konvektionsvorgängen und der Temperaturverteilung in einer Wasservorlage. Hierzu wurden unterschiedliche Anwendungsfälle betrachtet, ausgehend von der Analyse von Experimenten bis zu Anlagenrechnungen für DWR und SWR. Die Ergebnisse der gekoppelten COCOSYS-CoPool-Rechnungen zeigen die korrekte Implementierung der numerischen Kopplung sowie die vielfältigen Einsatzmöglichkeiten von CoPool auf. Die Grenzen des mathematisch-physikalischen Modells in CoPool und die abdeckbaren Anwendungsfälle sind aber noch nicht hinreichend abgesichert.

Bei Neubauten von KKW im Ausland wird sich aufgrund der Weiterentwicklung der Sicherheitskonzepte – hier speziell der Nutzung passiver Sicherheitssysteme – das Stör- und Unfallverhalten wesentlich von dem der derzeit betriebenen Reaktoren unterscheiden. Generell wird dem Einsatz passiver Systeme ein großes Potential zugesprochen. Die Funktionsweise von passiven Systemen beruht auf physikalischen Gesetzmäßigkeiten wie z. B. Gravitation, (Natur-)Konvektion, Kondensation oder Verdampfung, also Vorgängen, wie sie prinzipiell mit AC² abgebildet werden können. Eine Zusammenstellung der Phänomene und Wirkprinzipien passiver Systeme findet sich auch in /IAEA 09/. Solche als evolutionär bezeichnete fortschrittliche Reaktorkonzepte der Generation III/III+ und IV und auch das Aufkommen von kleinen modularen Reaktoren (engl. Small Modular Reactor – SMR) stellen an Rechenprogramme zur Simulation von Betriebszuständen, Transienten, Stör- und Unfällen in Kernkraftwerken neue Anforderungen. Das Containment ist nicht mehr nur die letzte Barriere zum Aktivitätseinschluss bei Unfällen, vielmehr ist es ein wichtiges Glied der passiven Wärmeabfuhrkette. Das erfordert neben der grundsätzlichen Möglichkeit der modellmäßigen Erfassung damit verbundener

Phänomene (Sieden, Kondensation, 2-Phasen-Strömung) und passiver Komponenten (z. B. komplexe Wärmetauscher) auch die Erweiterung und Verbesserung hinsichtlich einer engeren Kopplung zwischen den Simulationsprogrammen für Kühlkreislauf und Containment. Das Programmsystem AC² vereint zu diesem Zweck die erprobten Programme ATHLET/ATHLET-CD und COCOSYS. Diese werden kontinuierlich für ihre Anwendung auf neuartige Reaktorkonzepte und Anwendungsbereiche erweitert und für diese validiert. Somit ist es möglich, mit nur einem Programmsystem das gesamte Störfallspektrum für Anlagen der Generation III/III+ einschließlich leichtwassergekühlter SMR zu simulieren.

Die Anwendung von ATHLET und COCOSYS auf passive Systeme zur Wärmeabfuhr mittels Wärmetauscher wurde bereits im Rahmen des 4. Forschungsprogrammes der EU am Beispiel von Versuchen an der NOKO-Anlage im Forschungszentrum Jülich (FZJ) oder der PANDA-Anlage beim Paul Scherrer Institut (PSI) begonnen /HIC 00/. Im Verbundvorhaben EASY /BUC 18b/ wurde das Programmsystem AC² an neuen Einzeleffekt- und Integraltests an der INKA-Anlage bei Framatome in Karlstein erprobt. Die erzielten Ergebnisse sind insbesondere für die durchgeführten vier integralen Versuche, bei denen Not- und Gebäudekondensator als Wärmetauscher gemeinsam zum Einsatz kamen, und bei denen maßgebliche Bereiche der Anlage mit dem Not- und Gebäudekondensator ausschließlich mit ATHLET bzw. seiner Erweiterung ATHLET-3D simuliert wurden, noch nicht zufriedenstellend. Die Wärmeübertragung insbesondere am Gebäudekondensator wurde im Allgemeinen unterschätzt und die Stabilität und Robustheit der speziellen Codekopplung waren nicht gegeben. Bezüglich der Codekopplung von ATHLET-CD/COCOSYS werden alternative Lösungsvorschläge zur Simulation von Wärmetauschern diskutiert.

Die Rohrbündel des Gebäudekondensators wurden mit den in COCOSYS verfügbaren Standardmodellen aus Zonen und Strukturen abgebildet. Analysen zeigen die Anwendbarkeit von COCOSYS auch für solche Geometrien, eine detaillierte Auflösung der thermohydraulischen Randbedingungen, die die Wirksamkeit maßgeblich beeinflussen, ist aber auch damit nicht in befriedigendem Maße gegeben /FET 98/.

Als eine weitere Möglichkeit verfügt COCOSYS über ein spezielles Gebäudekondensatormodul COMO (**CO**ndensor **MO**dule) /BRO 13/. In diesem wird der gesamte Gebäudekondensator an eine COCOSYS-Zone angebunden und es ist fraglich, wie die sich bei Unfällen um die Gebäudekondensatorbündel einstellenden Phänomene berechnet werden können. Die Anwendung zeigt ebenfalls noch Schwächen. COMO ist bei der RWTH Aachen weiterentwickelt worden /ALL 17/. Die Arbeiten zur Qualifizierung des

COMO-Modells insbesondere für senkrechte Rohrbündel sind noch nicht abgeschlossen.

2 Validierung von AC²/COCOSYS

2.1 Validierung von Einzelmodellen und Begleitung von Experimenten

Dieses Kapitel befasst sich mit der kontinuierlich fortgeführten Validierung anhand der Begleitung und Analyse von Experimenten, die einerseits zur erstmaligen Bewertung von neuen Modellen in COCOSYS, andererseits auch zur Neubewertung verbesserter Modelle herangezogen werden. Dies betrifft die gesamte Bandbreite von Phänomenen aus den Themengebieten Thermohydraulik, Spaltprodukt- und Aerosolverhalten sowie Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Die folgenden Unterkapitel gehen gezielt auf die Experimente und die begleitenden analytischen Arbeiten ein. Dabei werden neben dem Untersuchungsgegenstand eine kurze Beschreibung des Experiments gegeben und die mit COCOSYS erzielten Rechenergebnisse mit den entsprechenden experimentellen Daten, soweit innerhalb der Laufzeit des Vorhabens verfügbar, verglichen und bewertet. Soweit möglich, fasst ein kurzes Fazit das jeweilige Unterkapitel zusammen. Einige experimentelle Daten z. B. im Rahmen von OECD/NEA-Programmen sind noch nicht öffentlich zugänglich, die Vergleiche werden dann nur qualitativ dargestellt.

2.1.1 THAI TH-29 zur kritischen Wasserstoffanreicherung in Containmentbereichen von DWR

Im Verlauf eines Kühlmittelverluststörfalls kommt es zu Dampffreisetzungen unterschiedlicher Intensität aus dem Primärkreislauf in die Bereiche des Sicherheitsbehälters. Bei zusätzlichem Ausfall von Sicherheitssystemen kann im weiteren Verlauf die Freisetzung eines Wasserstoff-Dampf-Gemisches während der dann einsetzenden Kernzerstörung erfolgen. Frühere Untersuchungen der GRS, in denen typische Unfallszenarien von Druckwasserreaktoren (DWR) des deutschen Typs KONVOI mit passiven autokatalytischen Rekombinatoren (PAR) analysiert wurden, zeigten symptomatisch unterschiedliche Zustände in den Anlagen- und Betriebsräumen sowie im Kuppelbereich.

Die Räume innerhalb des SHB können in vier Bereiche unterteilt werden, in denen jeweils ein unterschiedliches Verhalten der Thermohydraulik und von Radionukliden (Iod, Aerosole) im Verlauf von Stör- und Unfällen auftreten kann (Abb. 2.1); das sind:

- Große Anlagenräume (engl. Equipment Compartments, mittelblau in Abb. 2.1), in denen sich der Reaktordruckbehälter und die Dampferzeuger befinden, und kleine

Anlagenräume und Treppenhäuser (hellblau in Abb. 2.1) innerhalb des Trümmerschutzzylinders,

- Betriebsräume / Dom (engl. Operating Rooms, grün in Abb. 2.1) im oberen Bereich des SHB,
- Peripherie (engl. Periphery, gelb in Abb. 2.1) des SHB, zwischen Trümmerschutzzylinder (engl. Missile Protection Cylinder) und SHB-Stahlschale.

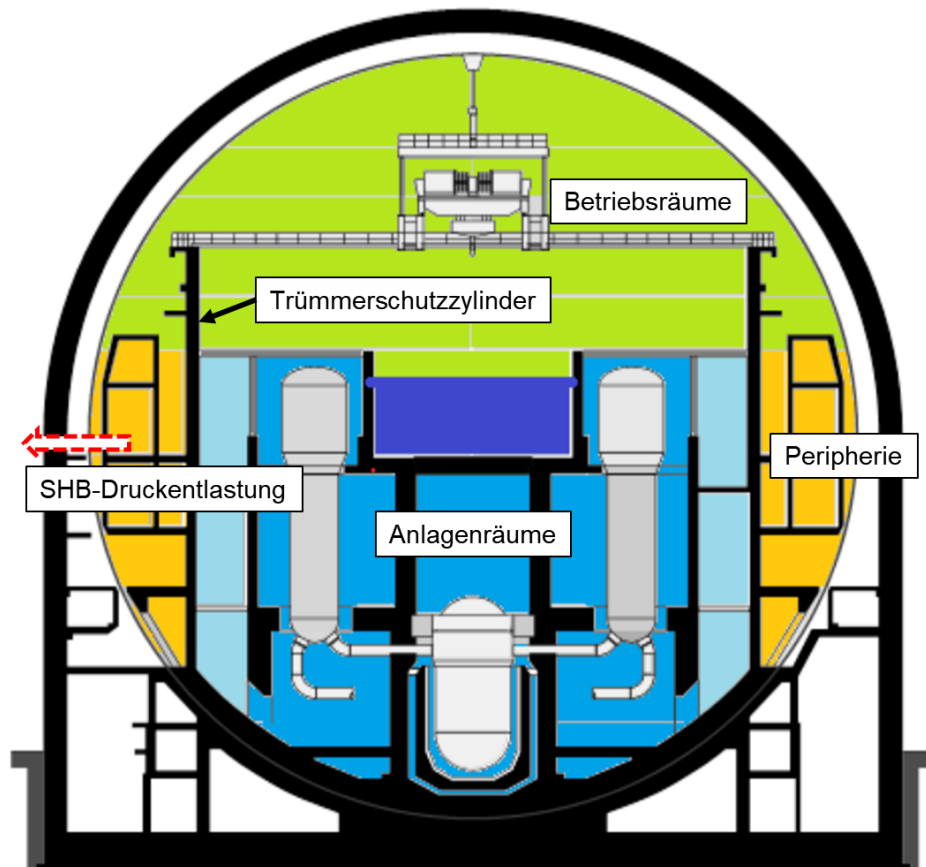


Abb. 2.1 Schnitt durch ein Volldruckcontainment eines KONVOI DWR /BAK 18a/

Für lang andauernde Unfallszenarien zeigten einige Berechnungen eine Anreicherung von Wasserstoff in unteren Raumbereichen (sog. Peripherie) außerhalb des Trümmerschutzzylinders im Containment der Referenzanlage vom Typ KONVOI während der Spätphase eines Unfalls /BAK 18a/.

Im Rahmen der Analysen von Integralversuchen zu DWR-Kernschmelzszenarien sind Rechnungen zum Versuch THAI TH-29 in der THAI-Anlage bei Becker Technologies GmbH durchgeführt worden. Dabei wurde die inverse Schichtung von Leichtgasen (Helium als Ersatz für Wasserstoff) durch Aufkonzentration im Ringraum infolge

Dampfkondensation untersucht. Insgesamt wurde eine Versuchsserie mit 3 Versuchen durchgeführt und analysiert. Die Arbeiten zur Versuchsserie TH-29 bestätigen die schon im Rahmen der Auslegungsrechnung erzielten Ergebnisse und die Prognosefähigkeit von COCOSYS. Durch eine adäquate Anpassung der jeweiligen Randbedingungen (geometrisch, thermohydraulisch) lassen sich die Experimente gut nachrechnen. Da die THAI-Anlage in diesem und weiteren Kapiteln noch Gegenstand der Nachrechnung von unterschiedlichen Experimenten ist, wird nachfolgend eine kurze Einführung in die Anlage gegeben.

2.1.1.1 THAI-Anlage

In der THAI-Anlage wurden und werden umfangreiche experimentelle Untersuchungen zur Sicherheit des Sicherheitsbehälters in einer Versuchsanlage für Thermohydraulik, Wasserstoff, Aerosole und Iod durchgeführt /GUP 17/. Sie kann als Ein-Behälter- (THAI Test Vessel, TTV, 60 m³) oder Zwei-Behälter-Konfiguration (THAI⁺: TTV + PAD) 80 m³ betrieben werden (vgl. Abb. 2.2).

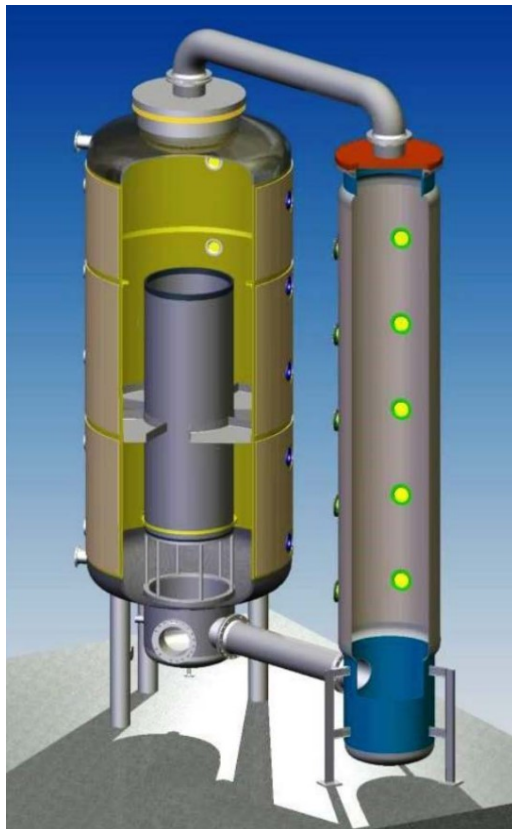


Abb. 2.2 THAI⁺-Anlage mit THAI Test Vessel (TTV) links und Parallel Attachable Drum (PAD) rechts /REI 19a/

Die experimentellen Untersuchungen umfassen die Leistungsprüfung verschiedener Sicherheits- und Minderungssysteme, d. h. Containment-Spray, passiver autokatalytischer Rekombinator (PAR), Druckunterdrückungsbecken (Wasserbecken), und die Auswirkungen ihres Betriebs auf das H₂-Risiko und das FP-Verhalten im Containment. Die experimentellen Ergebnisse lieferten ein besseres phänomenologisches Verständnis und eine breite Datenbasis für die Validierung und weitere Verbesserung von COCOSYS.

Die Anlage ermöglicht die Untersuchung von sicherheitsrelevanten Effekten (separat und/oder kombiniert) unter thermohydraulischen Bedingungen, die für Unfälle typisch sind. Thermohydraulische Szenarien können simuliert werden, von turbulenter Konvektion bis hin zu stagnierenden, geschichteten Containment-Atmosphären, und können mit Wasserstoff-, Iod- und Aerosolprozessen kombiniert werden. THAI ist mit innovativen Mess-, Probenahme- und Datenerfassungssystemen ausgestattet.

2.1.1.2 Testspezifische Randbedingungen bei TH-29

Bei dem Test THAI TH-29 kam nur der TTV-Behälter zum Einsatz. Er war in zwei Bereiche unterteilt (Abb. 2.3). Der innere Bereich (engl. inner compartment) bestand aus dem TTV-Sumpf, dem inneren Zylinder und zusätzlichen Strukturen. Die untere Zusatzkonstruktion verband den TTV-Sumpf mit dem Innenzylinder, die obere verlängerte den Innenzylinder und reduzierte dann den Durchmesser durch eine konische Haube, die an ein Rohr mit DN 150 Durchmesser angeschlossen war. Auf letzteres wurde ein noch dünneres Rohr entweder von DN 50 (ID 53 mm, $A = 22 \text{ cm}^2$) oder DN 80 (ID 83 mm, $A = 54 \text{ cm}^2$) aufgesetzt. Alle Verbindungen der Teile des inneren Bereichs wurden mit Dichtungstreifen aus Polytetrafluorethylen (PTFE) abgedichtet. Der innere Bereich war am oberen Ende in einer Höhe von $H = 8,17 \text{ m}$ mit dem Ringraum durch das bereits erwähnte Rohr DN 50 oder DN 80 und in einer Höhe von $H = 1,32 \text{ m}$ durch vier gleichmäßig am Umfang verteilte Rohre DN 20 verbunden. Die Querschnittsfläche des Rohres am oberen Ende wurde in Abhängigkeit von dem zu erwartenden Volumenstrom der in das Innenkompartiment eingeleiteten Gase gewählt, um einen Rückfluss innerhalb des Rohres zu vermeiden.

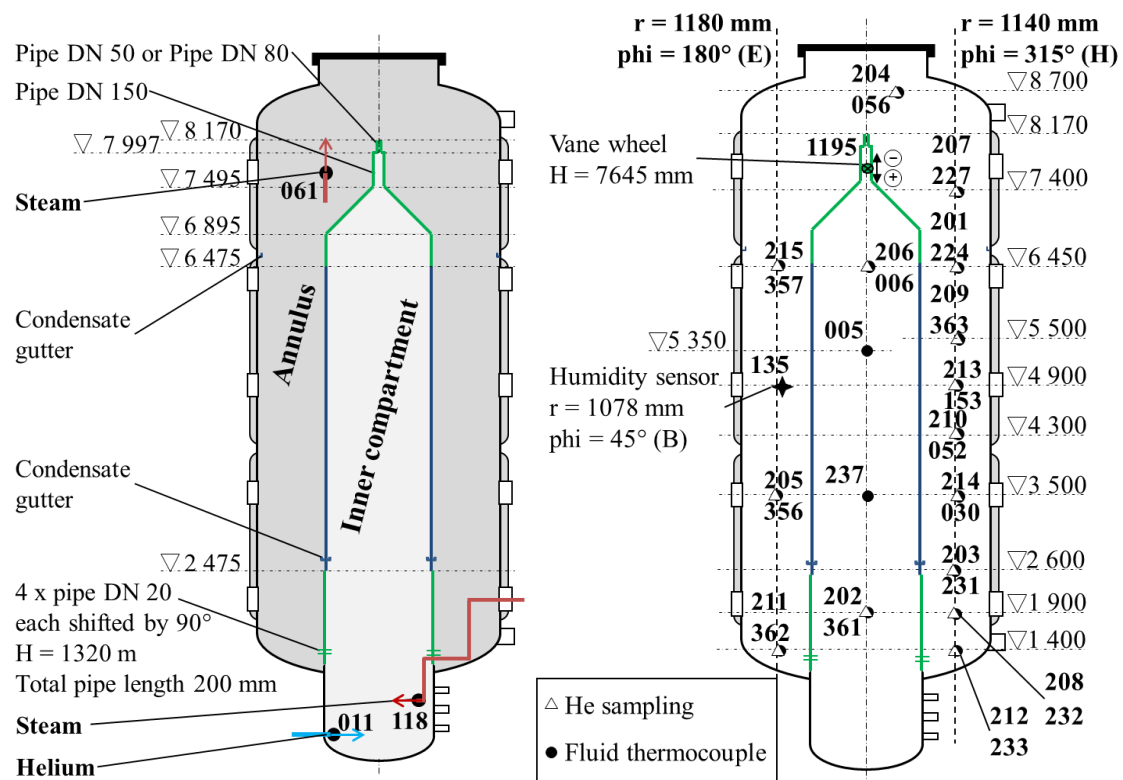


Abb. 2.3 THAI TH-29, Konfiguration des THAI-Behälters. Einbauten und Helium-/Dampfzufuhr (links). Probenahmestellen, Thermoelemente, Schaufelrad und Feuchtigkeitssensor (rechts) /SCH 23/

Im Ringraum (engl. Annulus, vgl. Abb. 2.3) wurde ein nach oben gerichtetes Rohr mit einem Innendurchmesser von 44,3 mm, installiert, dessen Öffnung sich in einer Höhe von $H = 7,7$ m befindet, mit einem Radius (Abstand von der vertikalen Behälterachse) von $r = 600$ mm und einem Polarwinkel (Draufsicht, gegen den Uhrzeigersinn) von $\phi = 90^\circ$ für die Injektion von Dampf (Position 061 in Abb. 2.3, links). Im Innenraum wurden zwei Injektionsrohre installiert, ein Rohr mit 12 mm Außendurchmesser (ID 9 mm), horizontal ausgerichtet auf $H = 0,3$ m, $r \approx 600$ mm, $\phi = 225^\circ$ für die Injektion von Helium und ein Rohr mit 44,3 mm Innendurchmesser, horizontal ausgerichtet auf $H = 7,50$ m, $r = 500$ mm, $\phi = 90^\circ$, für die Injektion von Dampf (Positionen 011 und 118 in Abb. 2.3, links)

Versuchsphasen

Für jeden Versuch der TH-29-Serie wurde der Behälter vor der Helium- und Dampfinspektion auf vordefinierte Temperaturen vorkonditioniert. Die elektrische Beheizung des oberen Behälterkopfes, des Tragrings und des oberen Flansches wurde auf eine Zieltemperatur von 130 °C eingestellt. Die elektrische Beheizung des unteren gewölbten Kopfes und des Sumpfes wurde auf 30 °C eingestellt, die Beheizung der Behältersäulen auf 35 °C. Die drei ölgefüllten Behältermäntel wurden anfangs mit einem nach unten gerichteten Ölstrom leicht beheizt und die Primäröltemperatur auf 31 °C eingestellt. Bei Erreichen der Zieltemperatur von ca. 30 °C in den vertikalen TTV-Wänden wurden die drei ölgefüllten Behältermäntel auf Kühlbetrieb umgeschaltet, um dem Wärmeübergang aus dem oberen Behälterteil entgegenzuwirken. Die Hauptversuchsphase aller drei Versuche begann mit dem Beginn der Helium- und Dampfeinspeisung in den Behälter (Zeitpunkt $t = 0$ h) mit einer vordefinierten Durchflussrate. Im Versuch TH-29.1 wurde die elektrische Beheizung des oberen Behälterkopfes, des Tragrings und des oberen Flansches bei $t = 0,225$ h abgeschaltet.

2.1.1.3 COCOSYS-Datensatz

Die COCOSYS-Nodalisierung des Versuchs TH-29 (vgl. Abb. 2.4) unterteilt das freie Volumen des THAI-Versuchsbehälters (TTV) in 50 Zonen. Zusätzlich werden Zonen definiert, die die Versuchshalle als Umgebung darstellen und 5 Zonen zur Simulation der Kondensatsammler außerhalb der Anlage. Die an den Helium-Konzentrationsmessungen entnommene Atmosphäre wird in eine zusätzliche Zone geleitet. In vertikaler Richtung ist das TTV in 14 Ebenen unterteilt. Jede Ebene ist in der Regel in 4 Abschnitte unterteilt: Die mit ".1" endenden Zonen (z. B. R4U.1 Abb. 2.4) stellen ein äußeres Kreissegment des THAI-Testbehälters mit einem Öffnungswinkel von 240° dar. Zonen, die mit ".2" enden, stellen ein entsprechendes Kreissegment mit einem Winkel von 120° dar. Dabei wird eine umlaufende Strömung zugelassen. Sie enthalten auch die Position der Dampfeinspeisung. Der innere Zylinder ist radial in zwei Abschnitte unterteilt, mit einem inneren Bereich (".4") und einem äußeren Abschnitt (".3"), der in Kontakt mit der inneren Zylinderwand steht. Durch diese Nodalisierung werden ein realistischeres Strömungsfeld und ein realistischerer Wärmeübergang erreicht. Der Sumpfbereich wird mit einer Zone modelliert. Alle Behälterstrukturen und ihre thermophysikalischen Eigenschaften werden entsprechend der Anlagenauslegung modelliert, einschließlich der Isolierung und der Randbedingungen für die Heiz-/Kühlmäntel. Letzteres erweist sich als eine Herausforderung, da COCOSYS insbesondere für die Analyse von Unfallszenarien in

Kraftwerken entwickelt wird und die verfügbaren Modelle nicht in jedem Fall für experimentelle Sonderlösungen geeignet sind. Andererseits ist die THAI-Anlage darauf ausgelegt, ein breites Spektrum spezifischer Phänomene, die bei solchen Unfällen auftreten, im Detail zu untersuchen und detaillierte Informationen für die Codeentwicklung und -validierung zu liefern. Daher ist es wichtig, genau definierte Randbedingungen festzulegen. Dies kann z. B. mit Hilfe der Kühlmäntel erreicht werden. Für COCOSYS besteht daher eine Herausforderung darin, die Energiebilanz über die Behälterwand einschließlich der Isolierung und der Kühlmäntel korrekt zu simulieren, ohne die Anlage bis ins kleinste Detail zu modellieren. Basierend auf den Erfahrungen, die bei der Berechnung mehrerer anderer THAI-Experimente gesammelt wurden, werden angemessene Vereinfachungen vorgenommen, um die realen Randbedingungen zu modellieren, ohne das betrachtete Experiment zu beeinflussen. Für TH-29 wurde die Nodalisierung so eingerichtet, dass die thermohydraulischen Bedingungen in der Anlage gut dargestellt werden, z. B. die atmosphärische Strömung im inneren Zylinder oder Kondensationsprozesse an Wänden und Strukturen.

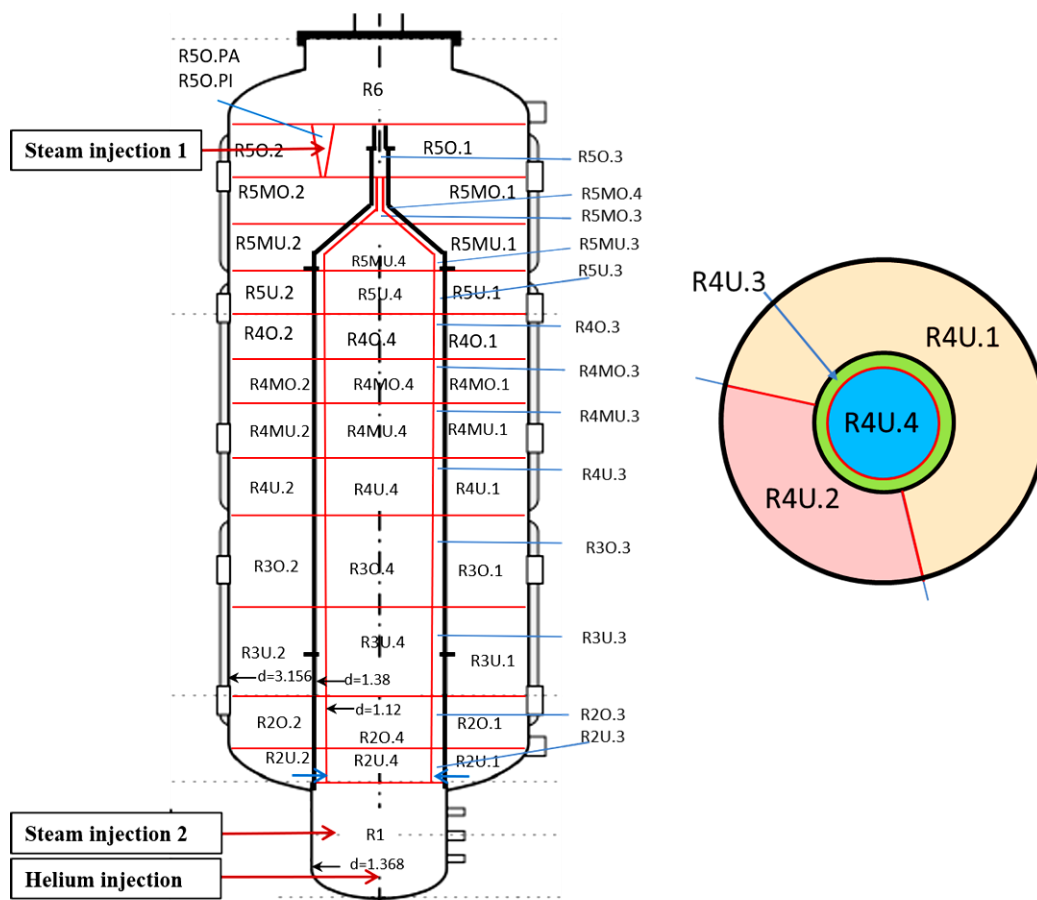


Abb. 2.4 THAI TH-29, COCOSYS Nodalisierung (vertikaler und horizontaler Schnitt)

2.1.1.4 Simulationsergebnisse

Alle drei Versuche TH-29.1, -29.2 und -29.3 wurden mit COCOSYS berechnet. Die Nodalisation wurde für alle drei Versuche beibehalten, abgesehen von Änderungen, die notwendig waren, um die Eingaben an die Versuchsbedingungen anzupassen, z. B. die Verengung am Ende des Rohrs der inneren Kammer und die zusätzliche Dampfeinspeisung (Steam Injection 2 in Abb. 2.4) für TH-29.3. Es sollte nachgewiesen werden, dass ein einziges Nodalisationsschema zur Berechnung aller drei Versuche mit akzeptablen Ergebnissen verwendet werden kann. Folglich wurde keine Anpassung der Nodalisation vorgenommen, um die Berechnung besser auf das entsprechende Experiment abzustimmen. Die Randbedingungen für jeden Einzeltest wurden entsprechend dem Versuchsablauf festgelegt. Die Bewertung erfolgt auf der Grundlage mehrerer charakteristischer physikalischer Parameter. In den folgenden Abbildungen sind die Versuchswerte mit "EXP" und die Berechnungsergebnisse mit "COC" bezeichnet. Nachfolgend werden die Ergebnisse des Tests TH-29.1 beschrieben, da sich das grundsätzliche Verhalten in allen Tests ähnelt. Am Ende des Kapitels wird dann auf die anderen Tests eingegangen, soweit durch die unterschiedlichen Randbedingungen die Ergebnisse abweichen.

In Abb. 2.5 ist für den Test TH 29.1 die Druckentwicklung in der Anlage im Vergleich zur COCOSYS-Rechnung dargestellt.

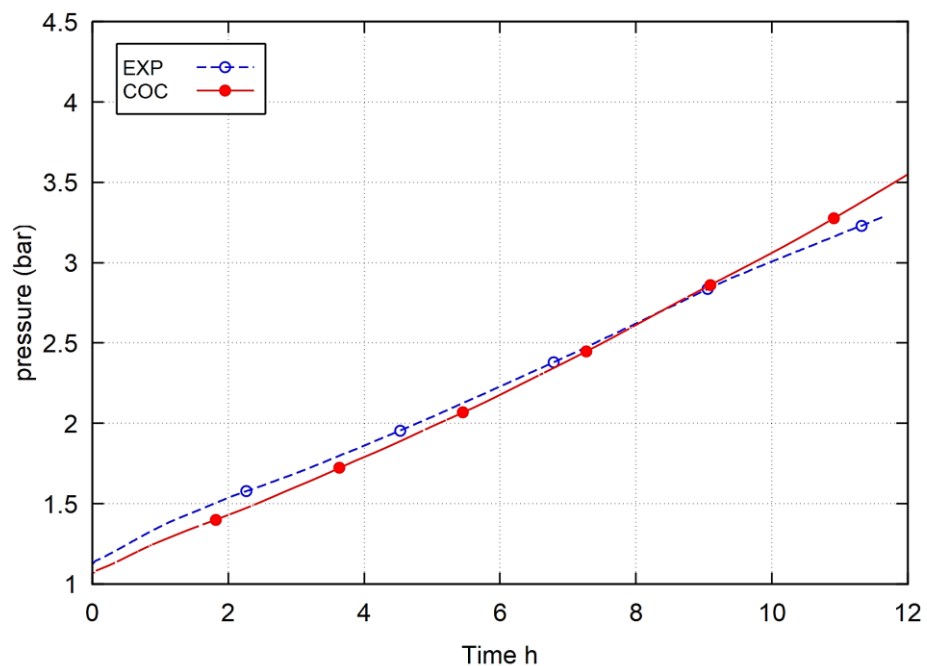


Abb. 2.5 THAI TH-29, Vergleich des gemessenen Drucks mit der COCOSYS-Rechnung

Das Verhalten ist durch die Dampf- und Heliumeinspeisung und die Kondensation von Dampf an den Strukturen aufgrund der thermischen Randbedingungen an den Wänden ausgeglichen. Da die berechneten Werte mit den experimentellen gut übereinstimmen, können die gegenläufigen Effekte der drucksteigernden Einspeisung und der druckmindernden Kondensation in COCOSYS als gut modelliert angesehen werden.

Das Hauptziel der experimentellen Kampagne war das Verhalten des nicht kondensierbaren Leichtgases Helium (als Ersatz für Wasserstoff) als Folge des eingespeisten und später in der Atmosphäre kondensierten Dampfes. Abb. 2.6 zeigt die Entwicklung der Dampfkonzentration in der Atmosphäre auf bestimmten Ebenen in der Anlage, beginnend bei 2,6 m bis zu 8,7 m. Wie zu erkennen ist, beginnt auf der höchsten Ebene ein steiler Anstieg der Dampfkonzentration infolge der Dampfeinspeisung. In der Folgezeit werden Dampf und Helium nach unten gedrückt, so dass das Dampfpolster langsam von oben nach unten wächst. Aufgrund der Dampfkondensation nimmt die Konzentration nach Erreichen hoher Werte fast linear ab. Auch hier gibt COCOSYS die experimentellen Ergebnisse mit guter Genauigkeit wieder.

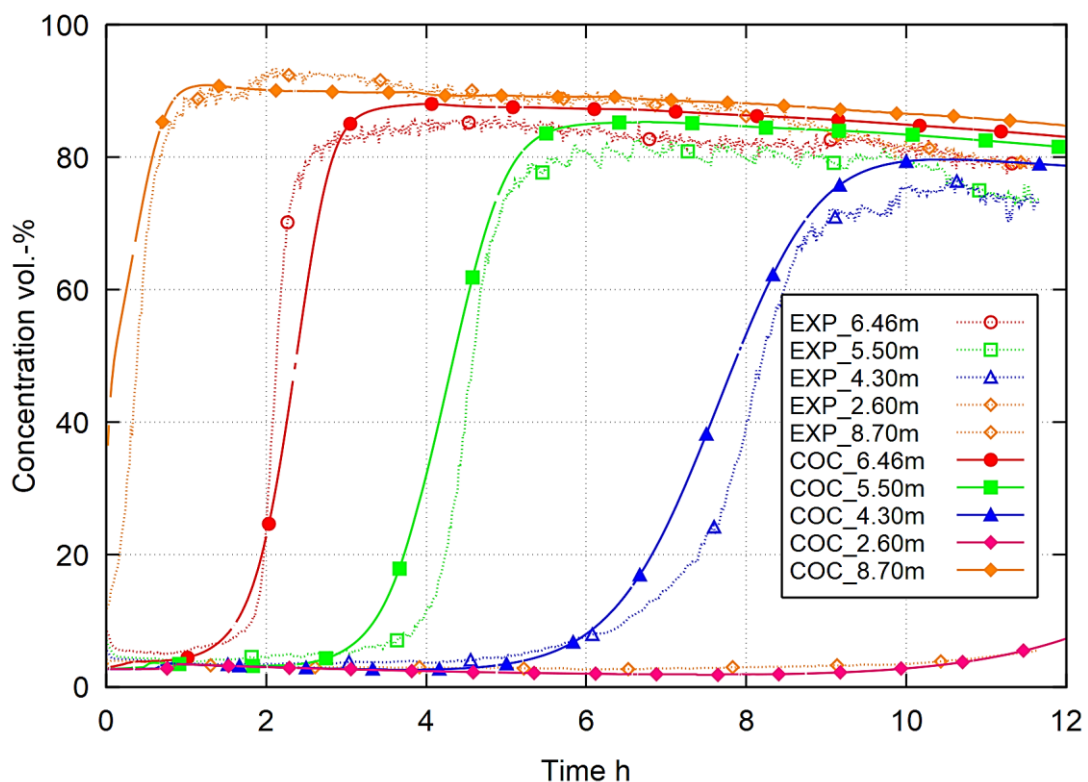


Abb. 2.6 THAI TH-29, Vergleich der gemessenen Dampfkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen mit der COCOSYS-Rechnung

Aufgrund der Einspeisung von Helium und Dampf und dessen anschließender Kondensation ist die Heliumkonzentration auf bestimmten Ebenen in der Anlage mit den experimentellen Werten vergleichbar. Unterschiede sind bei der maximalen Konzentration zu erkennen, die auf bestimmten Ebenen erreicht wird (Abb. 2.7). Während die Berechnungen ein kontinuierlicheres Verhalten mit einem ausgeprägten Maximum zeigen, nähern sich die experimentellen Werte im Laufe der Zeit einem etwas niedrigeren Niveau an. Dieses Verhalten ist darauf zurückzuführen, dass sich die Dampffront von oben nach unten bewegt, während gleichzeitig Dampf kondensiert wird. Diese gegenläufigen Phänomene sind recht empfindlich und nicht so kontinuierlich wie vom Code berechnet. Dennoch wird das Gesamtverhalten von COCOSYS gut erfasst. Dies zeigt wiederum, dass COCOSYS die thermohydraulischen Phänomene wie die Kondensation sehr gut vorher-sagen kann. Dies ist auch in Abb. 2.8 zu erkennen, in der die nach unten gerichtete, zunehmende Konzentration des Heliums dargestellt ist.

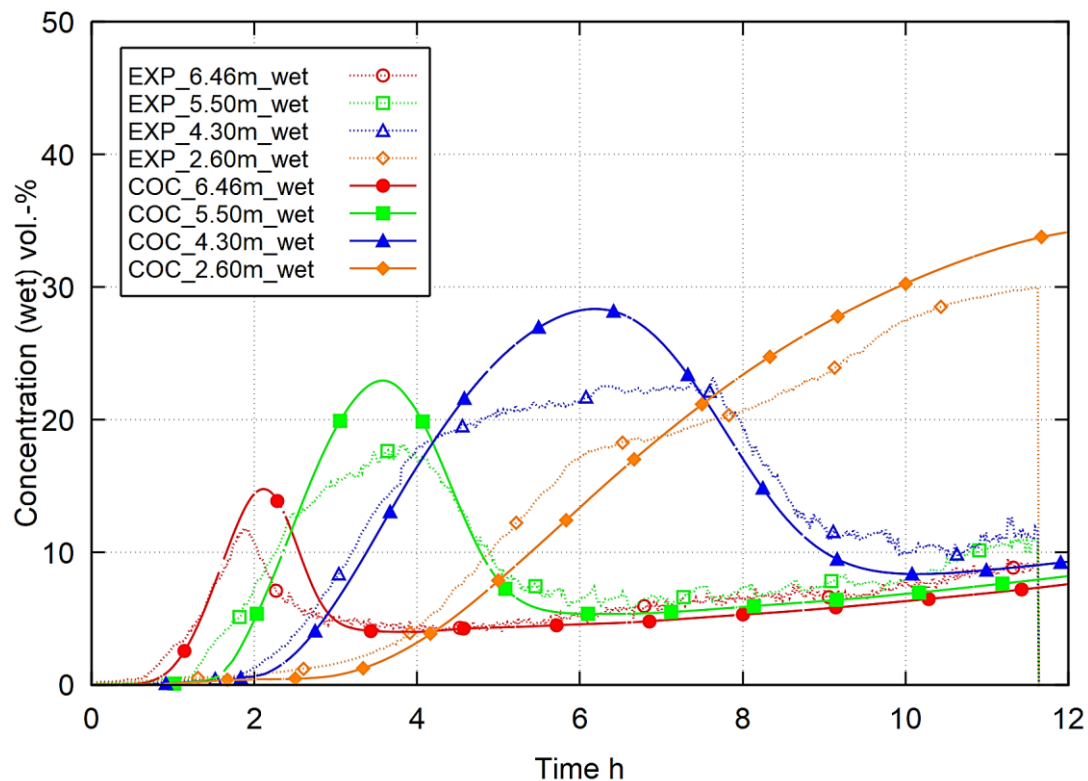


Abb. 2.7 THAI TH-29, Vergleich der gemessenen Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen mit der COCOSYS-Rechnung

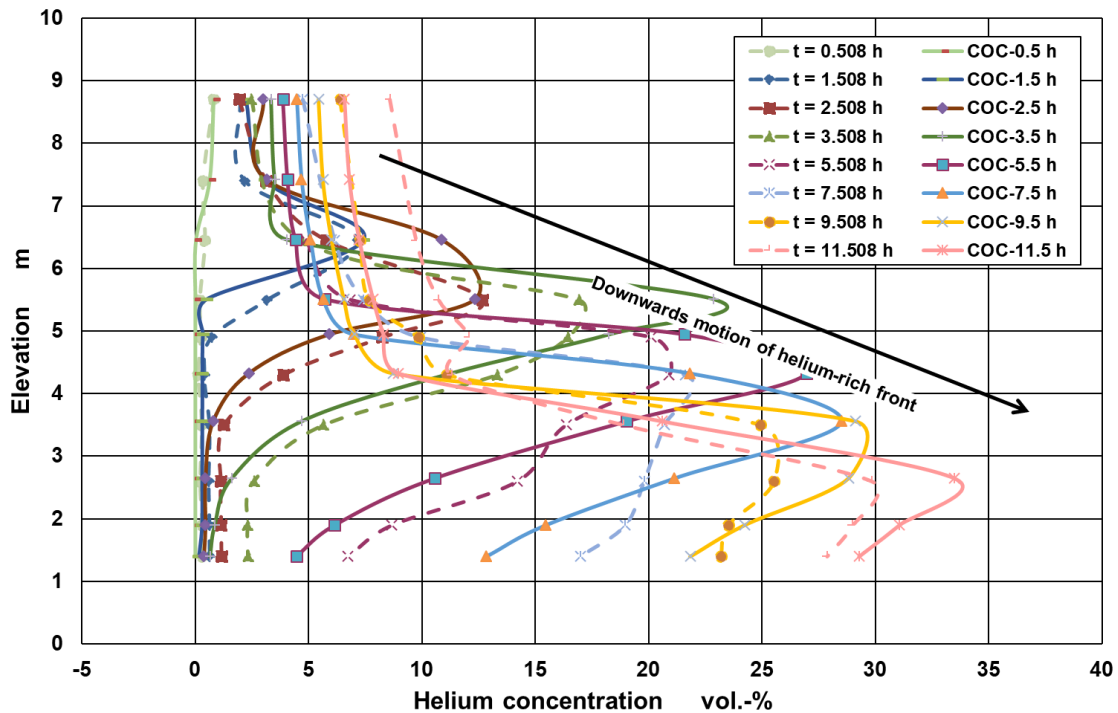


Abb. 2.8 THAI TH-29, Vergleich der zeitlichen Propagation der Heliumwolke mit der COCOSYS-Rechnung

2.1.1.5 Quervergleich von TH-29.1 mit TH-29.2 und TH-29.3

Abschließend zeigt ein kurzer Vergleich für alle drei Berechnungen mit den entsprechenden experimentellen Daten im Allgemeinen ein zufriedenstellendes Verhalten. Als eine der charakteristischen Größen wird die Entwicklung der Heliumkonzentration für ein Niveau in der Anlage verglichen (Abb. 2.9). Auch hier ist das Gesamtverhalten von COCOSYS im Vergleich zum Experiment gut berechnet. Lediglich für TH-29.3 lässt sich aus den Post-Test-Analysen ein etwas anderes Verhalten feststellen. Durch die zusätzliche Einspeisung von Dampf in den Innenraum werden die inneren Zylinderwände im Gegensatz zu TH-29.1 und TH-29.2 kontinuierlich aufgeheizt. Dies führt zu höheren Temperaturen an den Innenraumwänden im Vergleich zu den TTV-Wänden. Dadurch entsteht ein horizontaler Temperaturgradient im Ringraum, der eine natürliche Konvektionsschleife induziert, die bis zu einem gewissen Grad die vertikale Durchmischung des Heliums an der Heißgasfront mit dem darunter liegenden Gasvolumen erzwingt.

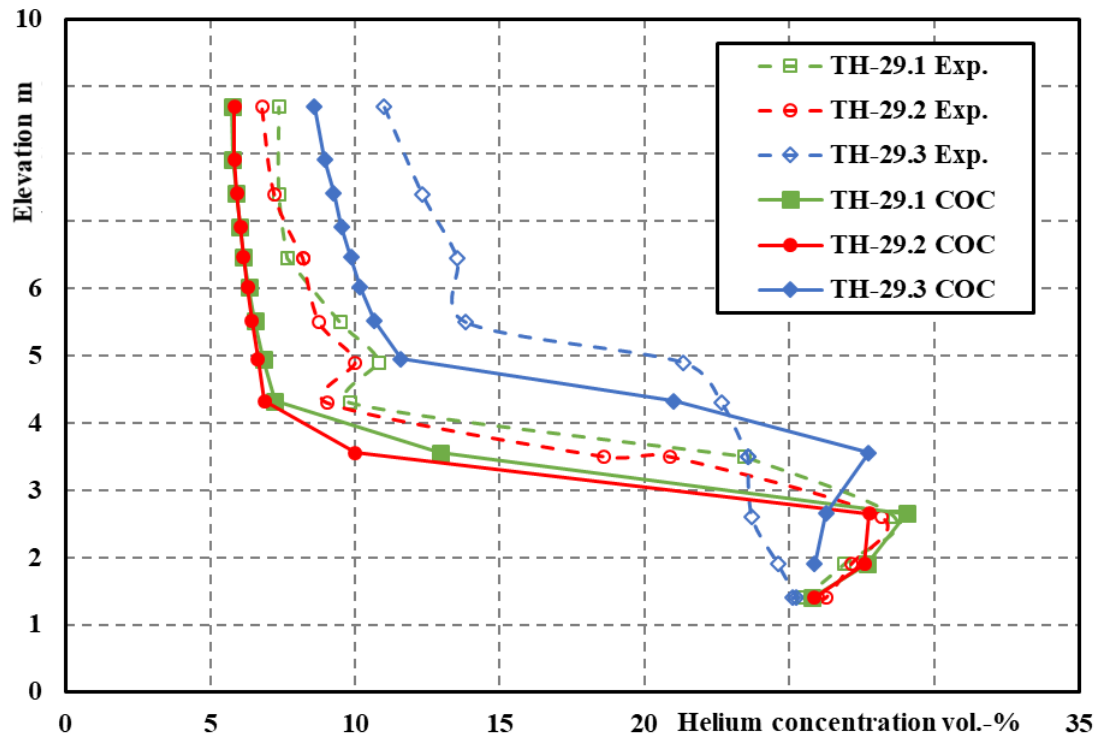


Abb. 2.9 THAI TH-29.1 - 29.3, Vergleich der Heliumkonzentration entlang des Ringraums nach 10,5 h

Ein weiterer Vergleich wurde für die Kondensationsprozesse während der Versuche durchgeführt. Der Verlust von Dampf durch Kondensation beeinflusst den atmosphärischen Zustand und führt zu einer erhöhten Heliumkonzentration an der Spitze der Heißgasfront. Da TH-29.1 und TH-29.2 keine signifikanten Unterschiede aufweisen, werden die Vergleiche in Abb. 2.10 für TH-29.1 und in Abb. 2.11 für TH-29.3 dargestellt. Im Allgemeinen sammelt sich im Ringraum der größte Teil des Kondensats zunächst in der oberen und später in der unteren Rinne. Der Kondensat-Massenstrom, der sich an der äußeren Rinne des Innenzylinders sammelt, beginnt nach etwa 2 Stunden und bleibt bis zum Ende des Versuchs auf einem nahezu konstanten Niveau.

Im Versuch TH-29.3 war die Situation anders als in TH-29.1 und TH-29.2. Die Dampfeinspeisung in den Innenraum heizt die inneren Zylinderwände kontinuierlich auf und führt zu höheren Temperaturen der Innenraumwände im Vergleich zu den TTV-Wänden, wodurch die Kondensation auch an der Außenwand des Innenzylinders verringert wird.

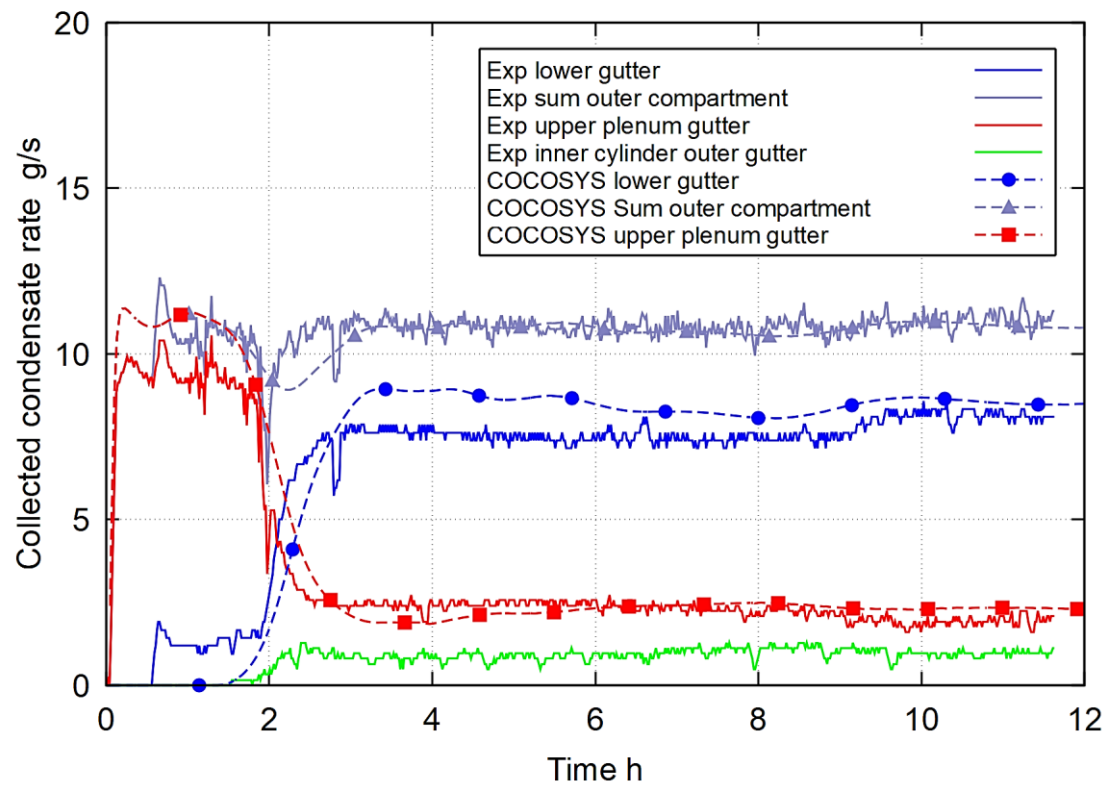


Abb. 2.10 THAI TH-29.1, Vergleich der Kondensatmassenströme

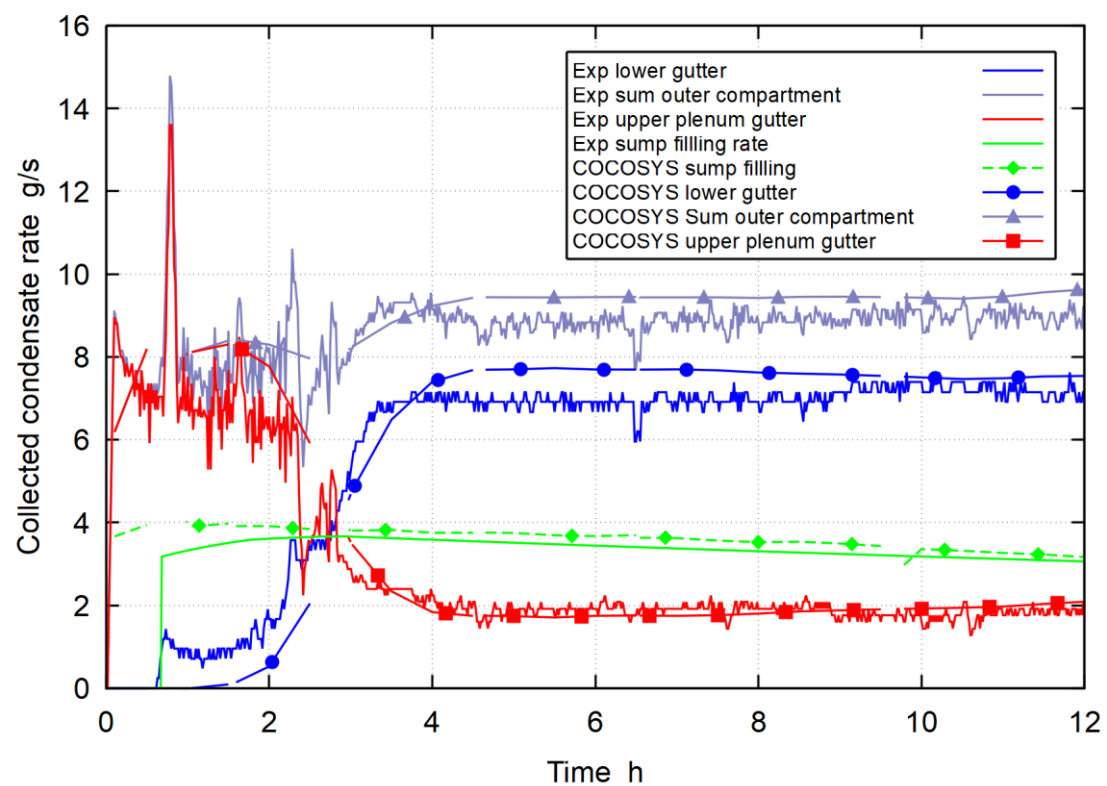


Abb. 2.11 THAI TH-29.3, Vergleich der Kondensatmassenströme

2.1.1.6 Fazit

Die mit dem GRS-Code COCOSYS für den Test THAI TH-29 durchgeführten Analysen zeigen deutlich die Anwendbarkeit von COCOSYS zur Modellierung bestimmter Phänomene, die für Sicherheitsanalysen in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken wichtig sind. In Bezug auf THAI TH-29 umfassen die Phänomene das thermohydraulische Verhalten von nicht kondensierbaren Gasen unter besonderer Berücksichtigung von Dampf und dessen Kondensation, die zu einer lokalen Anreicherung von Helium (oder Wasserstoff im realen Fall) führt. Die Anwendung einer Nodalisierung auf Experimente mit nahezu ähnlichen Randbedingungen erscheint zunächst sinnvoll. Dennoch dient diese Übung auch als gutes Beispiel dafür, dass der Benutzer sowohl die Ergebnisse gründlich bewerten als auch das Eingabedek auf seine Angemessenheit hin überprüfen sollte. Dies betrifft vor allem die Nodalisierung der Anlage. Um alle relevanten thermohydraulischen Phänomene wie Wärmeübergang und Kondensation an Bauwerken zu erfassen, sollte der Anwender des Codes sehr erfahren in der Anwendung auf das zu betrachtende Problem sein.

2.1.2 THAI HR-57 zum Rekombinatorverhalten in H₂/CO-haltiger Atmosphäre

Im Rahmen des OECD/NEA-Projekts „THAI Experiments on Mitigation measures, and source term issues to support analyses and further Improvement of Severe accident management measures“ (THEMIS) wurde die Versuchsreihe THAI HR-54 – HR-58 durchgeführt [FRE 22]. Diese Experimente zielten darauf ab, die Leistung eines passiven autokatalytischen Rekombinators (PAR) während der Ex-Vessel-Phase eines Unfalls zu untersuchen, wobei der Schwerpunkt auf einer Atmosphäre liegt, die Wasserdampf (H₂O), Wasserstoff (H₂), Kohlenmonoxid (CO), Kohlendioxid (CO₂) und Luft enthält. Die Druck- und Temperaturbedingungen im THAI-Testbehälter (TTV) wurden so gewählt, dass sie für die Spätphase eines Unfalls typisch sind. Mit dem in COCOSYS verfügbaren Modell für Passive Autokatalytische Rekombinatoren (PAR) wurde bisher nur die Rekombination von H₂ berechnet und an entsprechenden Experimenten validiert, es ist aber auch für die Rekombination von CO anwendbar. Eine entsprechende Validierung stand mangels verfügbarer experimenteller Daten noch aus. Nachfolgend werden die Arbeiten und Ergebnisse anhand der Simulation des Experiments THAI HR-57 dokumentiert.

Da die Daten des THEMIS-Vorhabens während der Laufzeit des Vorhabens noch nicht offiziell freigegeben sind, werden die Ergebnisse anonymisiert dargestellt.

2.1.2.1 Versuchsbeschreibung

Das Versuch THAI HR-57 befasst sich mit dem Verhalten eines PAR in einer Atmosphäre, die H_2 , CO und CO_2 enthält, und besteht aus zwei Testphasen. In der ersten Testphase werden nur Dampf und nicht kondensierbare Gase in den TTV eingeleitet. In der zweiten Versuchsphase wurde ein Sprühsystem aktiviert, um dessen Einfluss auf die Wirksamkeit von PAR zu untersuchen. Die Konfiguration der THAI-Versuchsanlage für den Versuch THAI HR-57 ist in Abb. 2.12 dargestellt.

Dieser Versuch wurde bei höherem Druck und höherer Temperatur als andere, vergleichbare Versuche der Testserie durchgeführt, um die Randbedingungen während einer Ex-Vessel-Phase eines Unfalls genauer darzustellen. Der Versuch HR-57 wurde für einen blinden Benchmark im Rahmen des OECD/NEA THEMIS-Projekts ausgewählt. Eine Spezifikation für die Blindsimulation /FRE 21a/ und ein Quick-Look-Report /FRE 21b/ wurden von Becker Technologies GmbH zur Verfügung gestellt.

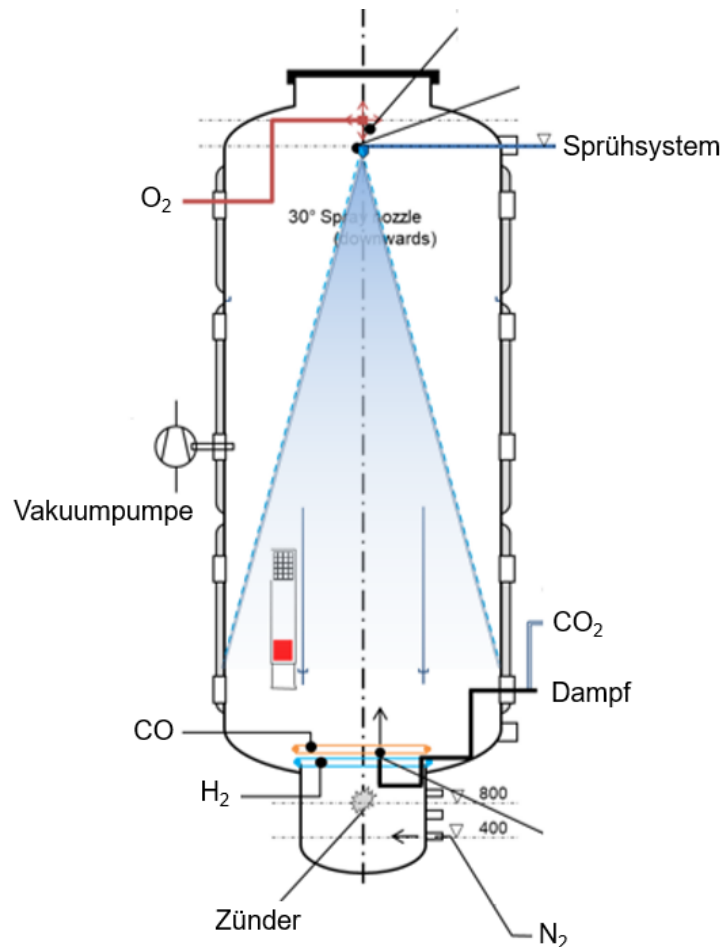


Abb. 2.12 Darstellung der Versuchsanlage THAI für den Versuch THAI HR-57

2.1.2.2 COCOSYS-Datensatz und PAR-Model

Die Nodalisierungen für die blinde Vorausrechnung sowie für die offene Rechnung von COCOSYS zum Benchmark THAI HR-57 sind aus Abb. 2.13 ersichtlich. Die Nodalisierung für die blinde Phase des Benchmarks enthält 72 Zonen und die Nodalisierung für die offene Phase des Benchmarks enthält 99 Zonen, um speziell die Bedingungen im Innenzylinder besser simulieren zu können. Der Vergleich zwischen der blinden COCOSYS-Berechnung und den experimentellen Ergebnissen zeigte Diskrepanzen bei der H_2 -Konzentration im unteren Teil des TTV. Um dies zu beheben, wurden für die offene Nachrechnung Änderungen an der Nodalisierung vorgenommen. Insbesondere wurden zusätzliche Zonen mit direktem Kontakt zu Strukturoberflächen (TTV-Wand und Innenzylinder) hinzugefügt, um den Wärmetransport besser zu erfassen und unterschiedliche konvektive Strömungen zu berücksichtigen. Die Nodalisierungen für die beiden Benchmark-Phasen sowie die Modellierung von Anfangs- und Randbedingungen sind in der technischen Notiz /ILI 22a/ detailliert beschrieben.

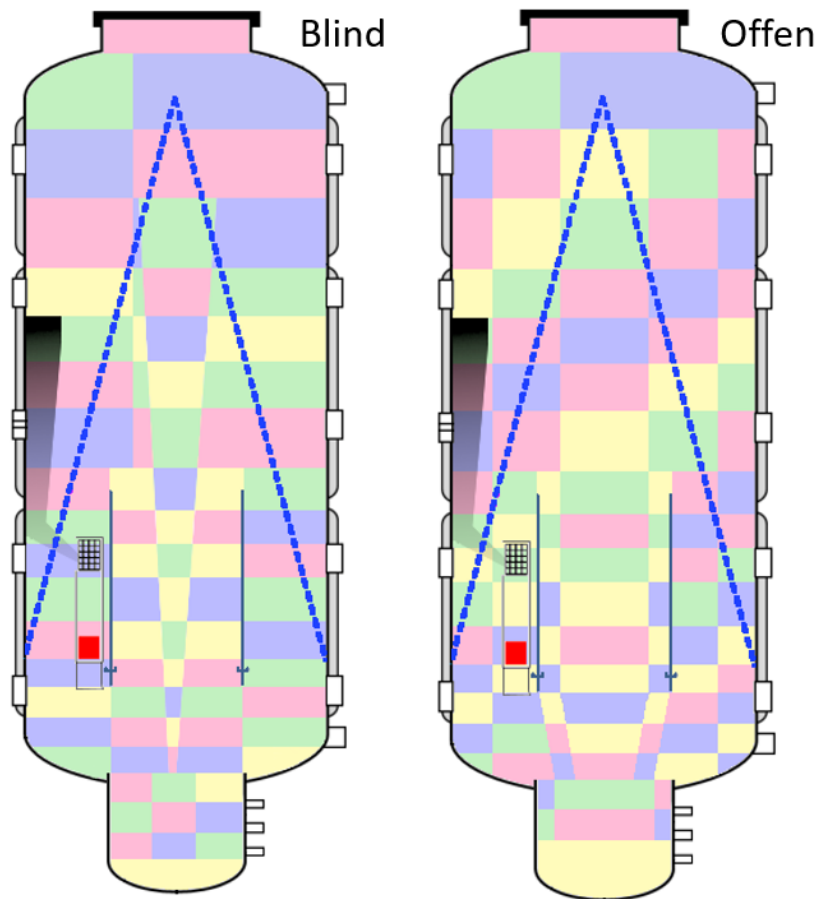


Abb. 2.13 COCOYS Nodalisierungen für den Test THAI HR-57 – blinde Rechnungsphase (links) und offene (rechts)

PAR-Modell in COCOSYS

Der PAR wurde mit dem detaillierten mechanistischen 1D-Modell CATALY_BOX /ARN 21a/ simuliert. Dieses Modell ermöglicht die Unterteilung des PAR in verschiedene Abschnitte. Wie in Abb. 2.14 links schematisch dargestellt, wurde der PAR in vier Abschnitte unterteilt: Einlass, Rekombinationsplatten, Schornstein und Auslass. Jeder der Abschnitte kann einen unterschiedlichen Druck und eine unterschiedliche Gastemperatur aufweisen. Die Gase können sowohl nach oben als auch nach unten durch den PAR strömen. Die Seitenwände des PAR werden als reguläre COCOSYS-Strukturen modelliert, sie können jedoch nur mit den PAR-Zonen Energie austauschen. Die katalytischen Platten werden über spezielle Gleichungen modelliert und sind nicht einfach reguläre COCOSYS-Strukturen. Eine detaillierte Beschreibung der CATALY_BOX ist im /ARN 21a/ dargestellt.

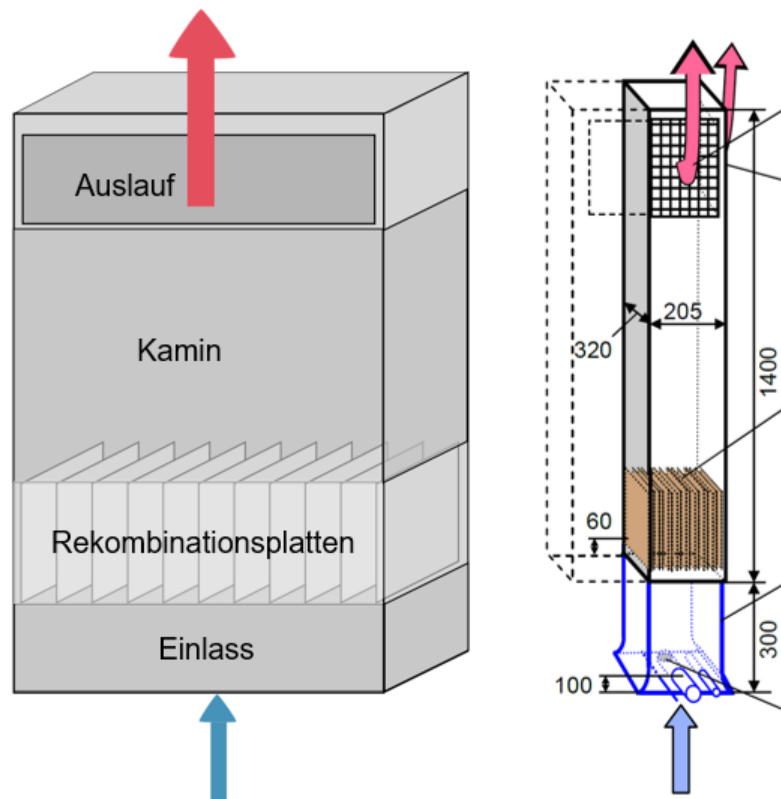


Abb. 2.14 Schema der PAR-Modellierung in COCOSYS (links) und im THAI-Behälter implementierte PAR-Einheit (rechts) /ARN 21a/

2.1.2.3 Simulationsergebnisse

Der simulierte Druckverlauf ist, wie eingangs erwähnt, anonymisiert in Abb. 2.15 den experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt. Unterschiede in der Modellierung des Versuchsbehälters, Randbedingungen und Sprühpfade zwischen der blinden und offenen Rechnungsphase führten zu kleinen Unterschieden im errechneten Druck in der zweiten Hälfte der ersten Versuchsphase und der zweiten Versuchsphase. Der initiale, steile Druckanstieg zu Beginn der ersten Versuchsphase aufgrund der Einspeisung von Gasen und des Einsetzens der Rekombination im PAR ist sehr genau simuliert und der Druckpeak sehr gut getroffen worden. Der schnelle Druckabbau aufgrund der Aktivierung des Sprühsystems am Anfang der zweiten Versuchsphase ist auch sehr genau simuliert worden. Augenscheinlich scheint die blinde Rechnungsphase partiell besser mit dem Experiment übereinzustimmen. Dieser scheinbare Widerspruch lässt sich aber auf die teils nicht korrekt definierten Randbedingungen zurückführen. Nach Definition der korrekten Randbedingungen mit Offenlegung der experimentellen Daten und geringfügigen Änderungen ergaben sich dann die Ergebnisse der offenen Rechnung.

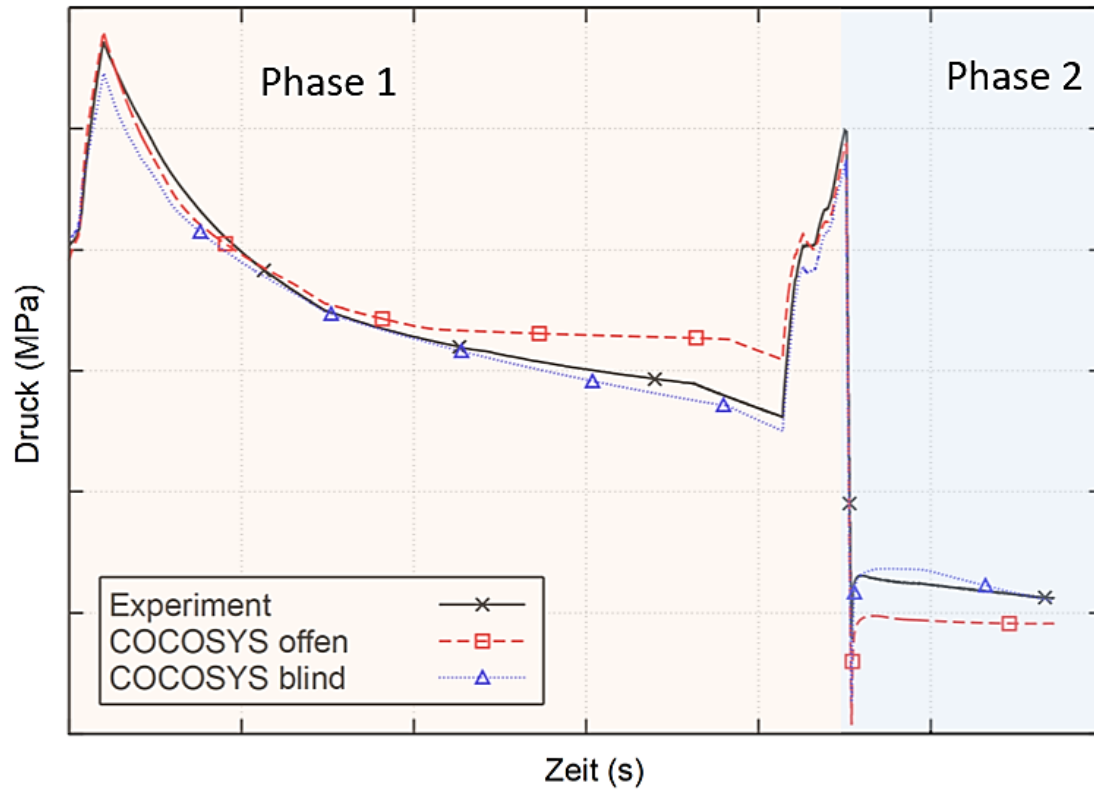


Abb. 2.15 Druckverlauf im TTV im Experiment THAI HR-57, in der blinden Vorausrechnung und offenen Nachrechnung

Die simulierte, integral rekombinierte H_2 - und CO-Masse ist (anonymisiert) in Abb. 2.16 den experimentellen Ergebnissen gegenübergestellt. Die integral rekombinierte Masse ist sowohl in der offenen als auch in der blinden Phase des THAI HR-57 Benchmarks von COCOSYS sehr genau simuliert worden.

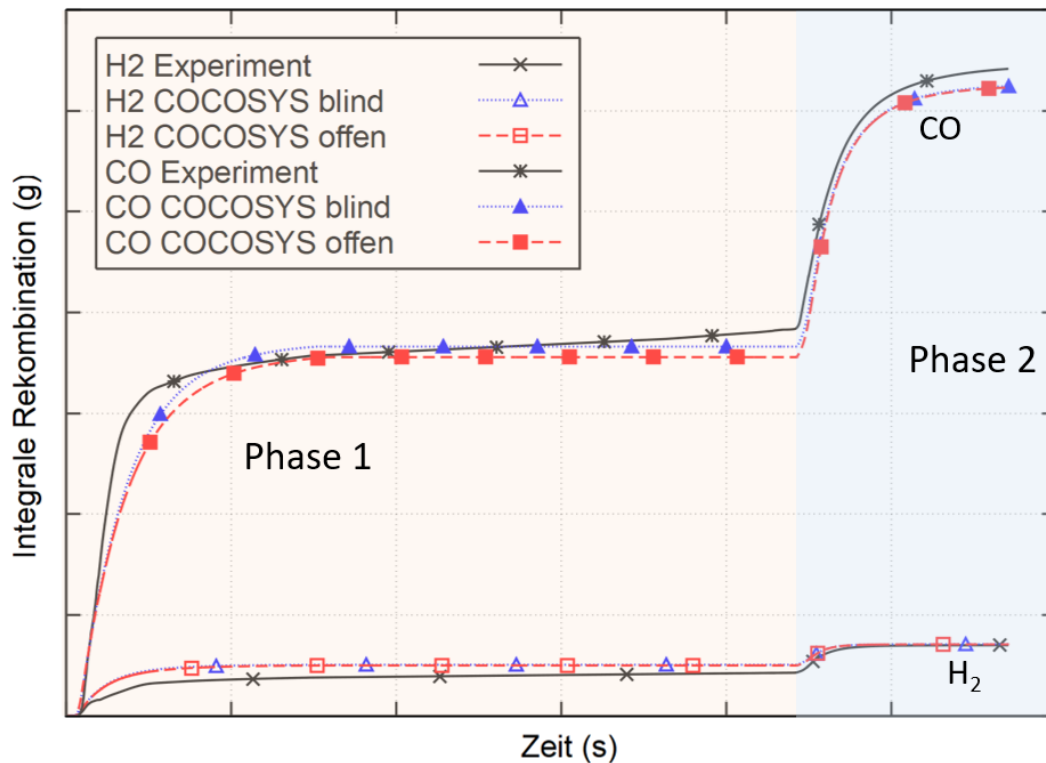


Abb. 2.16 Integrale Rekombinationsmassen für H₂ und CO für blinde Vorausrechnung, offene Rechnung und experimentelle Ergebnisse (Test THAI HR-57)

2.1.2.4 Fazit

Sowohl die blinde als auch die offene COCOSYS-Simulation des Tests THAI HR-57 zeigen eine gute Übereinstimmung der integralen Rekombinationsmassen von H₂ und CO. Die komplizierten Randbedingungen dieses Versuches führen zu kleinen Differenzen zwischen simuliertem und gemessenem Druckverlauf. Die wesentlichen Phänomene wie die Aktivität bzw. das Abbauverhalten des PAR sind sehr genau simuliert worden und auch das Verhalten des Drucks wurde in diesen Versuchsphasen mit einem hohem Genauigkeitsgrad simuliert.

Die Modellierung der Versuchsanlage, Anfangsbedingungen und Randbedingungen sowie Simulationsergebnisse der blinden und offenen Benchmark-Phasen und Analysen anhand des Vergleichs mit den experimentellen Ergebnisse sind in /ILI 22a/ dokumentiert. Die Ergebnisse der blinden Simulation wurden auf der dritten Sitzung der Programme Review Group und des Management Boards des OECD/NEA-Projekts THEMIS vorgestellt /ILI 22b/. Die Ergebnisse der offenen Simulation wurden auf der vierten Sitzung der Programme Review Group und des Management Boards des OECD/NEA-Projekts THEMIS vorgestellt /ILI 22c/.

2.1.3 THAI Iod-31 zur Anwendung des ATM_FULL-Modells

Der Test THAI Iod-31 ist durchgeführt worden mit der Zielsetzung, den Einfluss von Sprühsystemen auf das Auswaschen von I_2 zu untersuchen /FUN 16/. Die Konfiguration dieses Tests beinhaltet das Sprühsystem, das sowohl mit Frischwasser als auch mit dem Wasser aus dem Sumpf im PAD über eine Rezirkulationspumpe betrieben werden kann, vgl. Abb. 2.17.

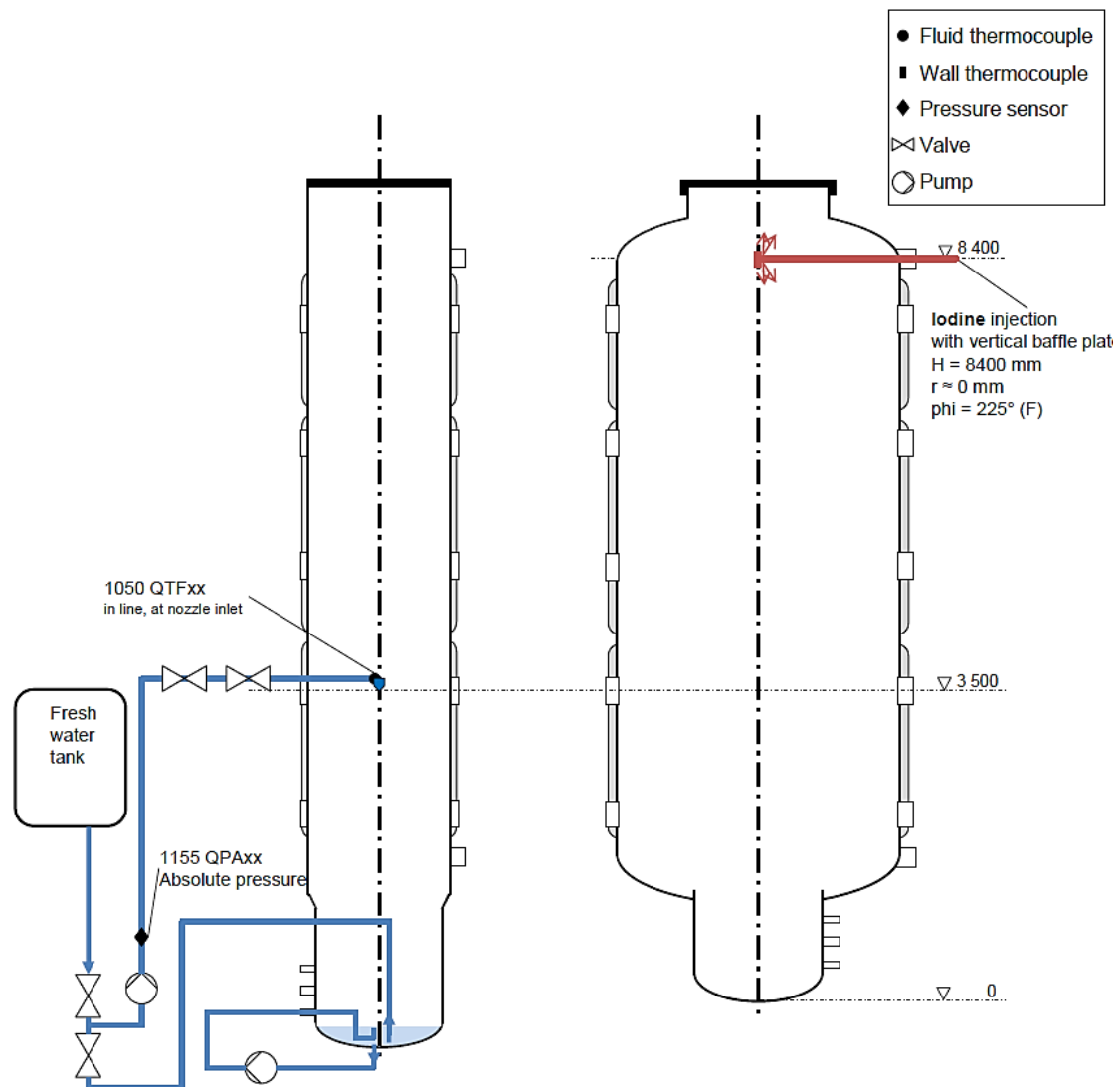


Abb. 2.17 Konfiguration des Tests THAI Iod-31 /FUN 16/

Der Versuch ist ebenso geeignet, den Einfluss von einer detaillierten Nodalisierung des Sumpfes mit dem in COCOSYS verfügbaren Verbindungstyp ATM_FULL zu untersuchen. Der Verbindungstyp ATM_FULL erlaubt die Berechnung der Strömung von Wasser und Luft zwischen zwei verbundenen COCOSYS-Zonen, die teilweise oder

vollständig mit Wasser gefüllt sind. Insbesondere soll er bei der Simulation großer Wasservorlagen zur Anwendung kommen.

Das Verhalten dieses Abzweigtyps ist für den gasförmigen Anteil der Strömung sehr ähnlich zu den gewöhnlichen COCOSYS-Atmosphärenverbindungen vom Typ ATMOS_JUN, während er für den Wasserteil eng mit spezifischen Verbindungen zum Transport von Wasser über z. B. Schwellen verwandt ist. Solange der Wasserstand in den angeschlossenen Zonen nicht vollständig bis zur oberen Zonengrenze ist, sollte kein größerer Unterschied zwischen den oben genannten Verbindungen und einer ATM_FULL-Verbindung zu beobachten sein. Das Verhalten einer ATM_FULL-Verbindung ändert sich, sobald das Wasser im unteren Bereich die untere Öffnung der Verbindung erreicht. Zusätzlich zur sonst verwendeten DRAIN_BOT-Verbindung modelliert die ATM_FULL-Verbindung die thermische Konvektion für die vertikale Verbindung. Eine stromaufwärts gerichtete Wasserströmung in Abhängigkeit von dichtegetriebenen Auftriebskräften ist ebenfalls möglich. Der Unterschied zu einer SUMP_BAL-Verbindung besteht darin, dass Gas durch die Abzweigung strömen kann, solange die Öffnung der horizontalen Abzweigung nicht vollständig unter Wasser ist.

2.1.3.1 COCOSYS-Datensatz

Um den Einfluss von ATM_FULL-Verbindungen auf die Simulation des Gesamtsystems zu analysieren, wurde in der ursprünglichen Referenznodalisierung mit insgesamt drei Zonen (Abb. 2.18 links) der Sumpfbereich verfeinert und in vier Zonen, die durch ATM_FULL-Verbindungen in der vertikalen Richtung verbunden sind, unterteilt (Abb. 2.18 rechts). Anhand dieser Nodalisierung kann die Funktionalität der ATM_FULL-Verbindungen und der Einfluss eines segmentierten Wasserpools auf die thermohydraulischen Zustände (Temperaturschichtung) untersucht werden.

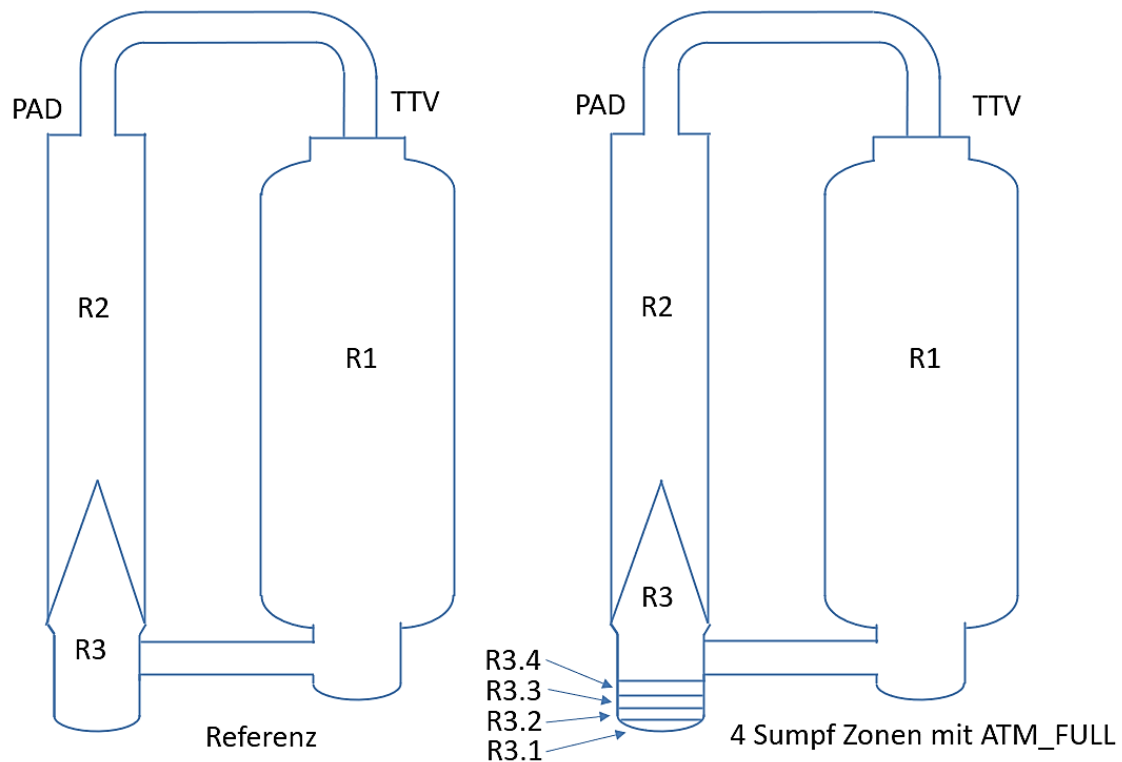


Abb. 2.18 COCOSYS-Nodalisierungen – Referenznodalisierung (links) und Nodalisierung mit vollständig mit Wasser gefüllten Zonen (R3.1 – R3.4) und ATM_FULL-Verbindungen (rechts)

2.1.3.2 Simulationsergebnisse

Die Unterteilung des Sumpfbereichs im PAD in vier Zonen führt zu keinen numerischen Instabilitäten im Thermohydraulik-Modul THY. Da eine Kopplung mit NewAFP aktuell allerdings nicht möglich ist, konnte NewAFP nicht getestet werden. Hier besteht noch Bedarf für Weiterentwicklungen bei NewAFP für den von einer Zone in einer darunterliegenden Zone sinkenden Wasserspiegel.

Obwohl die untersuchte Nodalisierung die THAI⁺-Anlage sehr grob abbildet, verbessert die Unterteilung des Sumpfes auf vier Zonen die Genauigkeit der Simulation in diesem Bereich. Der Druckverlauf im PAD ist in Abb. 2.19 dargestellt. In dieser Abbildung werden die Simulationsergebnisse der Referenznodalisierung mit der feineren Nodalisierung sowie mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Die stationären Bedingungen in den ersten 10.000 s wurden mit der feineren Nodalisierung besser getroffen. Im Zeitraum von 20.000 s bis 85.000 s sind die Ergebnisse mit dem unterteilten Sumpf ebenfalls besser. Das ist auf die simulierte Temperaturstratifikation im Sumpf zurückzuführen (Abb. 2.20).

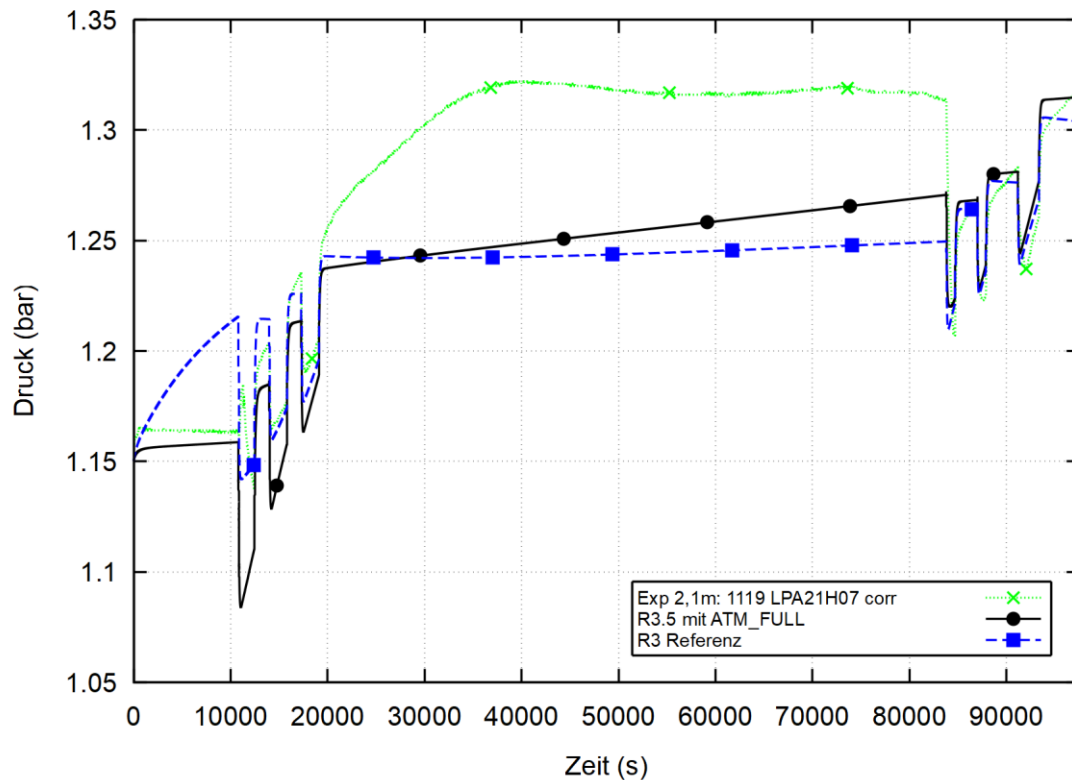


Abb. 2.19 Druckverlauf im PAD

Dazu ist in Abb. 2.20 der Temperaturverlauf im Sumpfbereich des PAD dargestellt. Die Unterteilung des Sumpfes in vier Zonen erlaubt eine Simulation der Temperaturstratifikation. Lediglich die simulierte Wassertemperatur in der untersten Zone R3.1 ist deutlich niedriger als im Experiment und in den darüberliegenden COCOSYS-Zonen. Dies könnte durch weitere Verfeinerung der Nodalisierung und der Möglichkeit einer Konvektionsströmung im unteren Bereich noch verbessert werden, war hier aber nicht Gegenstand der Untersuchung.

2.1.3.3 Fazit

Eine Unterteilung von vollständig gefüllten Zonen, die dann mit ATM_FULLL-Verbindungen verbunden sind, kann die Genauigkeit der Simulation verbessern. Eine solche Unterteilung in mehrere Zonen ist insbesondere dann zu empfehlen, wenn Temperaturstratifikation im Wasser zu erwarten ist. Die Anwendung von ATM_FULLL-Verbindungen zeigte keine numerische Instabilität.

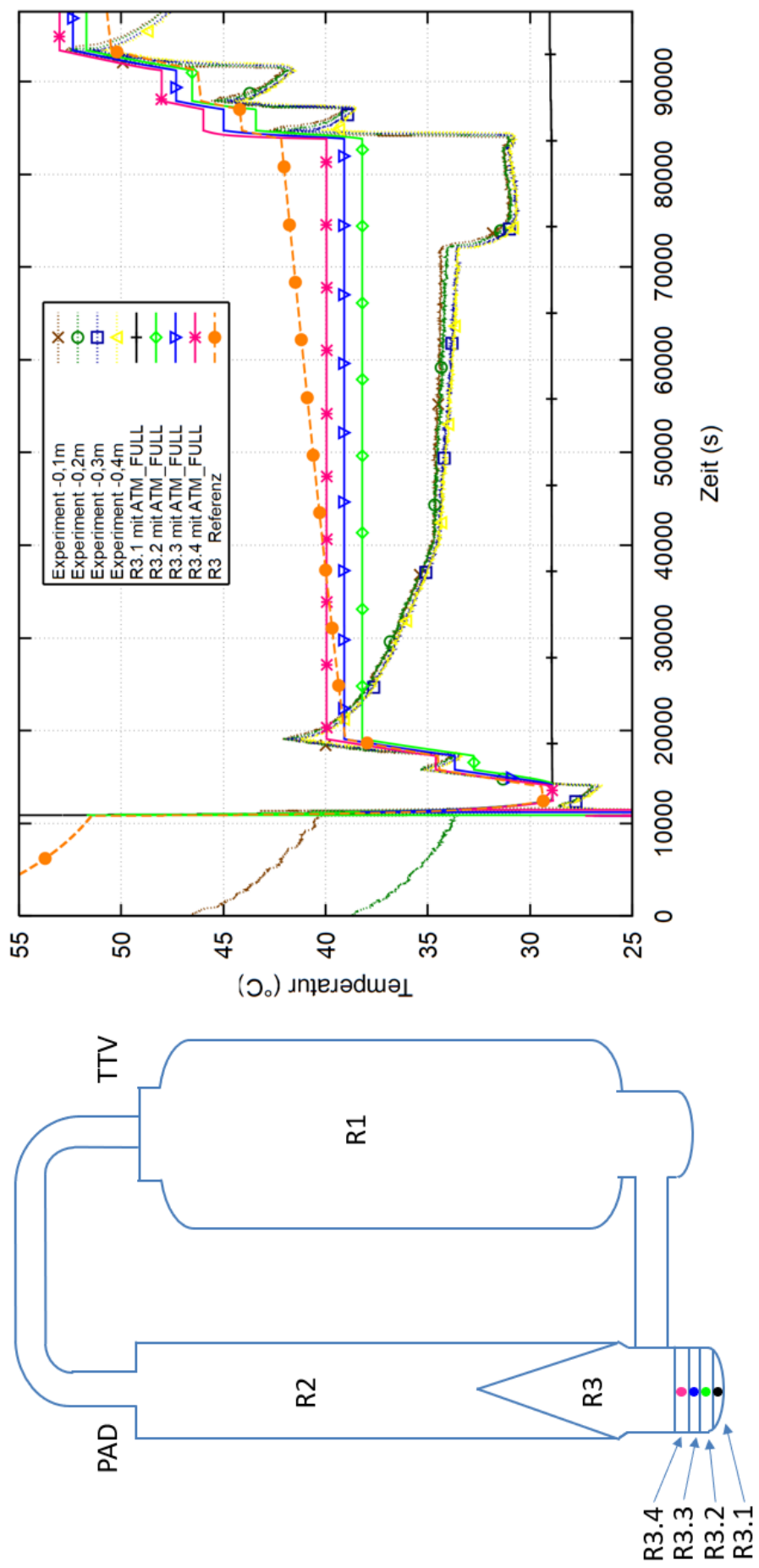


Abb. 2.20 Temperaturverlauf in den Sumpfbzonen R3.1 bis R3.4

2.1.4 PANDA ST3_2 zur sprühstrahlinduzierten Schichtungsauflösung

Im Rahmen des OECD/SETH-2-Versuchsprogramms /OECD 12/ wurden in der PANDA-Versuchsanlage am Paul Scherrer Institut (PSI), Schweiz, eine Reihe von Versuchen mit Sprühsystemen durchgeführt. Das Hauptziel dieser Experimente war die Untersuchung der Auswirkungen des Sprühsystems auf die Druckentlastung des Containments und auf die Verteilung nicht kondensierbarer Gase in einer mehrdimensionalen Geometrie mit mehreren Räumen. Dazu wurde das an der Ruhr-Universität Bochum entwickelte und von der GRS in den COCOSYS-Code implementierte Entrainment-Modell angewendet und einer gezielten Bewertung unterzogen.

Nachfolgend wird die COCOSYS-Simulation des Tests PANDA ST3_2, der in einer Dampf-Luft-Atmosphäre mit einer heliumreichen Schicht im oberen Teil von Behälter 1 in der PANDA-Anlage durchgeführt wurde, diskutiert und bewertet.

2.1.4.1 Versuchsbeschreibung

Der Test PANDA ST3_2 /ERK 09/ ist gekennzeichnet durch eine vertikale Sprühwassereinspeisung durch eine nach unten gerichtete Sprühdüse, die sich in 6,9 m Entfernung vom Boden von Behälter 1 befindet. Die Düse ist so ausgelegt, dass sie ein konisches Sprühbild mit einem Öffnungswinkel von 30° bei der angegebenen Durchflussmenge und dem angegebenen Druck erzeugt.

Die anfänglichen Atmosphärenbedingungen wurden durch Einblasen von Dampf, Luft und Helium in Behälter 1 (Vorkonditionierungsphase) der PANDA-Versuchsanlage geschaffen. Dadurch wurde im oberen Teil von Behälter 1 eine heliumreiche Schicht erzeugt, während das restliche Volumen von Behälter 1 und das gesamte Volumen von Behälter 2 mit einem Dampf-Luft-Gemisch gefüllt war. Der Anfangsdruck in den DW-Behältern betrug 2,6 bar, die Anfangstemperatur lag bei 129 °C, was der Sattdampftemperatur bei Anfangsdruck entspricht. Während des ST3_2-Versuchs wurde demineralisiertes Wasser mit einem konstanten Massenstrom von 840 g/s und einer Temperatur von 40 °C über eine Zeitspanne von 3.424 s (Versuchsphase) durch die Sprühdüse in Behälter 1 eingespritzt. Abb. 2.21 zeigt ein Schema der beiden Behälter mit der Position der Sprühdüse und den Parametern der Ausgangsatmosphäre für den Test ST3_2.

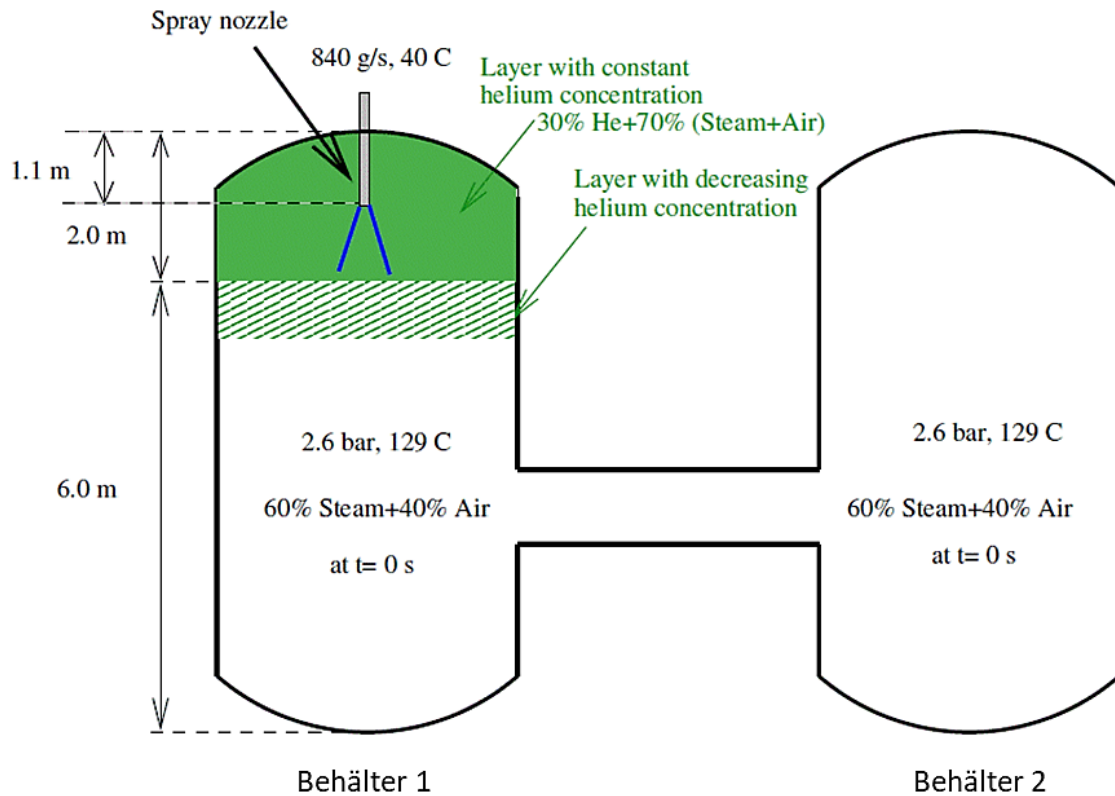


Abb. 2.21 PANDA ST3_2, Prinzipschema der PANDA-Versuchsbehälter mit der Position der Sprühdüse und den Anfangsparametern der Atmosphäre /OECD 12/

Vorkonditionierungsphase des Tests

Während der Vorkonditionierungsphase wurde überhitzter Dampf (Sequenz 1, siehe Abb. 2.22) in die beiden Prüfbehälter eingeblasen und aus ihnen gespült, so dass die Behälterwände eine dem Anfangsdruck von 2,6 bar entsprechende Sättigungstemperatur erreichten. Zur Erzeugung eines 40%igen Luft- / 60%igen Dampfgemisches wurde während der ersten 8.400 s Druckluft bei Raumtemperatur mit einer maximalen Geschwindigkeit von 28 g/s eingeblasen. Anschließend wurde die eingeblasene Luft durch die heißen Stahlwände der Versuchsanlage aufgeheizt. Die Lufteinblasung während der Vorkonditionierung führte zu einem leichten Absinken der Temperatur der Atmosphäre, was in den Temperatur-Anfangsbedingungen zu beobachten war. Nach Erreichen der anfänglichen Druck- und Temperaturbedingungen wurde Helium durch ein Rohr (Innendurchmesser 58 mm) in einer Höhe von 6 m eingeblasen, um eine nominal 30 % heliumreiche Schicht mit einer Höhe von etwa 2 m an der Oberseite von Behälter 1 zu erzeugen.

Sprühphase

Der Test begann mit der Einspeisung von Wasser mit einer nominalen Rate von 0,84 kg/s und einer Temperatur von 40 °C. Das Wasser wurde durch eine Sprühdüse in einer Höhe von 6,9 m über dem Boden des Behälters 1 über einen Zeitraum von 3.424 s eingespritzt. Während des Versuchs war keine Entlüftung geöffnet, d. h., die Versuchsbehälter waren isoliert, um den durch die Sprühwassereinspeisung induzierten Druckabfall im System zu untersuchen.

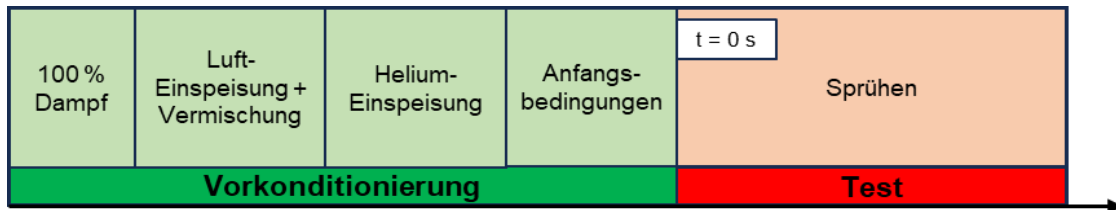


Abb. 2.22 PANDA ST3_2, Vorkonditionierungs- und Sprühphase

Die tatsächlichen Anfangs- und Randbedingungen des ST3_2-Versuchs sind in Tab. 2.1 zusammengefasst. Es ist zu beachten, dass der anfängliche Behälterdruck ein zeitlich gemittelter Wert über einen Zeitraum von 60 s vor Beginn des Versuchs ist. Im Gegensatz dazu wurden die tatsächlichen Mittelwerte für den Gesamtdruck im Behälter, die Wassereinspritzmenge und die Temperatur über die gesamte Versuchsdauer (0 s bis 3.424 s) geschätzt.

Tab. 2.1 PANDA ST3_2, Anfangs- und Randbedingungen

	Nominalwert	mittl. tatsächlicher Wert
Behälterdruck [bar]	2,6	2,64
Dampf-/Luftverteilung (Behälter 1), [%]	60 % Dampf- /40 % Luft (unterhalb 6 m)	57,3 % Dampf, 0,5 % He 42,2 % Luft (unterhalb 4,98 m)
Dampf-/He-/Luftverteilung (Behälter 1), [%]	30 % (ober- halb 6 m)	39,0 % Dampf, 25,2 % He 35,8 % Luft (oberhalb 6,93 m)
Dampf-/He-/Luftverteilung (Behälter 2), [%]	60 % Dampf / 40 % Luft	59,6 % Dampf / 40,1 % Luft / 0,2 % He
Behälterwandtemperatur, [°C]	129	-
Behälteratmosphärentemperatur, [°C]	129	-
Sprühmassenstrom, [kg/s]	0,840	0,845
Sprühwassertemperatur, [°C]	40	38,2

2.1.4.2 COCOSYS-Datensatz

Das COCOSYS-Modell für die PANDA-Anlage besteht aus 70 Zonen, die das innere Volumen der beiden Prüfbehälter einschließlich der Verbindungsleitung abbilden (Abb. 2.23). Die Zonen sind in horizontaler Richtung auf drei Kreissegmente und in vertikaler Richtung auf zwölf Axialschichten verteilt. Die Sprühzonen (hellblau) bezeichnen den Sprühstrahl entlang des vertikalen Sprühkegels. Das Verbindungsrohr (IP) zwischen Behälter 1 und Behälter 2 ist in vier Zonen unterteilt, die als "P7.X" und "P8.X" bezeichnet werden, wobei X die jeweilige Zonennummer ist (siehe Abb. 2.23). Die Umgebung wird als ein sehr großes Volumen modelliert (nicht gezeigt in der Abbildung). Alle Zonen werden durch das Nicht-Gleichgewichts-Zonenmodell von COCOSYS simuliert. Die COCOSYS-Nodalisierung der PANDA-Versuchsanlage für die Simulation des ST3_2-Versuchs ist in Abb. 2.23 dargestellt.

Weiterhin sind die Zonen durch 117 atmosphärische Verbindungen für die Simulation der Gasströmungen verbunden. Außerdem beinhaltet der Datensatz 23 Verbindungen des Typs "DRAIN_BOT" zur Simulation des Wasserabflusses vom Boden einer Zone zur darunterliegenden Zone sowie 10 Verbindungen des Typs "DRAIN_WALL" zur Simulation des Wasserflusses entlang der Wände unter Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen dem Wasserfluss und der Oberfläche der Wärmestruktur.

Das Sprühsystem wird durch ein einzelnes Pumpensystem modelliert, das Wasser aus dem Wasserspeicher (R1TAN) in den obersten zentralen Knoten DW1SZ1 in 6,9 m Höhe einspritzt. Der Sprühstrahl wird durch die Angabe einer Sprühdüse mit dem entsprechenden Tröpfchenpfad unter Anwendung des IVO-Sprühmodells in COCOSYS simuliert. In diesem Fall wird der Sprühmassenstrom aus dem eingespritzten Wasserdurchsatz abgeleitet, während die Tröpfchencharakteristik aus den Eingabedaten der Sprühdüse bestimmt wird. Die Wassereinspeisung soll innerhalb von 70 s nach der Betätigung des Sprühsystems eine konstante Durchflussmenge von etwa 0,84 kg/s erreichen.

Die Stahlwände der beiden Testbehälter werden durch 29 vertikale Wärmestrukturen dargestellt, die den Wärmeübergang zwischen dem inneren Behältervolumen und der Umgebung simulieren. Für alle Wärmestrukturen wird das neue kombinierte CO1-Wärmeübertragungsmodell zusammen mit dem Wand-Gas-Strahlungs-Wärmeübertragungsmodell WGR auf beiden Oberflächen der Wärmestrukturen angewendet.

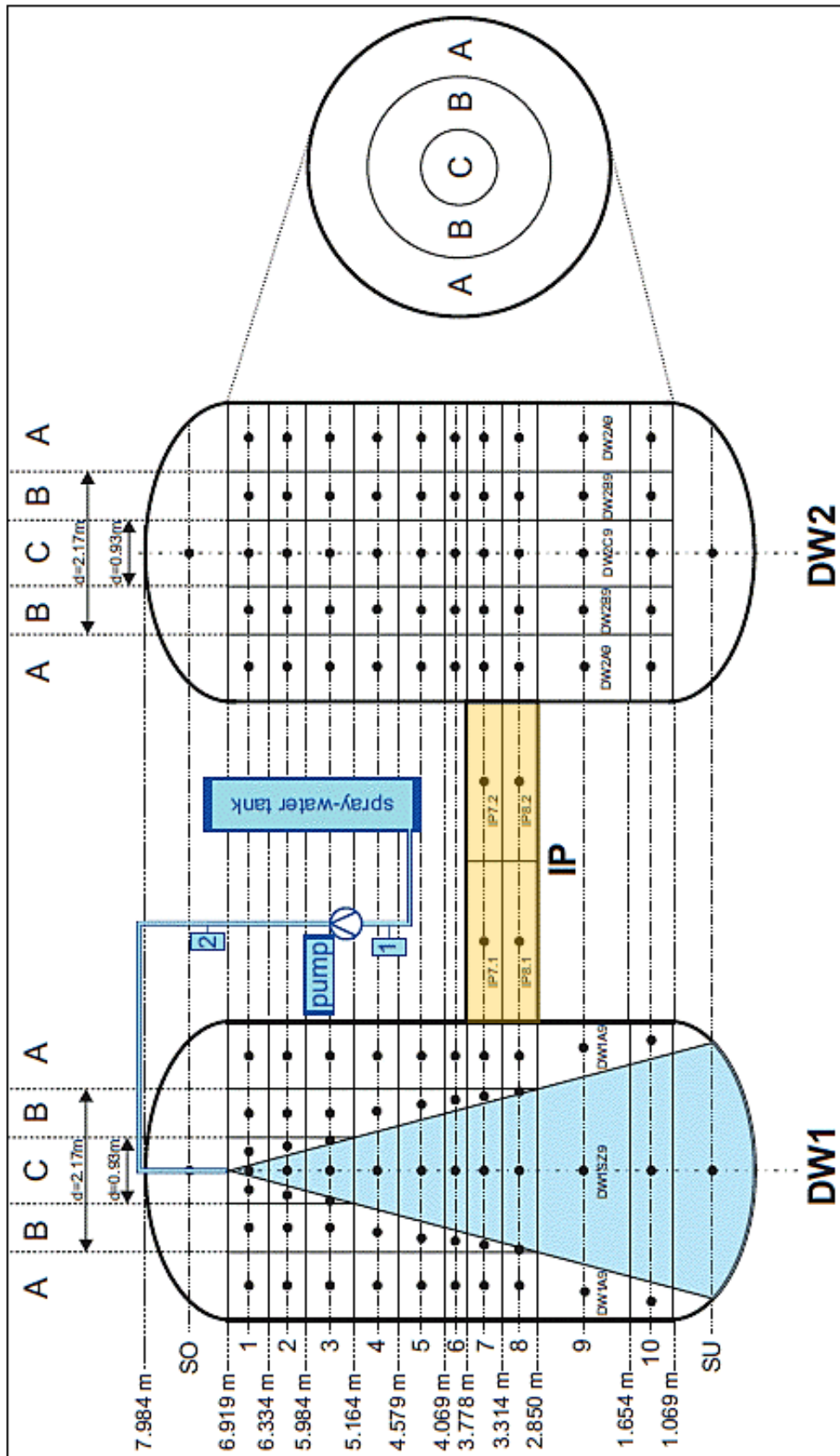


Abb. 2.23 COCOSYS-Nodalisierung der PANDA-Testanlage /RIS 15/

Die durch den Sprühstrahl induzierte Entrainment-Strömung wird auf der Grundlage von Korrelationen berechnet, die aus Experimenten mit einzelnen Sprühstrahlen abgeleitet wurden /RIS 15/. In der vorliegenden Arbeit wurden die folgenden drei experimentellen Korrelationen, die in COCOSYS implementiert sind, angewandt:

MacGregor-Korrelation /MAC 91/

Diese Korrelation wurde durch MacGregor-basierte Experimente mit einem Vollkegel-Wassersprühstrahl in Luftatmosphäre und mit Tröpfchendurchmessern zwischen 0,5 und 1,0 mm abgeleitet, die typisch für Containment-Sprühstrahlen sind. Die Korrelation stellt das Verhältnis zwischen dem Gesamtmassenstrom des Sprühstrahls in einem bestimmten Abstand von der Düse und dem Einspeisemassenstrom des Sprühwassers dar. Der Massenstrom des Sprühstrahls wird als Funktion des Abstands zur Düse, des Düsendurchmessers, der Dichte des Umgebungsmediums, der Dichte des Sprühwassers und des dimensionslosen Verschleppungsparameters berechnet.

Benatt-Eisenklam-Korrelation /BEN 69/

Diese Korrelation ist für einen Hohlkegelsprühstrahl mit maximalen Tropfengrößen in der Größenordnung von 0,15 mm geeignet, was im unteren Bereich des für Containment-Sprühstrahlen typischen Tropfengrößenspektrums liegt. Zusätzlich stellt diese Korrelation das Verhältnis zwischen dem Mitreißmassenstrom des Sprühstrahls in einem bestimmten Abstand von der Düse und dem Einspeisemassenstrom des Sprühwassers dar. Die Korrelation unterscheidet also zwischen dem Entrainmentverhalten im Nahbereich und im Fernbereich der Sprühdüse. Im Nahbereich wird kein Entrainment berechnet, da sich der Sprühstrahl nicht vollständig ausgebildet hat.

McQuaid-Korrelation /MCQ 75/

Die McQuaid-Korrelation wurde auf der Grundlage der Untersuchungen von McQuaid abgeleitet und als zusätzlicher Ansatz für die Berechnung des Austrags aus einem Hohlkegelsprühstrahl vorgestellt. Die Korrelation stellt den Zusammenhang zwischen dem Entrainment-Volumenstrom und dem Sprühstrahl-Volumenstrom dar, der als Funktion der Dichte des Sprühstrahlmediums, der Durchflusszahl und des Durchmessers des Sprühstrahls in Abhängigkeit von der Entfernung berechnet wird.

Eine detaillierte Beschreibung der drei experimentellen Entrainment-Korrelationen ist im COCOSYS-Benutzerhandbuch /ARN 19/ enthalten.

2.1.4.3 Simulationsergebnisse

Die Abb. 2.24 vergleicht den von COCOSYS unter Anwendung der drei vorgenannten Entrainment-Korrelationen vorhergesagten Behälterdruck mit dem während des Tests PANDA ST3_2 gemessenen Druckverlauf. Der Vergleich zeigt eine kontinuierliche Druckentlastung des Behälters 1 aufgrund der Kondensation von Dampf auf den Wassertropfenoberflächen während der vertikalen Wassereinspeisung.

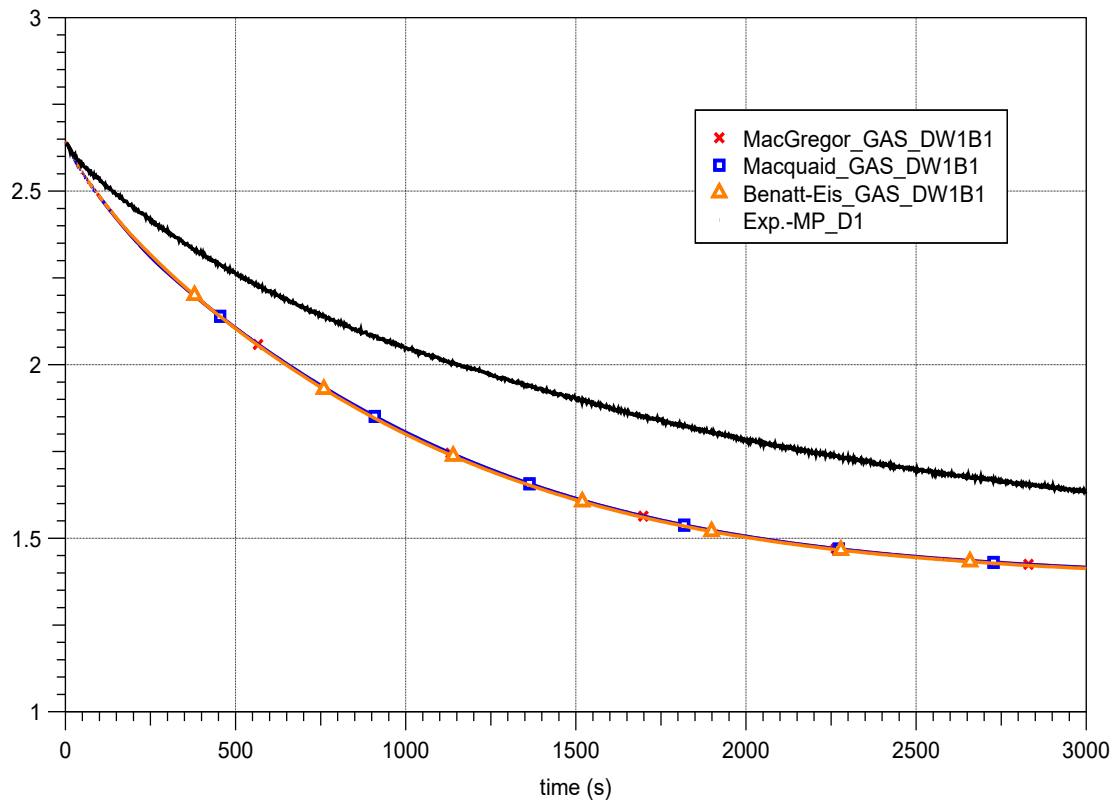


Abb. 2.24 PANDA ST3_2, Vergleich zwischen dem berechneten Druck und dem während des Versuchs gemessenen Druck

Wie zu erkennen ist, nimmt die Druckentlastungsrate mit der Zeit ab. Dies ist auf das allmähliche Aufbrechen der heliumreichen Schicht im oberen Bereich des Behälters 1 und den Anstieg der Konzentration nicht kondensierbarer Gase in den unteren Bereichen infolge der Durchmischung der Behälteratmosphäre zurückzuführen. Der Anstieg der Konzentration nicht kondensierbarer Gase (Luft, Helium) führt wiederum zu einer Verringerung des lokalen Dampfpartialdrucks und der Sättigungstemperatur, was zu einer Verringerung der Kondensations- und Druckentlastungsraten, d. h. zu einer Verringerung des Sprühwirkungsgrads führt. Ein weiterer Faktor, der sich, wenn auch nur geringfügig, auf die Druckentlastungsrate auswirkt, ist die allmähliche Abkühlung des Behälters 1, die die direkte Kühlwirkung des Sprühsystems etwas verringert. Die Anwendung der drei

verschiedenen Entrainment-Korrelationen zeigt in den COCOSYS-Rechnungen keine Unterschiede in den Ergebnissen hinsichtlich der Druckentlastungsrate während des Sprühvorgangs. Am Ende des Sprühvorgangs beträgt der von allen drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechnete Druck etwa 1,4 bar, was etwa 15 % niedriger ist als der im Experiment gemessene Druck. Da sich dies bei allen Rechnungen einheitlich zeigte und die Abweichung kontinuierlich zunimmt, ist dies möglicherweise auf eine Überschätzung der Wärmeverluste des Behälters zurückzuführen.

Die Abb. 2.25 zeigt einen Vergleich der He-Konzentration im oberen Bereich von Behälter 1, die von den drei experimentellen COCOSYS-Entrainment-Korrelationen während des ST3_2-Experiments vorhergesagt wurde. Es ist ersichtlich, dass nach der Sprühaktivierung die hydrodynamische Wechselwirkung zwischen den Wassertropfen und der Gasatmosphäre die heliumreiche Schicht in der Behälterkuppel in relativ kurzer Zeit aufbricht. Alle Entrainment-Korrelationen sagen ein direktes Aufbrechen der Heliumschicht aufgrund des durch die Sprühtröpfchen induzierten Atmosphären-Entrainments voraus.

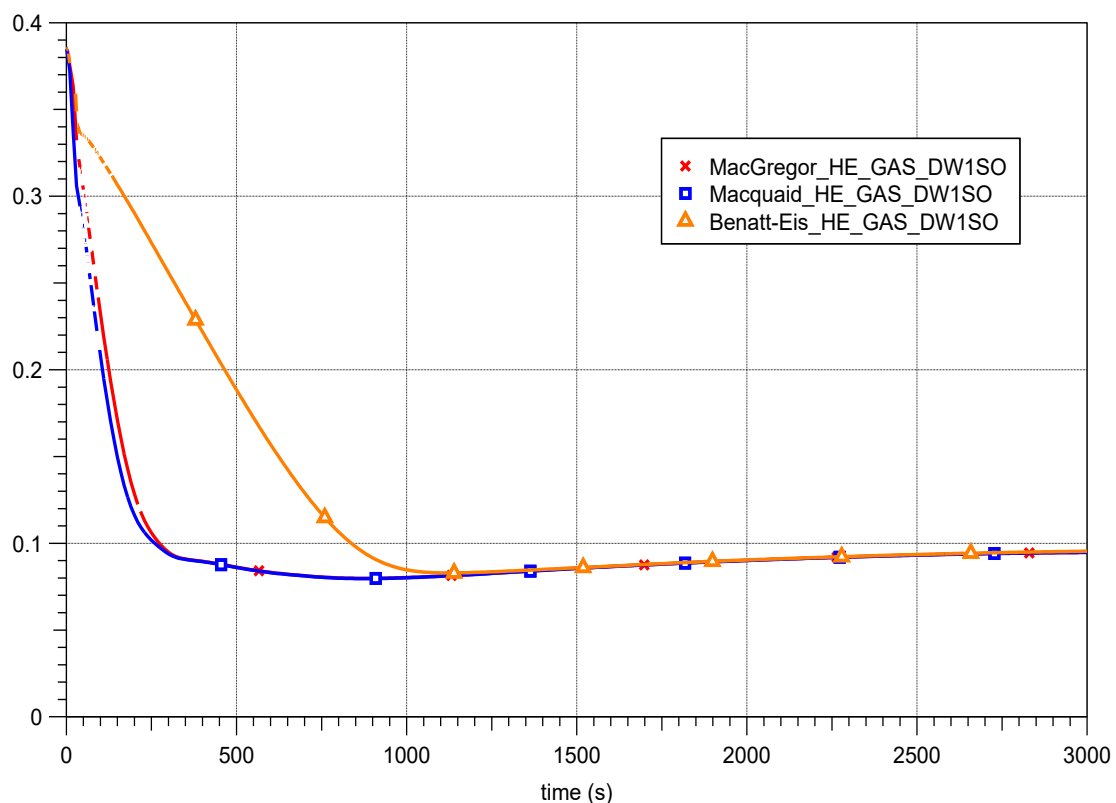


Abb. 2.25 PANDA ST3_2, Vergleich der He-Konzentration in der DW1SO-Zone (Kuppel von Behälter 1), berechnet mit drei verschiedenen COCOSYS-Entrainment-Korrelationen

Die Vergleichsergebnisse der Simulationsvarianten zeigen jedoch Unterschiede in der Zeitskala für das Aufbrechen der Heliumschicht, die von den drei Entrainment-Korrelationen berechnet wurde. Entsprechende experimentelle Daten standen dafür nicht zur Verfügung. Die Simulationsvarianten mit MacGregor- und McQuaid-Korrelationen berechnen den Minimalwert der Heliumkonzentration in der Kuppel bei etwa 500 – 700 s. Dagegen ist in der Simulationsvariante mit Benatt-Eisenklam-Korrelation die Zeit für den Aufbruch der heliumreichen Schicht in der Kuppel etwas länger, d. h., der Minimalwert der Heliumkonzentration wird bei etwa 1.100 s nach der Sprüheinwirkung erreicht. Dies ist auf den geringeren Entrainment-Faktor zurückzuführen, den die Benatt-Eisenklam-Korrelation im Vergleich zu den beiden anderen Entrainment-Korrelationen berechnet. Nach ca. 1.500 s zeigen alle Simulationsvarianten mit Entrainmentberechnung bereits eine identische Heliumkonzentration in der Kuppel von Behälter 1.

Abb. 2.26 zeigt einen Vergleich der Heliumkonzentration unterhalb der Kuppel (DW1A3-Zone), die von den drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen vorhergesagt wurde, mit der Heliumkonzentration, die während des Betriebs des Sprühsystems auf Höhe 5,574 m (D14) gemessen wurde. Zu Beginn ist die anfängliche Heliumkonzentration in der Zone unterhalb der Kuppel nahezu null, da sich die heliumreiche Schicht vor der Sprühaktivierung nur im oberen Bereich von Vessel 1 befindet.

Nach der Sprühaktivierung beginnt die Heliumkonzentration in der Region unterhalb der Kuppel (DW1A3-Zone) aufgrund der durch den Sprühvorgang induzierten globalen Atmosphärenmischung mit der Zeit zu steigen. Langfristig erreicht die Heliumkonzentrationsverteilung einen Wert von etwa 0,1 %, was einer gleichmäßigen Konzentration in Behälter 1 entspricht.

Erwartungsgemäß unterscheiden sich die Ergebnisse der Simulationsvarianten mit MacGregor- und McQuaid-Korrelation von der Benatt-Eisenklam-Korrelation. Die Simulationsvarianten mit MacGregor- und McQuaid-Korrelationen zeigen eine schnellere Durchmischung der Atmosphäre in Behälter 1 im Vergleich zur Variante mit Benatt-Eisenklam-Korrelation. Außerdem liefern sie eine bessere Gesamtübereinstimmung der berechneten Heliumkonzentration in der DW1A3-Zone mit der gemessenen Konzentration während der Anfangsphase der Sprayaktivierung. Dies kann auf die höheren Entrainment-Ströme und die daraus resultierende stärkere Durchmischung der Atmosphäre zurückgeführt werden, die von den beiden Entrainment-Korrelationen zu Beginn des Sprühvorgangs berechnet wurden. Es sei darauf hingewiesen, dass die Kondensation

verglichen mit dem durch den Sprühnebel verursachten Entrainment einen unbedeutenden Einfluss auf die Durchmischung der Atmosphäre hat.

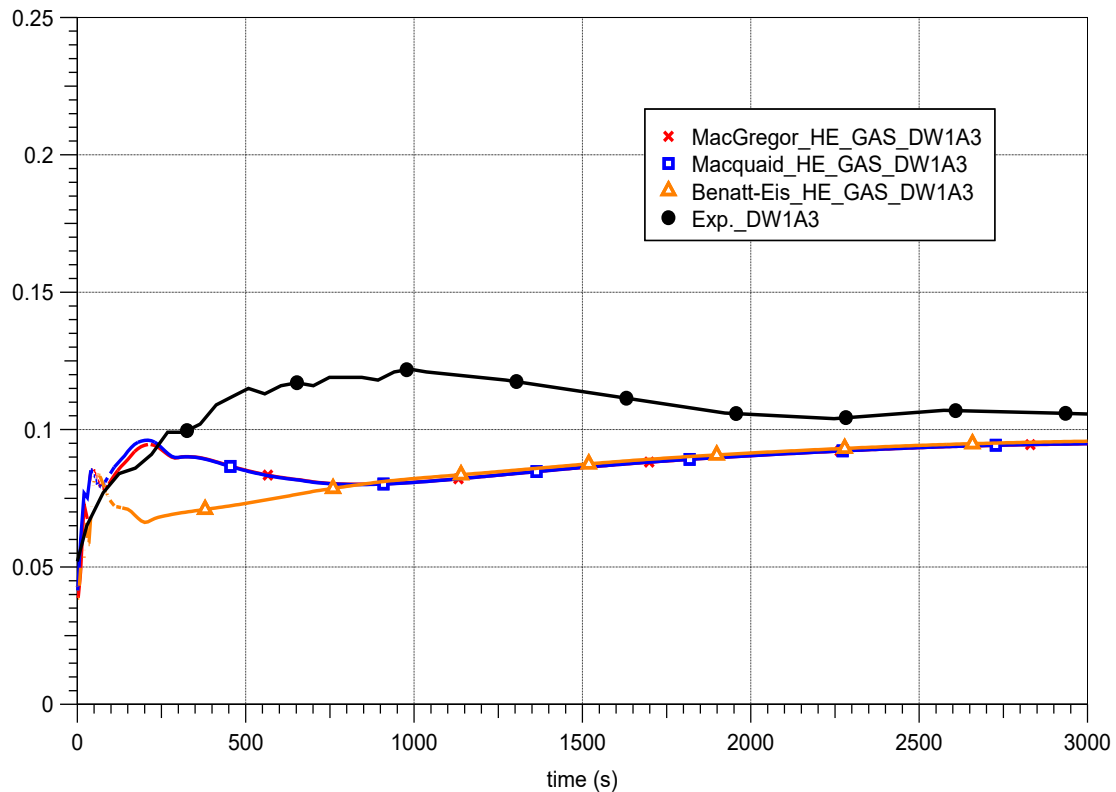


Abb. 2.26 PANDA ST3_2, Vergleich der He-Konzentration in der Zone DW1A3 (unterhalb der Kuppel von Vessel 1), berechnet mit drei verschiedenen COCOSYS-Entrainment-Korrelationen

Im Versuch beginnt die Heliumkonzentration in den betrachteten Zonen nach etwa 1.000 s zu sinken, was auf den Gastransport in der Verbindungsleitung zwischen den beiden Behältern zurückzuführen ist (siehe schwarze Kurve in Abb. 2.26). Zu diesem Zeitpunkt zeigen die Ergebnisse aus allen drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen bereits sehr ähnliche Heliumkonzentrationen in der DW1A3-Zone. Die endgültige Heliumkonzentration wird von allen drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen leicht unterschätzt, verglichen mit der am Ende des Versuchs gemessenen.

Die direkte Abkühlung der Gasatmosphäre durch das Spray führt zu einem Rückgang der Atmosphärentemperatur in Behälter 1. Der obere Bereich (Dom) von Behälter 1 befindet sich oberhalb der Sprühdüse und damit außerhalb des Bereichs, der direkt vom Sprühstrahl beeinflusst wird. Folglich ist der obere Bereich (Dom) des Behälters 1 in weitaus geringerem Maße am Mischungsprozess beteiligt als die unteren Bereiche.

Daher sind die atmosphärischen Temperaturen im Kuppelbereich höher als in den Sprühzonen unterhalb der Düse.

Abb. 2.27 zeigt einen Vergleich der mit den drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten Temperatur in der DW1SO-Zone mit der im oberen Bereich (Dom) des Behälters 1 (MTG_D1B_20 – Mitte und MTG_D1B_22 – rechts auf 7.478 m Höhe) gemessenen Temperatur während des Sprühsystembetriebs im Versuch PANDA ST3_2.

Der Vergleich der COCOSYS-Rechnungen mit dem Experiment zeigt, dass die in der DW1SO-Zone gemessenen atmosphärischen Temperaturen von den Simulationsvarianten mit Mac-Gregor- und McQuaid-Korrelationen unterschätzt werden. Im Gegensatz dazu scheint die Simulationsvariante mit Benatt-Eisenklam-Korrelation die beste Übereinstimmung mit den Temperaturmessungen im oberen Bereich von Behälter 1 zu ergeben. Die atmosphärische Temperatur im oberen Bereich (Dom) wird in hohem Maße durch den Wärmeübergang an den vorgewärmten Behälterwänden beeinflusst.

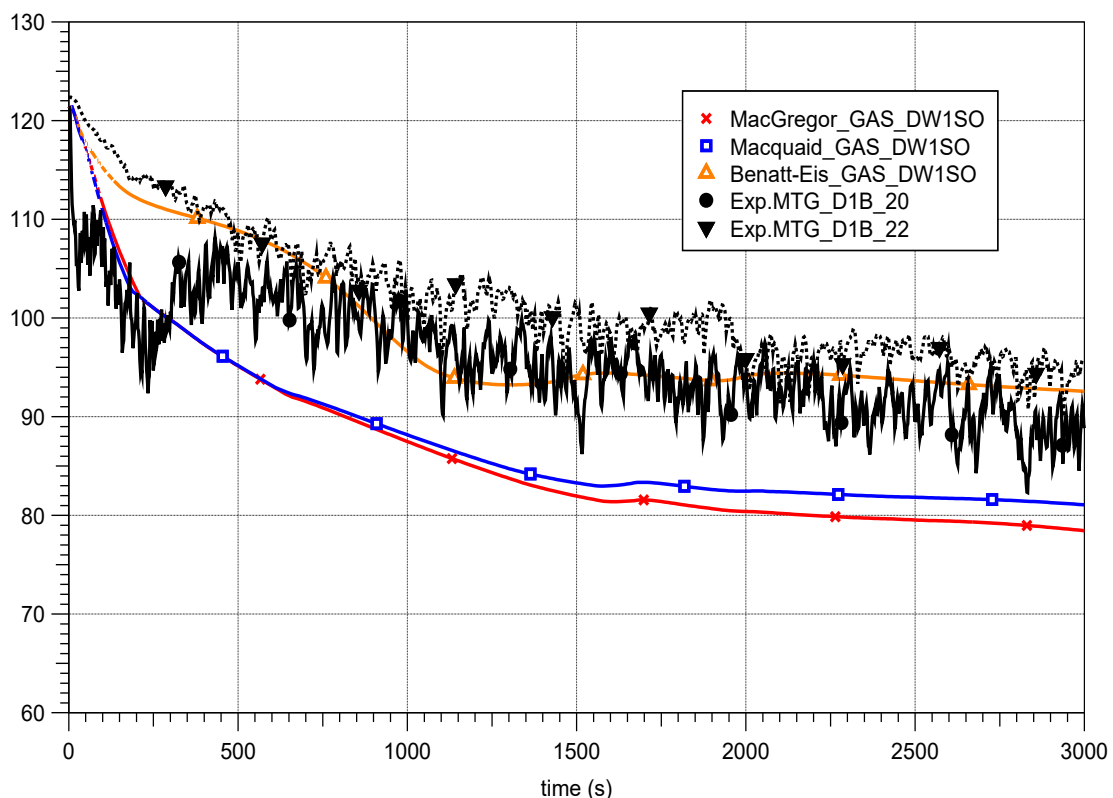


Abb. 2.27 PANDA ST3_2, Vergleich der durch drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten atmosphärischen Temperatur in der DW1SO-Zone mit der im oberen Bereich (Kuppel) von Behälter 1 gemessenen Temperatur

Ein Vergleich der von den drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten Atmosphärentemperatur in der unteren DW1SZ3-Zone mit der in der oberen Region (Kuppel) von Behälter 1 (MTG_D1G_20 – Zentrum auf 5.626 m Höhe) gemessenen Temperatur ist in Abb. 2.28 dargestellt. Der Vergleich zeigt, dass die Ergebnisse aller drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen insgesamt recht gut mit der Temperatur übereinstimmen, die im unteren Bereich unterhalb der Kuppel innerhalb der ersten 1.000 s nach dem Einsetzen des Sprays gemessen wurde. Langfristig wird die gemessene Temperatur im unteren Bereich von allen drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen leicht unterschätzt. Der Grund für diesen Unterschied könnte in den Unterschieden zwischen den berechneten und den experimentellen Dampfkondensationsraten in den Regionen unterhalb der Sprühdüse liegen. Diese Unterschiede könnten wiederum zu Unterschieden in den Konzentrationen nicht kondensierbarer Gase in diesen Bereichen führen, was sich auf den Temperaturgradienten und die Druckentlastungsrate auswirken könnte. Darüber hinaus könnten Unterschiede in den Konzentrationen nicht kondensierbarer Gase auch auf unterschiedliche globale Strömungsmuster zurückzuführen sein, die sich auf die gesamten Prüfbehälter auswirken und im Lumped-parameter-Programm COCOSYS nicht in solchem Detaillierungsgrad wiedergegeben werden können.

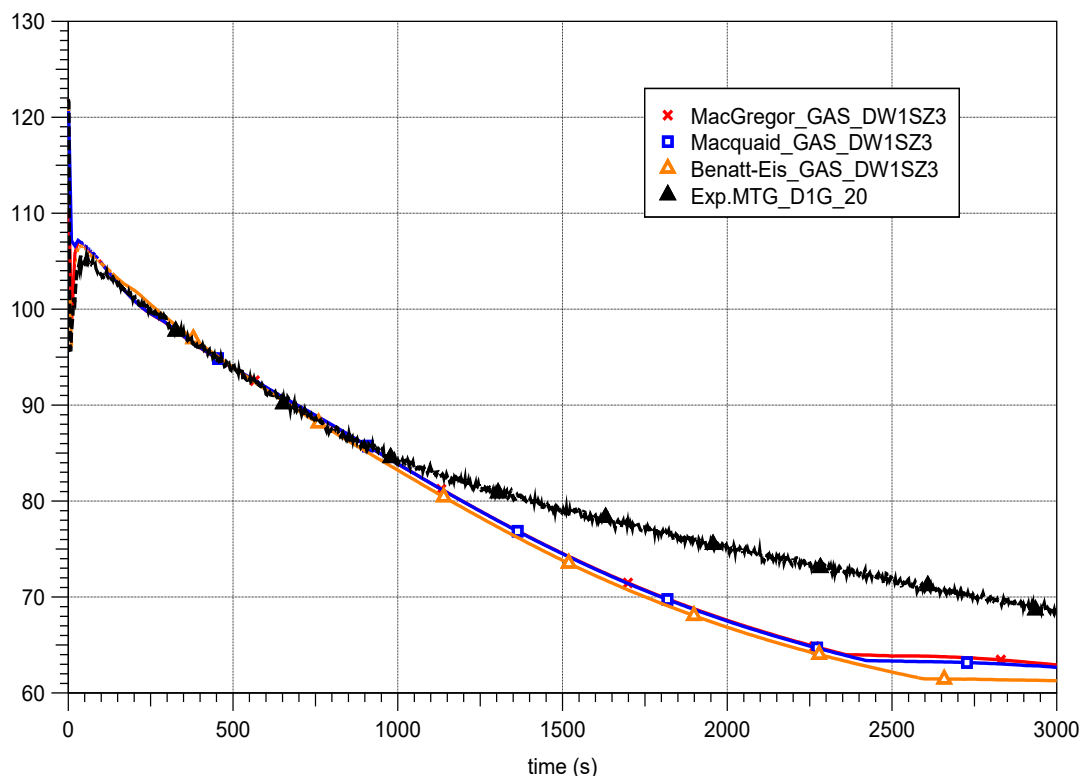


Abb. 2.28 PANDA ST3_2, Vergleich der von den drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten atmosphärischen Temperatur in Zone mit der im oberen Bereich (Kuppel) von Behälter 1

2.1.4.4 Fazit

Die Validierungsarbeiten von COCOSYS wurden durch Nachrechnungen eines Versuchs in der PANDA-Anlage des Paul Scherrer Instituts (PSI), Schweiz, fortgesetzt. Dazu wurde der Test PANDA ST3_2 ausgewählt, bei dem eine Heliumschicht oberhalb einer Dampf-Luft-Atmosphäre durch einen Sprühstrahl aufgelöst wurde. Zur Simulation des Tests wurde das an der Ruhr-Universität Bochum entwickelte und von der GRS in den COCOSYS-Code implementierte Entrainment-Modell angewendet, um den sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitriss (Entrainment) zu berücksichtigen. Dabei wurden die drei empirischen Ansätze von MacGregor, McQuaid und Benatt-Eisenklam, die in dem Modell angewählt werden können, zur Berechnung des Entrainments angewendet. Die ermittelten Druckverläufe für die verschiedenen Korrelationen weisen untereinander nahezu identische Verläufe auf, so dass erwartungsgemäß keine Unterschiede im Versuchsbehälter zu erkennen sind. Bei allen Rechnungen zeigte sich jedoch einheitlich eine zeitlich zunehmende Abweichung zum gemessenen Druck, was möglicherweise auf eine Überschätzung der Wärmeverluste des Behälters zurückzuführen ist. Die Heliumverteilung zeigt, dass die Aktivierung des Sprühvorgangs aufgrund der durchmischenden Konvektionsströmungen korrekterweise zur Auflösung der Heliumschicht führt. Alle drei Korrelationen berechnen infolge des sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitrisses eine direkte Auflösung der Heliumschicht im oberen Bereich des Versuchsbehälters. Im Vergleich zur Benatt-Eisenklam-Korrelation liefern die MacGregor- und McQuaid-Korrelationen eine bessere Übereinstimmung mit der gemessenen Heliumkonzentration zu Beginn des Sprühvorgangs. Dies ist auf die im Vergleich zu der Benatt-Eisenklam-Korrelation höheren Entrainmentströmungen und die daraus resultierende stärkere Behälterdurchmischung zurückzuführen.

Weiterhin wurde festgestellt, dass die im oberen Bereich (Dom) des Versuchsbehälters gemessenen Atmosphärentemperaturen durch die Simulationsvarianten mit MacGregor- und McQuaid-Korrelationen unterschätzt werden. Dagegen zeigen die Ergebnisse der Simulationsvariante mit der Benatt-Eisenklam-Korrelation eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell gemessenen Temperaturen im oberen Bereich des Behälters (Dom). Dieses Verhalten ist maßgeblich auf die niedrige Wärmeübertragung von den Wandstrukturen an die Atmosphäre im Dombereich aufgrund der Anwendung des CO1-Wärmeübergangsmodells in COCOSYS zurückzuführen. Die Berücksichtigung des sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitrisses verbessert die Berechnung der Schichtungsauflösung und somit die Gasverteilung im Versuchsbehälter. Dies zeigt die generelle Eignung des in COCOSYS implementierten Entrainment-Modells zur Simulation

von Wasserstoffverteilungen während des Betriebs von Containment-Sprühsystemen. Die Ergebnisse der Nachrechnungen des PANDA ST3_2-Versuchs sind in einer technischen Notiz dokumentiert worden /BAK 20a/.

2.1.5 THAI TH-35 zur Analyse von Gegenströmungen

Bei Auslegungsstörfällen und Unfällen in Kernkraftwerken können im Containment unter bestimmten Bedingungen gasförmige Gegenströmungen, zum Beispiel in engen Strömungsverbindungen zwischen Räumen, auftreten. Im Rahmen des begleitenden Entwicklungsprojekts /SPE 21/ ist ein neuer Modellansatz in COCOSYS implementiert worden, der eine Näherung der physikalischen Einflüsse in Abhängigkeit der vorherrschenden Strömungsverhältnisse berücksichtigt. Grundlegende Annahme dieses Ansatzes ist, dass aufgrund von Turbulenzen bei gasförmigen Gegenströmungen in engen Strömungsverbindungen erhöhte Druckverluste auftreten können, die das Strömungsverhalten in diesen Verbindungen beeinflussen. In dem Ansatz wird der zusätzliche Effekt durch einen Turbulenzverlustkoeffizienten berücksichtigt, der als Eingabeparameter vom Anwender vorzugeben ist. Aus Vergleichen mit dem CFD-Programm CFX wurde dieser Wert so abgeglichen, dass die Ergebnisse der COCOSYS-Rechnung gut mit der CFX-Rechnung übereinstimmen. Mit dem neuen Modellansatz können lokale Strömungsgeschwindigkeiten genauer simuliert werden. Für eine Validierung sind im Rahmen des THAI-VII-Programms dazu Gegenströmungsversuche (THAI TH-35 und TH-36) geplant und durchgeführt worden. Die Darstellung der Versuchsanlage ist in Abb. 2.29 visualisiert. Bei den Versuchen befindet sich die Versuchsanlage THAI⁺ am Anfang des Versuches in stationärem Zustand und ist nur mit Luft gefüllt. Im TTV-Behälter ist im Test THAI TH-35 Luft eingespeist worden und im THAI TH-36 sind Wasserdampf und Luft eingespeist worden. Im PAD-Behälter wurde zudem Gas entnommen, um einen konstanten Druck zu gewährleisten. Das Einspeisen von Luft, deren Temperatur über derjenigen der Behälteratmosphäre liegt, führt zu einer Strömung von heißer Luft im oberen Teil des Verbindungsrohres vom TTV zum PAD und einer entsprechenden Gegenströmung im unteren Teil des Verbindungsrohres. Je nach Einspeiserate sind verschiedene Strömungsprofile zu erwarten (Abb. 2.30).

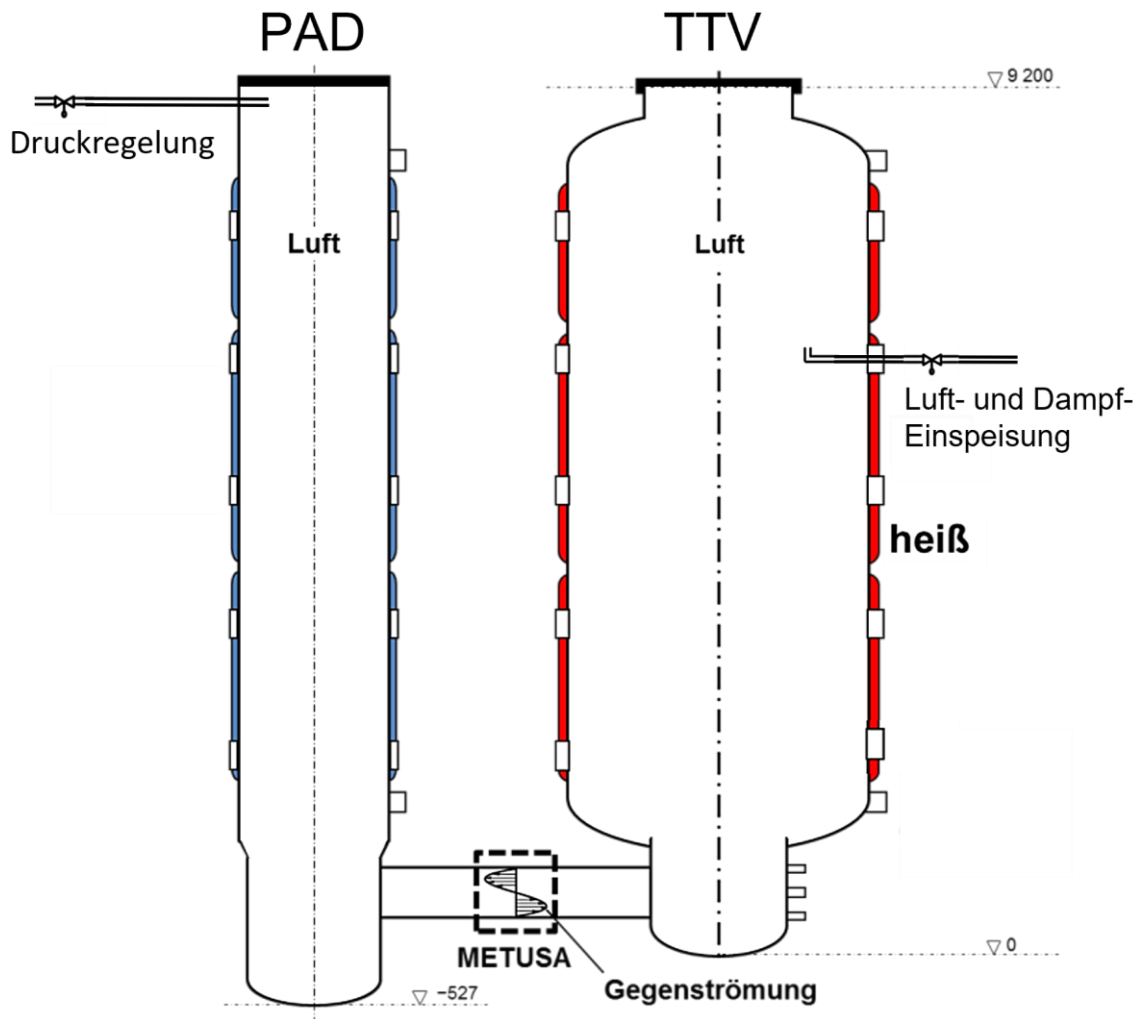


Abb. 2.29 THAI TH-35, Schema der Testkonfiguration der Versuchsanlage THAI⁺



Abb. 2.30 Geschwindigkeitsprofile bei Gegenströmung – laminare Strömung, teilweise turbulente Strömung und voll ausgebreitete turbulente Strömung

2.1.5.1 COCOSYS-Datensatz

Um Becker Technologies in der Versuchsplanungsphase zu unterstützen und das Modell für Druckverluste aufgrund turbulenter Effekte in COCOSYS zu analysieren, ist ein COCOSYS-Datensatz zum Test THAI TH-35 erstellt worden (vgl. Abb. 2.31).

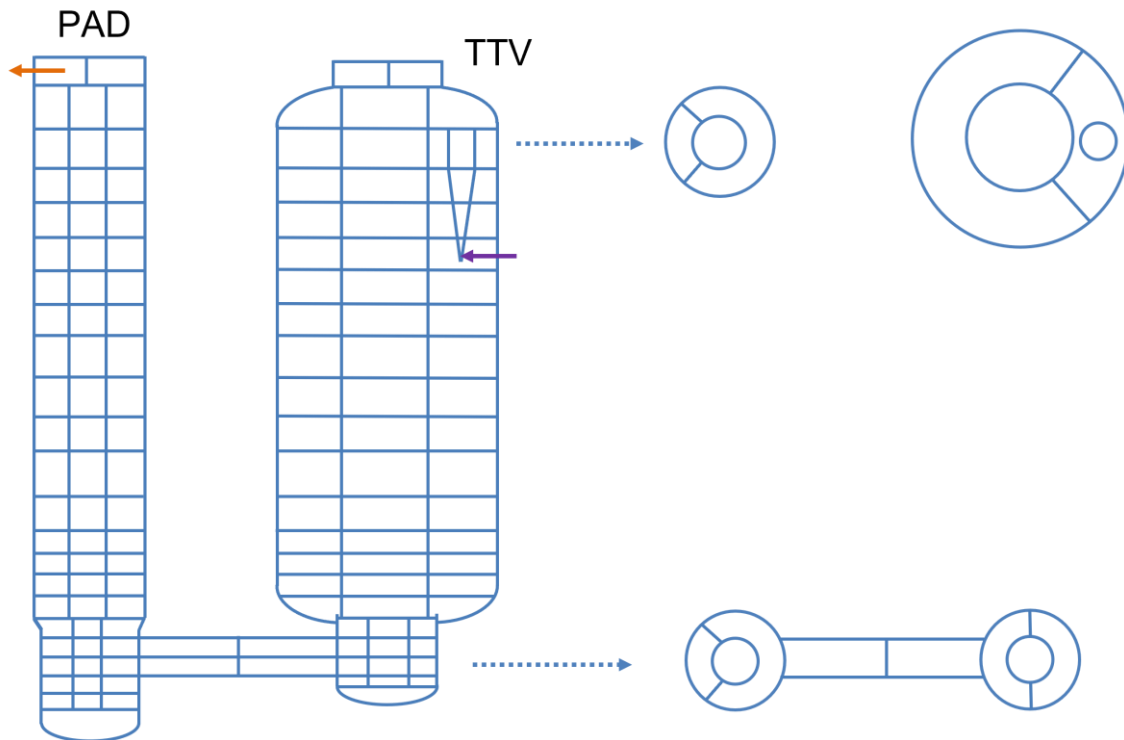


Abb. 2.31 THAI TH-35, COCOSYS-Nodalisierung für die Voruntersuchungen zum Gegenströmungsversuch

Strömungsprofile, Entwicklung von Strukturtemperaturen, Gastemperaturprofile und Kondensationseffekte wurden für einige ausgewählte Randbedingungen untersucht. Vorbereitungs- und Versuchsphase wurden detailliert simuliert und analysiert. Die Gasgeschwindigkeiten im Verbindungsrohr mit und ohne Anwendung des Modells für Druckverluste aufgrund turbulenter Effekte sind für den Test THAI TH-35 in Abb. 2.32 dargestellt. Da die Rechnungen in Vorbereitung des geplanten Benchmarks durchgeführt worden sind, sind die Geschwindigkeitsprofile anonymisiert dargestellt.

2.1.5.2 Simulationsergebnisse

Sowohl die Vorkonditionierungsphase als auch die drei Versuchsphasen wurden simuliert. In der Vorstudie zu TH-35 wurde heiße Luft mit verschiedenen Einspeiseraten in den TTV eingespeist. Die Simulationsergebnisse ohne Anwendung des Druckverlustmodells sind mit durchgezogenen Linien abgebildet. Die Simulationsergebnisse mit

aktiviertem Druckverlustmodell sind mit unterbrochenen Linien abgebildet. Die Voruntersuchungen zeigen eine stabile Gegenströmung für die vorgeschlagenen Anfangs- und Randbedingungen. Der Effekt des Druckverlustmodells mit dem ausgewählten Modellparameterwert von 0,25 ist klein. Die größten Unterschiede sind in der zweiten Versuchsphase aufgetreten. Weitere Analysen sind im Rahmen der Beteiligung an einem Benchmark in einem nachfolgenden Vorhaben geplant.

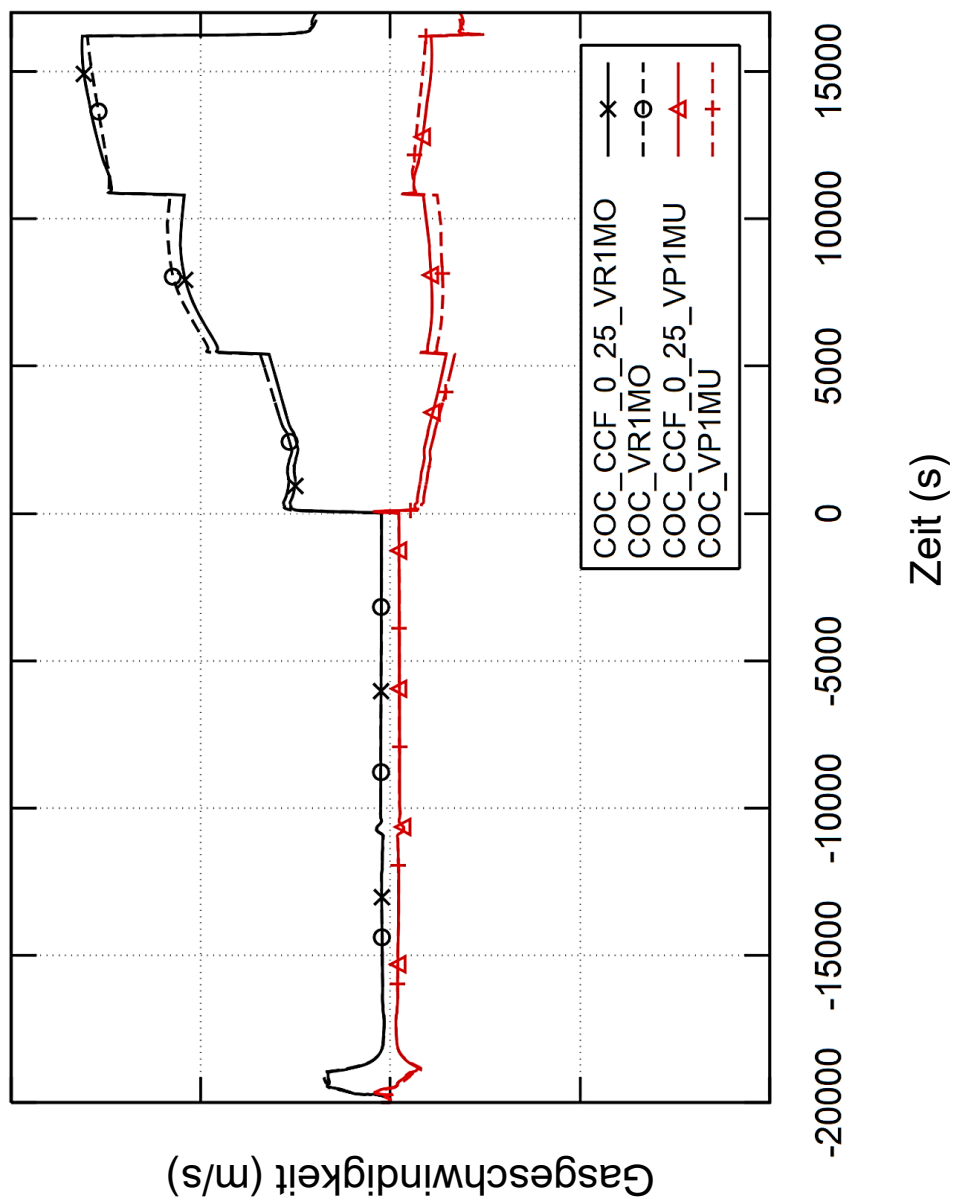
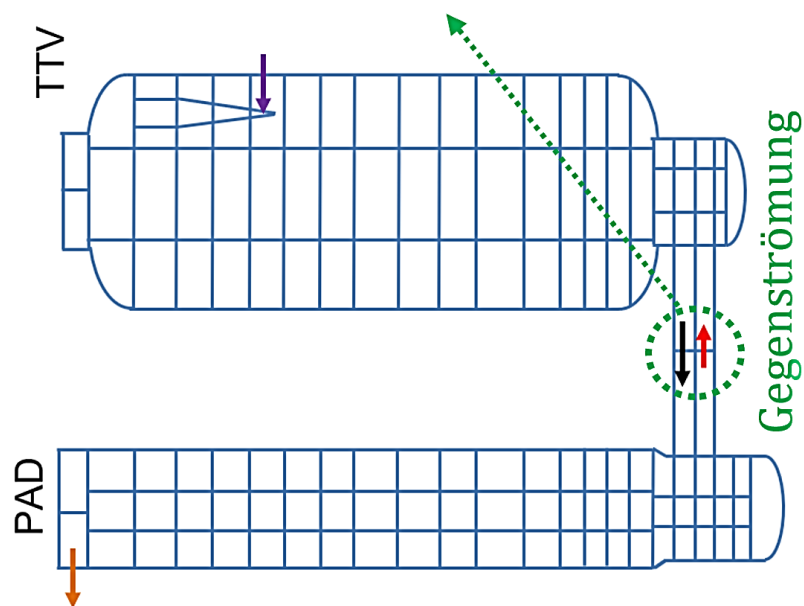


Abb. 2.32 THAI TH-35, Gasgeschwindigkeitsprofile (anonymisierte Darstellung) im Verbindungsrohr mit und ohne Verluste aufgrund turbulenter Effekte

2.2 Validierung der Iod- und Aerosolmodellierung in NewAFP

Das in der Entwicklung befindliche Modul NewAFP zur Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens einschließlich Iod wird entsprechend seines Entwicklungsstandes stetig validiert. Die Auswertung fließt dann regelmäßig in die Entwicklung ein, um aufgetretene Inkonsistenzen und Probleme zu beseitigen.

2.2.1 OECD THAI-3 Iod-32

Der THAI-Versuch Iod-32 ist im November 2017 in der THAI⁺-Versuchsanlage im Rahmen des OECD/NEA-THAI-3-Projekts durchgeführt worden /FUN 18/. Ziel des Versuchs THAI Iod-32 war die Untersuchung der Freisetzung von flüchtigem Iod (I_2) aus einem siedenden Sumpf bei erhöhter Temperatur.

Der Versuch begann mit einer Referenzphase unter nicht-siedenden Bedingungen, in der Elementariod (I_2), radioaktiv markiert mit I-123, in das Sumpfwasser des PAD eingespeist wurde. Außerdem wurde eine kleine I_2 -Menge (zwischen 0,5 % und 5 %) innerhalb von 2,5 Stunden in die PAD-Atmosphäre freigesetzt. Der weitaus überwiegende Teil des I_2 im Wasser wurde durch Reaktion mit der Stahlwand des PAD-Sumpfs in nicht-flüchtiges Iod umgewandelt.

Vor Beginn der zweiten Phase wurde nochmals I_2 in den PAD-Sumpf eingespeist. Danach wurde der PAD-Sumpf durch eine fünfminütige Druckentlastung zum Sieden gebracht. Im Anschluss wurde der isobare Siedezustand durch eine zehnminütige Dampfeinspeisung in den Sumpf aufrechterhalten. Die Gasatmosphäre aus dem PAD strömte während der Druckentlastung und der Dampfeinspeisung in den TTV. Dies führte zur Freisetzung von I_2 aus dem Sumpfwasser, die I_2 -Freisetzung wurde dabei gegenüber der I_2 -Freisetzung in nicht-siedenden Bedingungen in der Referenzphase um etwa einen Faktor 10 erhöht.

Neben begleitender Auslegungsrechnungen ist dieser Versuch im aktuellen Vorhaben mit NewAFP berechnet worden.

2.2.1.1 Versuchsbeschreibung

Der eigentliche Versuch ist im PAD-Behälter der THAI⁺-Anlage durchgeführt worden. Dort befand sich ein Sumpf, in den Elementariod eingespeist worden ist. Der TTV-

Behälter diente lediglich als Entlastungsvolumen über ein Ventil in der oberen Verbindungsleitung zwischen PAD und TTV. Der Versuchsaufbau ist in Abb. 2.33 dargestellt.

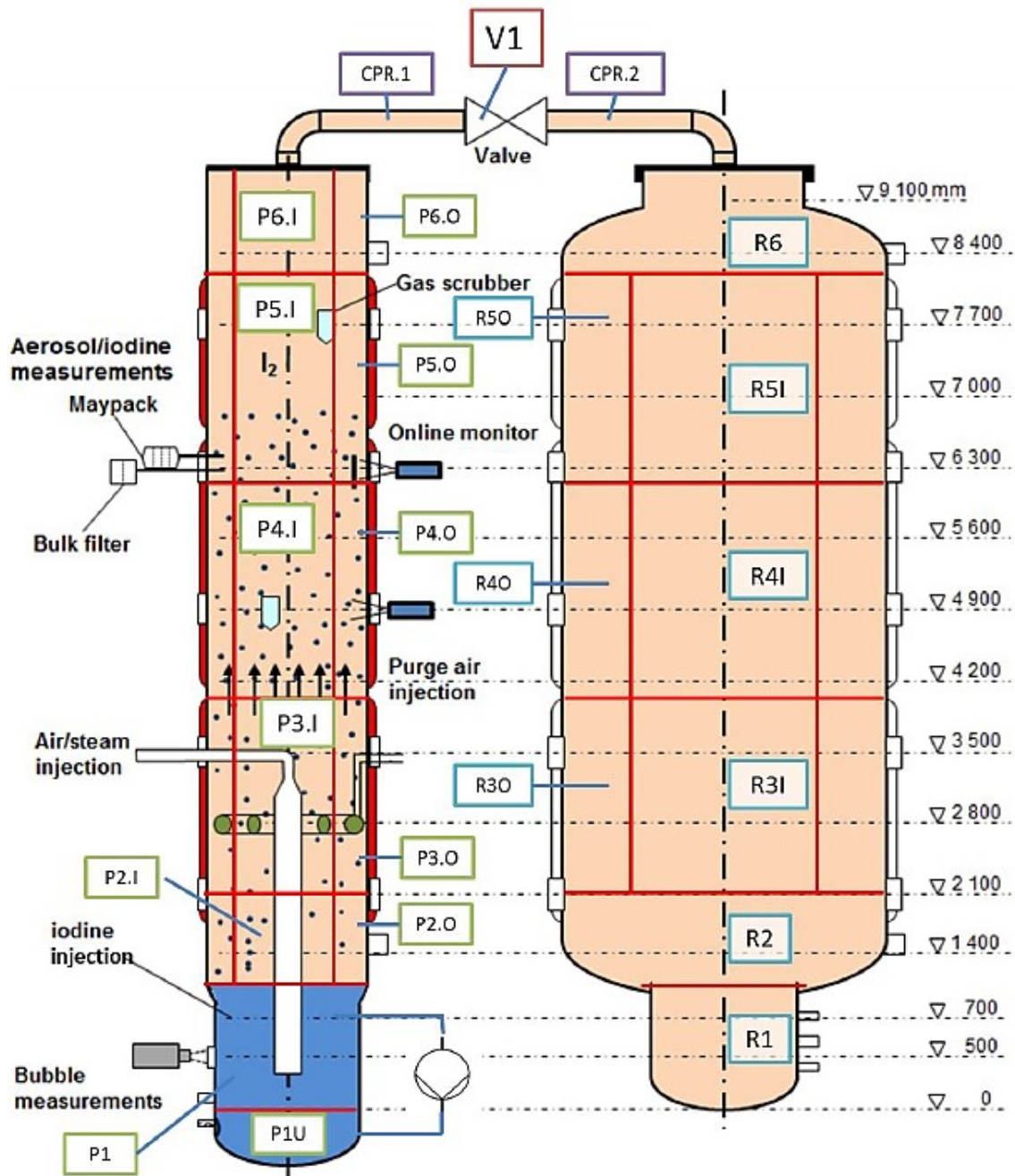


Abb. 2.33 THAI Iod-32, Aufbau des Versuchs in der THAI⁺-Anlage und COCOSYS-Nodalisierung

Über ein Tauchrohr ist ein Luft-Dampfgemisch in die iodhaltige Wasservorlage eingespeist worden. Das Wasser im Sumpfbereich wird über eine externe Pumpe ständig

umgewälzt. Über den Massentransfer nach dem Henry-Gesetz steht im Sumpfwasser gelöstes I_2 mit I_2 in der Gasphase im Gleichgewicht. Während der Druckentlastungsphasen wird das Ventil V1 geöffnet und die ausströmende Luft führt zu einer Druckentlastung im PAD, mit der der Sumpf zum Sieden gebracht wird. Die Iodkonzentrationen werden im Wasser als auch in der Atmosphäre gemessen, um den veränderten Massentransfer unter siedenden Bedingungen zu bestimmen.

Vorausgehend zum eigentlichen Versuch wurde eine 52 h lange Präparationsphase durchgeführt, in der die thermodynamischen Randbedingungen der THAI⁺-Anlage eingestellt worden sind. Der eigentliche Versuch startet mit einem Druck von 2,1 bar im PAD und wird in den Druckentlastungsphasen auf 1,3 bar reduziert. Insgesamt ist der Versuch in 3 Phasen unterteilt, die in Tab. 2.2 erläutert werden.

Tab. 2.2 THAI Iod-32, Versuchsphasen

Testphase	Beginn (h)	Zustand
1	0,000	Erste I_2 -Einspeisung; kein Sieden; pH = 3
2	2,583	Zweite I_2 -Einspeisung; Sieden durch Ventilöffnung von 2,833 h – 3 h; Dampf Einspeiserate = 5 g/s; pH = 3
3	4,281	Sieden durch Ventilöffnung von 5,083 h – 5,333 h; Dampf Einspeiserate = 20 g/s; pH = 8

Die erste Versuchsphase dient als Referenzphase ohne siedende Bedingungen. Der pH-Wert wird auf 3 geregelt, damit die Iod-Hydrolyse nicht das gelöste I_2 im Sumpf zu Iodat (I^-) verbraucht. In der zweiten Phase wird über eine Druckentlastung durch das Öffnen des Ventils in den TTV und eine zusätzliche Dampfeinspeisung ein siedender Sumpf eingestellt. In der dritten Versuchsphase wird der pH-Wert auf 8 erhöht, um das im Wasser gelöste I_2 durch Hydrolyse zu I^- zu verbrauchen.

Eine Schwierigkeit des Versuchs im THAI-Behälter besteht durch die Stahloberflächen im Sumpfbereich des PAD. Auf diesen lagert sich das I_2 ab, weshalb in der zweiten Versuchsphase erneut I_2 in den Sumpf gegeben werden muss. Daher lassen sich im Sumpf keine konstanten I_2 -Konzentrationen einstellen.

2.2.1.2 Simulationsergebnisse

In NewAFP wird der Massentransfer in einem Zweischichtmodell der Grenzfläche zwischen der Wasseroberfläche und der Gasphase berücksichtigt. Der gesamte

Massentransferkoeffizient k_{tot} lässt sich dann aus einem wasserseitigen Transferkoeffizienten k_W und einem gasseitigen Transferkoeffizienten k_G ermitteln (Abb. 2.34, Gl. 2.1).

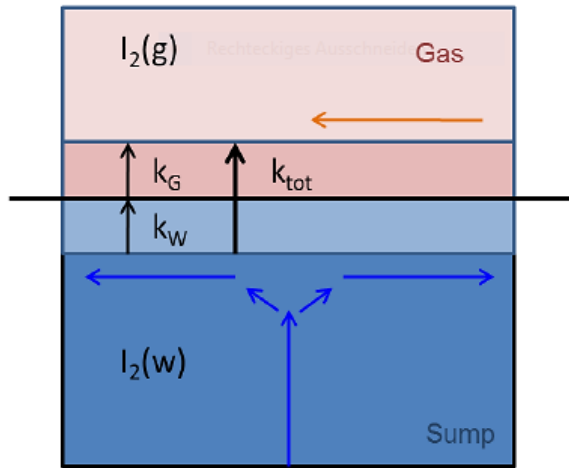


Abb. 2.34 THAI Iod-32, Schemazeichnung des Massentransfers von I_2

Der langsamere der beiden Prozesse ist der geschwindigkeitsbestimmende, wie in der Berechnung deutlich wird.

$$\frac{1}{k_{tot}} = \frac{1}{k_W} + \frac{P(I_2)}{k_G} \quad (2.1)$$

Dabei ist $P(I_2)$ der sogenannte Partitionskoeffizient, der eine temperaturabhängige Größe der jeweils betrachteten Spezies ist. Während der in NewAFP-AIM vorgesehene Standardwert $1 \cdot 10^{-5}$ m/s beträgt, wird in dieser Rechnung ein Wert von $2,5 \cdot 10^{-4}$ m/s für durchmischte Pools verwendet.

Die Nodalisierung des COCOSYS-Eingabedatensatzes ist in Abb. 2.33, durch rote Linien gekennzeichnet. Im PAD-Bereich werden 11 Zonen verwendet, wobei außerhalb des Sumpfbereichs in einen inneren Volumenanteil und einen äußeren Wandanteil unterteilt wird. Der TTV wird durch 9 Zonen modelliert, wobei dieser nur als atmosphärische Senke dient. Die nachfolgend dokumentierten Ergebnisse beziehen sich deshalb auch nur auf den PAD-Behälter.

Ergebnisse

Zunächst werden die thermodynamischen Randbedingungen im PAD diskutiert. In Abb. 2.35 ist die berechnete Druckentwicklung im PAD (NewAFP_GAS_P5.I) aufgetragen. Für den PAD ist auch ein Vergleich mit einer Messkurve (exp_PAD pressure) gegeben. Informationshalber ist auch der Druck im TTV geplottet (NewAFP_GAS_R4I).

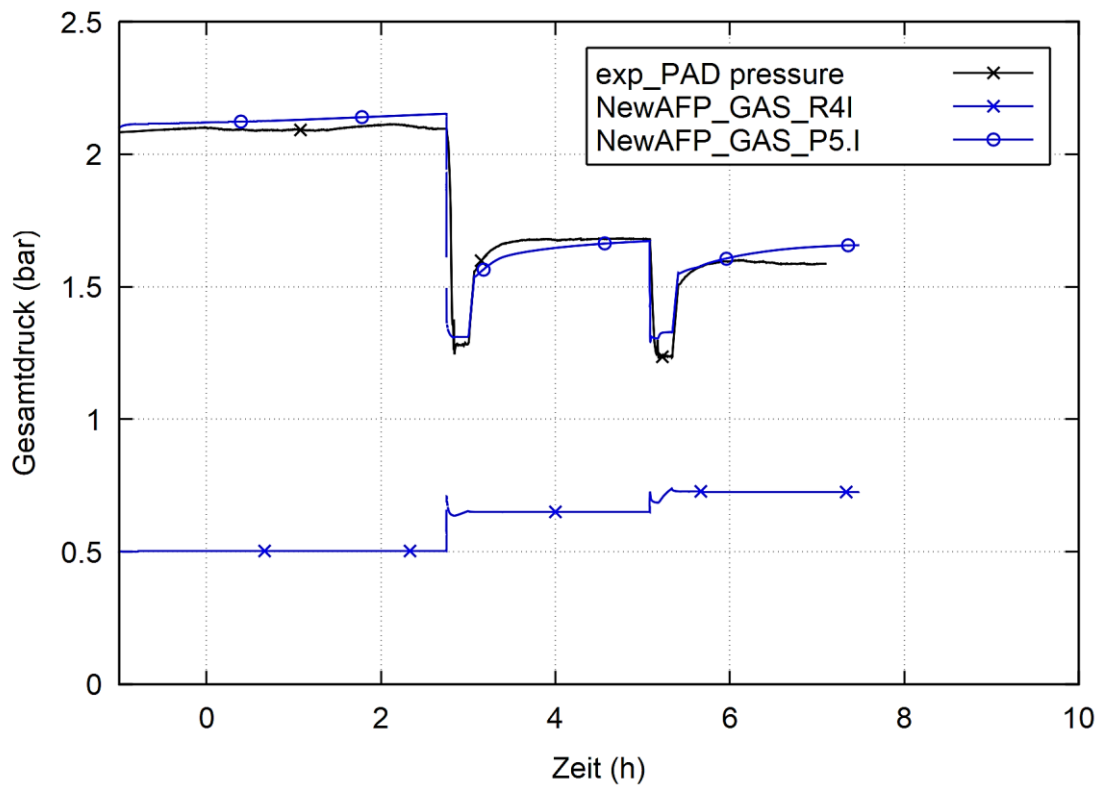


Abb. 2.35 THAI Iod-32, Gesamtdruck

In der ersten Versuchsphase wird der Druck im PAD konstant bei 2,1 bar gehalten. Nach Beginn der zweiten Phase wird der Druck im PAD auf 1,3 bar entlastet, wodurch der Sumpf zum Sieden gebracht wird. Der TTV wird dazu in der ersten Phase auf einen Unterdruck von 0,5 bar gehalten. Nach Öffnen des Ventils erhöht er sich auf etwa 0,6 bar. Nach dem Schließen steigt der Druck im PAD wieder auf 1,6 bar an. In der dritten Versuchsphase wird das Ventil erneut geöffnet, was an einem erneuten Druckabfall im PAD zu erkennen ist. Der Vergleich mit der experimentellen Kurve zeigt nur geringe Abweichungen kleiner als 0,1 bar, was hinreichend ist, um die Randbedingungen für die chemische Rechnung zu gewährleisten.

Die Temperaturen in der Gas- und Wasserphase im PAD werden in Abb. 2.36 zwischen experimentellen und berechneten Werten verglichen. Dabei ist die experimentelle Kurve ein Mittelwert über die gemessenen Temperaturen über die Höhe des PAD.

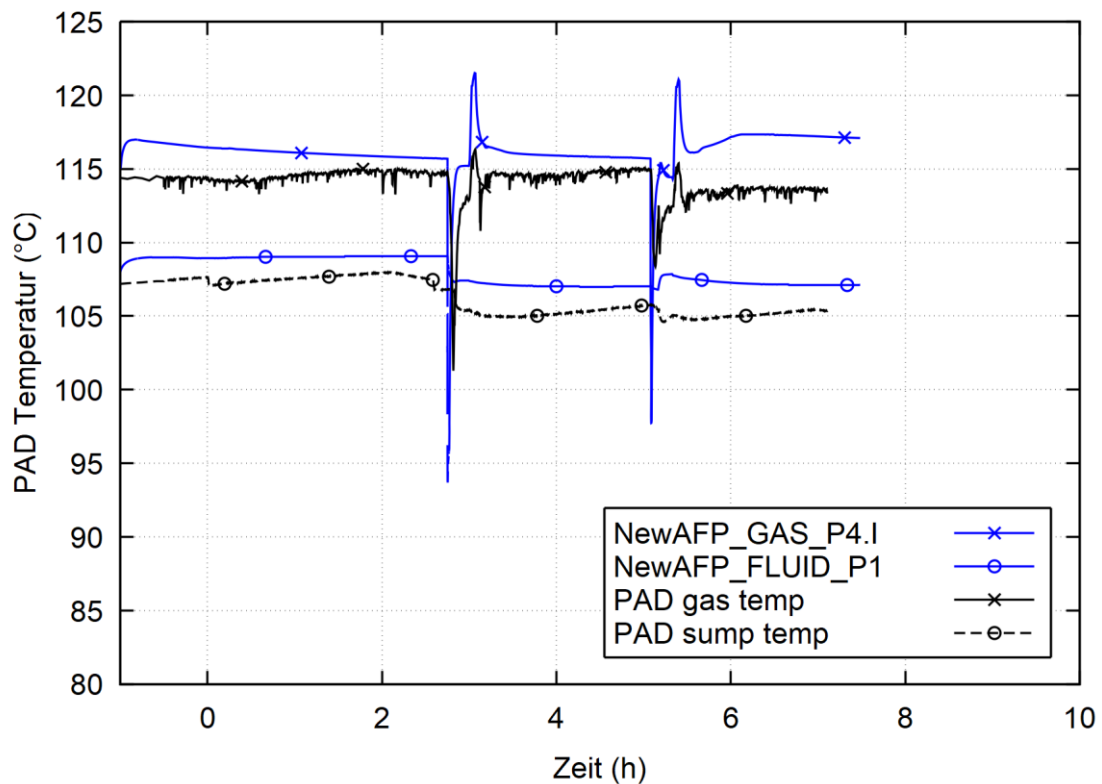


Abb. 2.36 THAI Iod-32, Temperaturen im PAD, Wasser und Gasphase

Die Wassertemperatur beträgt zu Beginn etwa 107 °C. In den Phasen mit Druckabbau nimmt diese nur geringfügig ab – in der ersten auf etwa 105 °C und in der zweiten sogar noch geringer. Die Atmosphärentemperatur beträgt in der ersten Phase etwa 115 °C im Mittel. Bei der Druckentlastung fällt sie kurzzeitig auf etwa 102 °C und steigt danach schnell wieder an. Nach Schließen des Ventils erholt sie sich nach dem ersten Mal vollständig und beim zweiten Mal steigt sie bis auf 113 °C. Die Temperaturen werden von COCOSYS bereits von Beginn an um etwa 1 – 2 °C überschätzt. Über den Verlauf des Experiments bleibt die Abweichung aber konstant. Die COCOSYS-Temperatur in der Gasphase ist dabei keine gemittelte Temperatur, sondern nur an einer Stelle bestimmt.

Ausgehend von den thermodynamischen Randbedingungen werden nun die chemischen Ergebnisse gezeigt. In Abb. 2.37 wird die Gesamt-Iodmasse über alle Spezies im Sumpfwasser dargestellt. Dabei sind drei verschiedene Messmethoden angewendet worden, über visuelle UV-Methode des I-123 (A Sample), eine Iodid-Elektrode (B Sample) und Auswertung des I-123 Traceriods (C Sample).

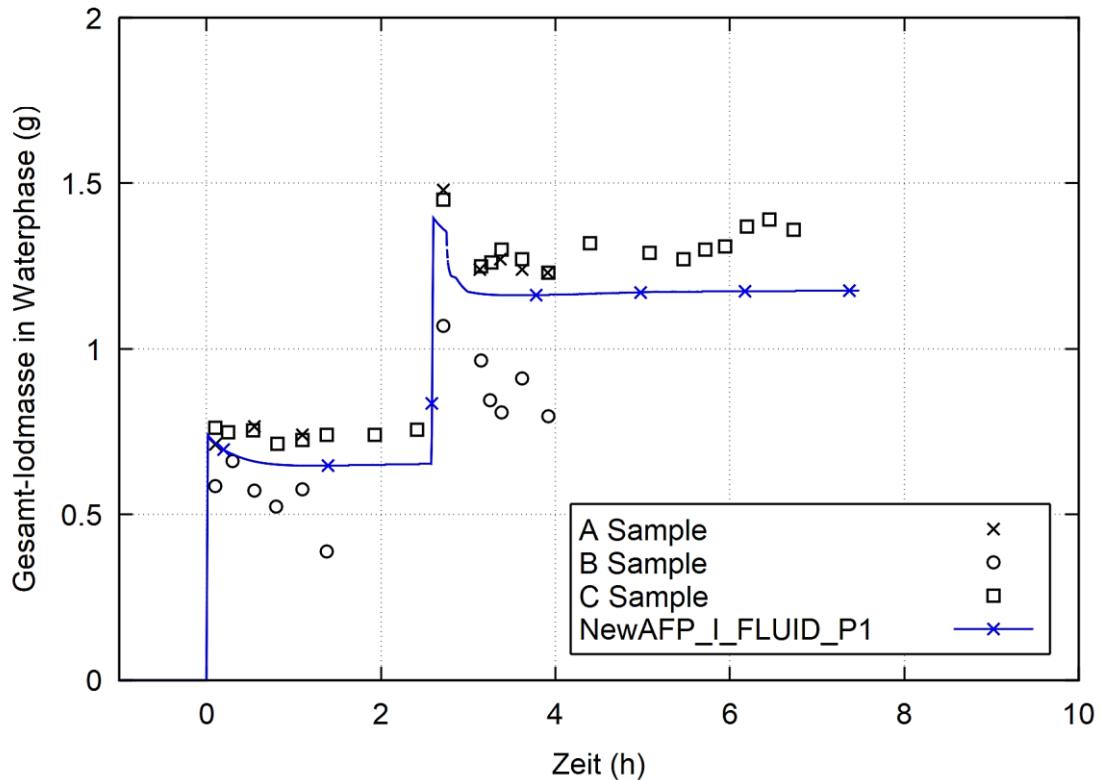


Abb. 2.37 THAI Iod-32, Gesamtiodmasse im Sumpfwasser

Während die B-Probe abnehmende Werte in den Phasen eins und zwei zeigt, bleiben die anderen beiden Methoden weitgehend konstant nach den jeweiligen Einspeisungen. Das lässt darauf schließen, dass die Iodid-Elektrode kein charakteristisches Gesamtiodspektrum aufnimmt. Prinzipiell berechnet NewAFP die enthaltene Iodmenge gut. Nur ein kleiner Teil wird abgebaut oder entweicht in die Atmosphäre.

Da das elementare Iod aber gasförmig und damit sehr leicht flüchtig ist, reicht schon ein geringer Anteil, der in die Atmosphäre entweicht, um den Quellterm zu erhöhen. Da die Stahloberflächen im Sumpfbereich in diesem Experiment als zusätzliche Senke dienen, ist in Abb. 2.38 die im Sumpfwasser verbleibende Masse der I_2 -Spezies aufgetragen.

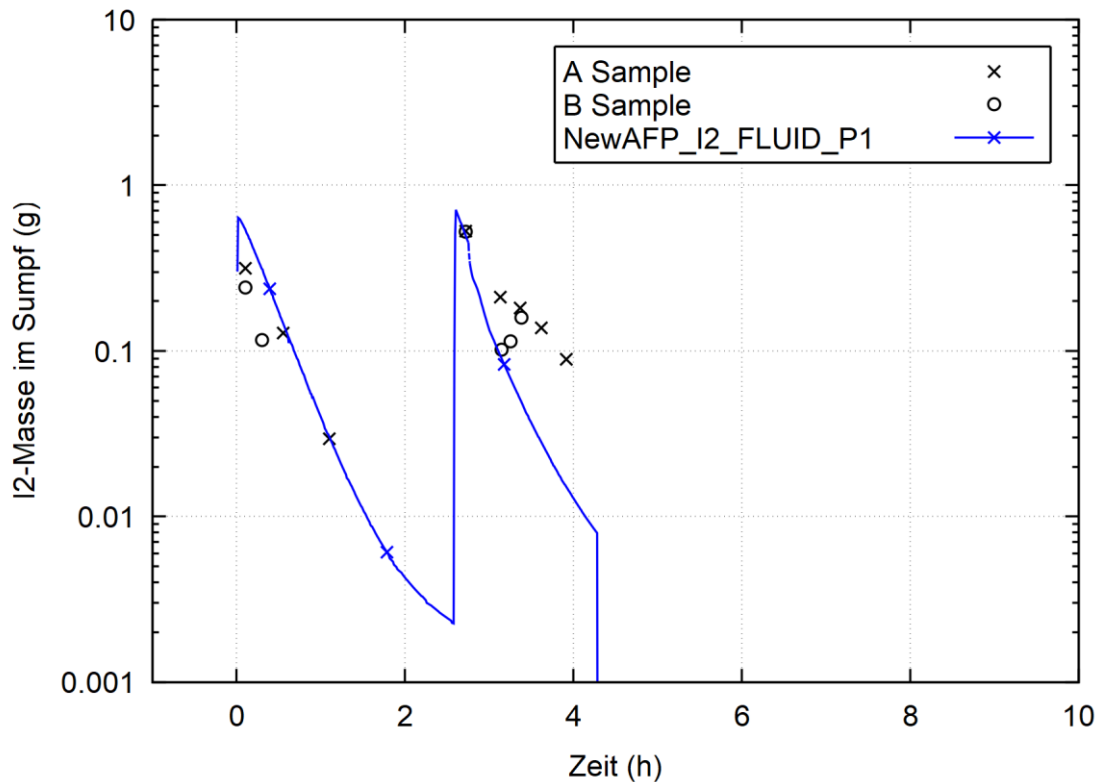


Abb. 2.38 THAI Iod-32, I₂-Masse im Sumpfwasser

Im Sumpfwasser nimmt nach der ersten Einspeisung von 0,73 g das enthaltene I₂ innerhalb einer Stunde auf einen Wert von 0,03 g ab. Nach der zweiten Einspeisung wird dieselbe Menge im Wasser freigesetzt und nimmt dort etwas langsamer auf einen Wert von 0,1 g ab. Die NewAFP-Rechnung berechnet den beinahe exponentiellen Abfall in der ersten Phase sehr gut. In der zweiten Phase unterschätzt NewAFP den in dem Sumpf verbleibenden Anteil. Die Abnahme erfolgt durch die Ablagerung auf den Stahloberflächen im Sumpf, die Hydrolyse zu I⁻ und den eigentlich zu beobachtenden Massentransfer in die Atmosphäre an der Wasseroberfläche.

Die I₂-Konzentration in der Atmosphäre des PAD ist in den Höhen 4,0 und 7,7 m gemessen worden. Ein Vergleich der Messwerte mit den von NewAFP simulierten Werten ist in Abb. 2.39 dargestellt.

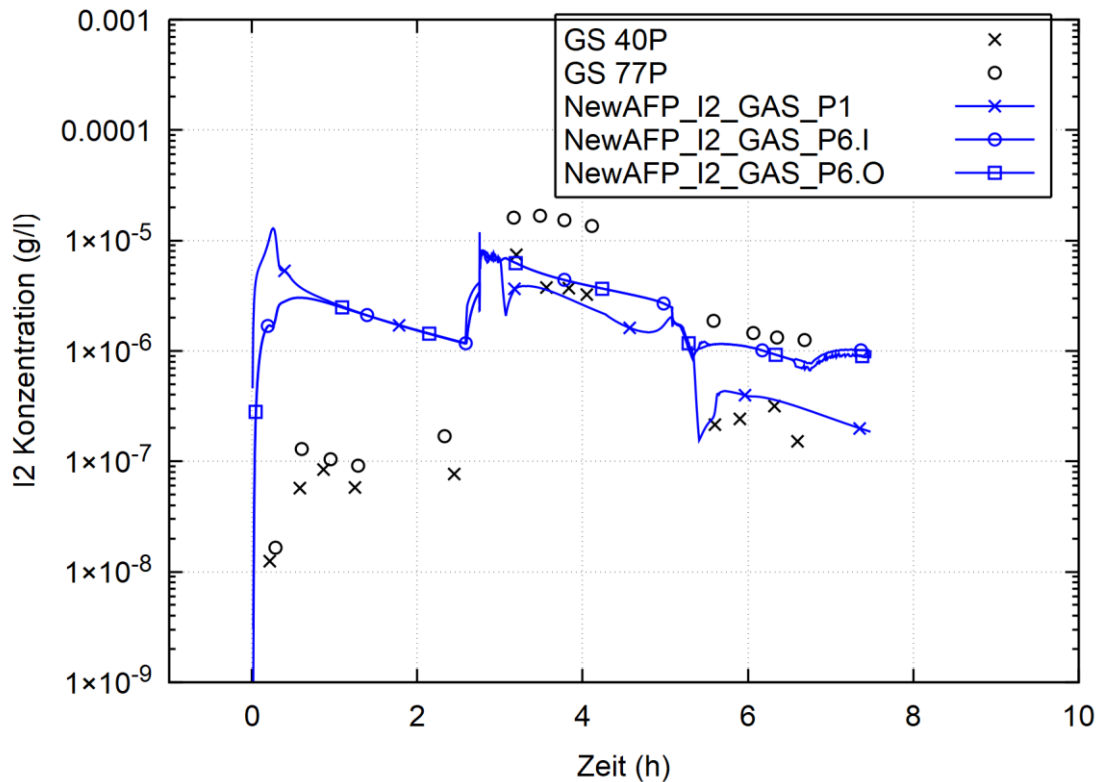


Abb. 2.39 THAI Iod-32, I₂-Konzentration in der Atmosphäre des PAD

Während der ersten Versuchsphase stellen sich Werte im Bereich von $1 \cdot 10^{-7}$ g/l ein. In der zweiten Phase wird hingegen durch die Druckentlastung und das Einspeisen von weiterem Wasserdampf der Sumpf zeitweise zum Sieden gebracht. Infolgedessen kommt es zu einer größeren Freisetzung von I₂ aus dem Sumpf, weshalb die Werte um zwei Größenordnungen auf einen Wert von $1 \cdot 10^{-5}$ g/l steigen. In der dritten Phase wird über den erhöhten pH-Wert die Hydrolyse zu I⁻ verstärkt, weshalb die I₂-Menge im Sumpf noch weiter abnimmt. Daher kommt es beim erneuten Sieden nicht zu einer verstärkten Freisetzung aus dem Sumpf. Die Konzentration fällt hingegen tendenziell etwas auf Werte um $1 \cdot 10^{-6}$ g/l. In der ersten Versuchsphase werden die Werte von NewAFP deutlich um 1,5 Größenordnungen überschätzt. Die zweite Phase mit einem siedenden Sumpf und auch die dritte Phase mit erhöhtem pH-Wert zusätzlich zu einem siedenden Sumpf werden hingegen gut wiedergegeben. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass für die Simulation der ersten Phase doch der k_W -Wert von $1 \cdot 10^{-5}$ m/s die bessere Wahl gewesen wäre.

2.2.1.3 Fazit

Der Versuch Iod-32 ist durchgeführt worden, um den Einfluss eines siedenden Sumpfes auf die Freisetzung von gasförmigem I_2 über den Massentransfer über die Sumpfoberfläche zu bestimmen. Nach der ersten Versuchsphase ohne Sieden nimmt die I_2 -Konzentration in der Atmosphäre des PAD auch um 2 Größenordnungen zu, womit dieser Effekt bestätigt worden ist. Die Rechnung mit NewAFP gibt diesen Verlauf qualitativ richtig wieder. Allerdings wird insbesondere die erste Versuchsphase nicht gut berechnet und der Massentransfer über die Wasseroberfläche stark überschätzt. Der verwendete wasserseitige Massentransferkoeffizient für bewegte Pools scheint für diese Versuchsphase nicht geeignet zu sein, obwohl der Pool durch eine externe Pumpe umgewälzt wird. Der Standardwert in COCOSYS ist deutlich niedriger und bezieht sich auf ruhende Pools. Dieser Wert von $1 \cdot 10^{-5}$ m/s sollte niedrige Freisetzungen in die Atmosphäre liefern und damit die Nachrechnung verbessern.

2.2.2 THAI Iod-37 zur thermischen Stabilität von Iodoxiden (IO_x)

Der Test THAI Iod-37 wurde im Rahmen des OECD/NEA-Projekts THEMIS durchgeführt. Ziel des Versuchs THAI Iod-37 war die Untersuchung der thermischen Stabilität von Iod-Oxiden (IO_x), die durch die Interaktion von molekularem Iod (I_2) mit Ozon (O_3) geformt werden. Die Versuchsrandbedingungen umfassten die Einspeisung von O_3 in den THAI-Versuchsbehälter (THAI Test Vessel, TTV) bis eine ausreichende Konzentration erreicht war, gefolgt von der Einspeisung von mit I-123 radioaktiv markiertem I_2 , um IO_x zu bilden. Anschließend wurde die thermische Stabilität der IO_x -Partikel durch Erhöhung der Behältertemperatur mittels Aufheizung mit den Thermoölmänteln und elektrischer Heizung untersucht. Die Behälteratmosphäre bestand aus einem überhitzten Dampf-Luft-Gemisch mit einer relativen Feuchte von etwa 50 %, welche durch kontrollierte Dampfeinspeisung aufrechterhalten wurde. Die Ergebnisse zeigen, dass die IO_x -Aerosole während des gesamten Versuchszeitraums vorherrschend sind. Weiterhin wurde eine temperaturabhängige Zersetzung der IO_x -Aerosole gemessen. Die Erhöhung des Anteils anorganischer gasförmiger Iod-Spezies in den Maypack-Probenahmen kann als Nachweis für die thermische Zersetzung der IO_x -Aerosole angesehen werden. Diese thermische Zersetzung ist ausreichend, um den konkurrierenden Prozess der I_2 /Stahl-Reaktion, der bei den gewählten thermisch-hydraulischen Bedingungen einen Teil des gasförmigen anorganischen Iods aus der Gasatmosphäre entfernt, zu überblenden.

Die GRS hat sich im Rahmen der Beteiligung an OECD/NEA THEMIS an der Versuchsauslegung beteiligt. Dazu wurden entsprechende Rechnungen mit COCOSYS unter Aktivierung von NewAFP vorab durchgeführt. Um eine qualitative Aussage zur Durchführbarkeit des Versuchs zu ermöglichen, wurden zunächst erste Annahmen zu den Randbedingungen getroffen. Mit Freigabe der Ergebnisse sollen dann in einer späteren Phase auch offene Nachrechnungen zu Iod-37 durchgeführt werden, die dann auch zur Validierung von NewAFP herangezogen werden können. Nachfolgend werden deshalb nur die COCOSYS-Rechnungen vorgestellt und eine qualitative Einschätzung gemacht.

2.2.2.1 COCOSYS-Datensatz

Der COCOSYS-Datensatz für das Experiment THAI Iod-37 wurde auf Basis der Versuchsbedingungen erstellt. In Abb. 2.40 ist links schematisch die Versuchsanordnung und rechts die entsprechende COCOSYS-Nodalisierung gegenübergestellt. Die Nodalisierung besteht aus 15 Zonen, die Einspeisung von I_2 und O_3 erfolgte entsprechend dem experimentellen Aufbau in die oberen Zonen.

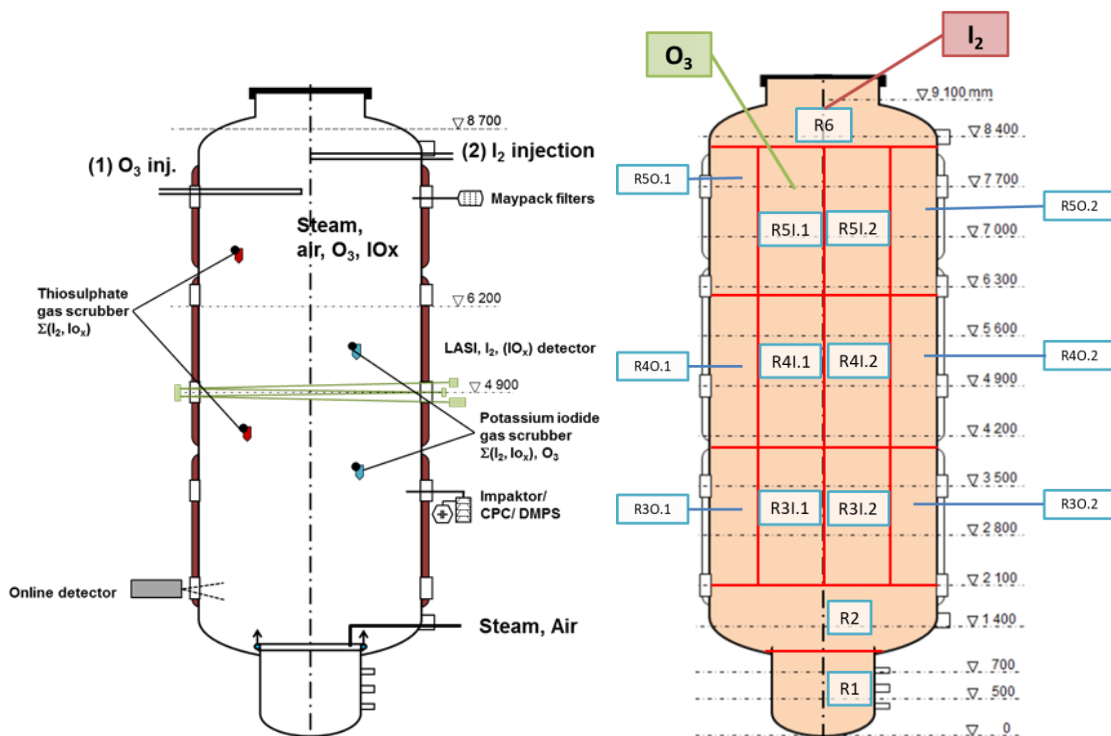


Abb. 2.40 THAI Iod-37, Versuchskonfiguration (links) und COCOSYS-Nodalisierung mit Kennzeichnung der Zonen (rechts)

Um die Stabilität von IO_x bei hohen Temperaturen zu untersuchen, wird die Gastemperatur des Behälters durch die Beheizung der Behälterwand mit Hilfe der Thermoölmäntel,

die auf Temperaturen über 140 °C ausgerichtet sind, kontinuierlich erhöht. Erste Berechnungen wurden ohne atmosphärische Aufheizung durchgeführt, auch die Deckelheizung des THAI-Behälters wurde nicht berücksichtigt.

Tab. 2.3 Randbedingungen für die COCOSYS-Rechnung

Iod-37	Angestrebte Versuchsbedingungen
Druck [bar]	1,5
Temperatur [°C]	80,0
relative Feuchte [%]	50
eingespeiste I ₂ -Masse [g]	1 (in 120 s)
Eingespeiste O ₃ -Masse [g]	30 (in 3 h)

2.2.2.2 Simulationsergebnisse

Die Berechnungsergebnisse zeigen die rasche Bildung von IO_x nach Einspeisung von I₂, gefolgt von einer allmählichen IO_x-Reduktion durch Ablagerung von IO_x auf den Stahloberflächen und anschließender Zersetzung des abgelagerten IO_x aufgrund thermischer Reaktion mit dem Stahl. In zukünftigen Analysen in nachfolgenden Vorhaben sollen dann auch die experimentellen Ergebnisse in die Bewertung einbezogen werden.

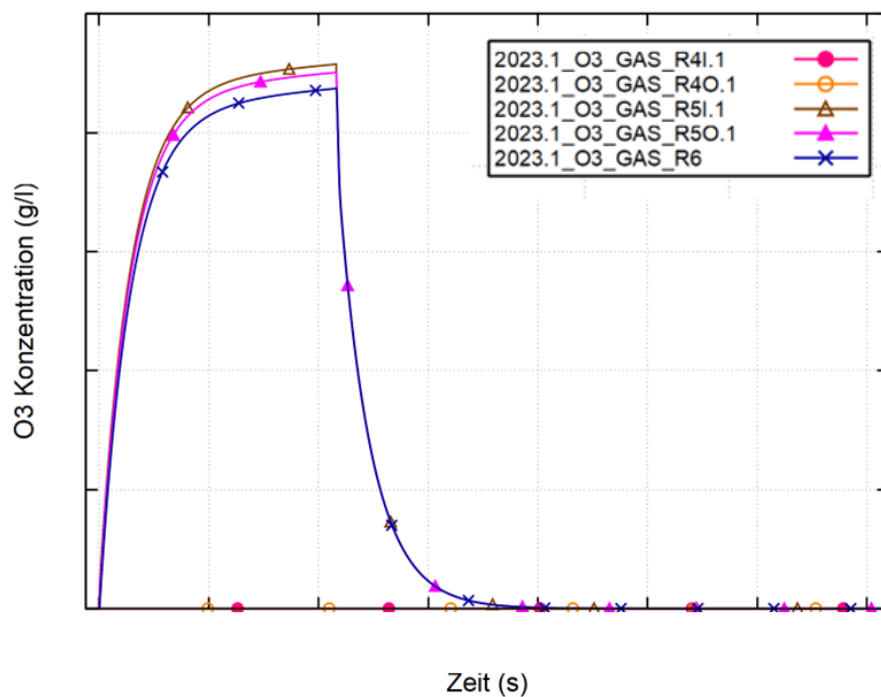


Abb. 2.41 THAI Iod-37, O₃-Konzentration im THAI-Behälter (anonymisierte Darstellung)

2.2.3 THAI Iod-33 zur inhomogenen Ausbreitung von Iod

Ein weiterer Versuch, der dem aktuellen nationalen Programm THAI-VI von Becker Technologies zugehörig ist, ist der THAI-Versuch Iod-33 /FRE 23/. Für den Iod-33 Raumketten-Versuch sind im Vorläufervorhaben Auslegungsrechnungen durchgeführt worden /REI 19a/. Ziel war es zu überprüfen, welche Konfigurationen mit den Farbflächen noch zu ausreichend messbaren Iodkonzentrationen in der THAI-Anlage führen. Der Iod-33 Raumkettenversuch untersucht mit Hilfe einer Langzeiteinspeisung von Iod die Iod-Verteilung und den Iod-Abbau in der Anlage THAI⁺ mit einer umlaufenden Strömung über einen Zeitraum von mehr als 5 Stunden.

Im Rahmen des aktuellen Validierungsvorhabens wurde THAI Iod-33 herangezogen, um die Fortschritte bzw. den Status von NewAFP zu bewerten. In dem Experiment wird Iod in das untere Verbindungsrohr der THAI⁺-Anlage eingespeist, durch eine Temperaturdifferenz von 10 K zwischen dem THAI-TTV und -PAD-Behälter wird eine Konvektionsströmung induziert, die das Iod dann transportiert. Im THAI-Behälter sind durch große mit Dekontfarbe gestrichene Bleche drei Raumbereiche für die nachfolgende Ablagerung geschaffen worden.

2.2.3.1 COCOSYS-Datensatz

Der in der GRS vorliegende Datensatz ist zur Vorbereitung des Experiments erstellt worden, einige Änderungen an NewAFP erforderten Anpassungen am Datensatz (Abb. 2.42). So verlangt NewAFP jetzt nach einer Eingabe, die segmentierte Strukturen erlaubt (oder die Segmentierung bewusst unterbindet). Diese Unterteilung kann für Strukturen, die im Verlauf der Rechnung auch mit Wasser bedeckt werden, wichtig sein, da sich die Wechselwirkungen und Mechanismen im Wasser und in der Luft deutlich unterscheiden und bei Nichtberücksichtigung die Ergebnisse verfälschen.

Nach Vorliegen der Messwerte insbesondere auch zu den im Experiment realisierten Randbedingungen wurde der Datensatz überarbeitet, um die Messwerte besser zu reproduzieren. Einige Strukturen wiesen im Experiment leicht unterschiedliche Temperaturen auf, was zum Teil an im Datensatz fehlender Wärmeleitung lag. Nach einer Überarbeitung der Anfangsbedingungen (besonders Temperaturprofile in den Strukturen) und Anpassungen der Heizleistung sowie leichte Änderungen an der Nodalisierung konnten die Messwerte von der Rechnung deutlich besser reproduziert werden.

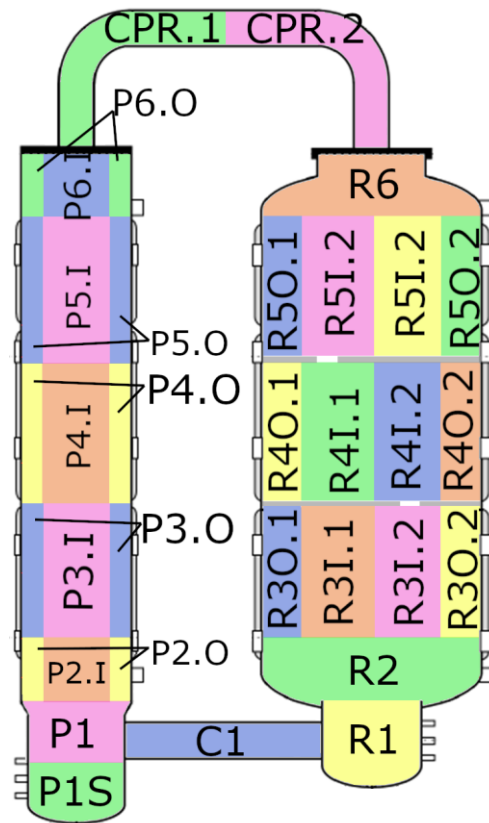


Abb. 2.42 THAI Iod-33, THAI⁺-Konfiguration (PAD links, TTV rechts) mit COCOSYS-Nodalisierung und Kennzeichnung der Zonen

Der THAI-TTV-Behälter ist fein nodalisiert, da die Strömung ohne Wandkontakt stattfinden kann (die Öffnungen haben Abstand zur Wand). Der Bereich um die Zwischenbleche der THAI-Behälter wird durch zwei konzentrische Zylinder abgebildet. Um eine Konvektion innerhalb dieser Kompartments zu erlauben, werden diese Zylinder dann nochmal jeweils in zwei gleich große Hälften unterteilt, so kann sich warmes Gas aus dem Wandbereich mit dem Gas in den mittleren Zylinderhälften vermischen. Der PAD-Behälter wird im Vergleich zum TTV einfacher nodalisiert, mit ebenfalls 7 Ebenen, jedoch werden die oberen 5 Ebenen nur durch einen inneren Zylinder und eine umlaufende Zone mit Kontakt zur Wand abgebildet. Ganz unten simuliert eine Zone den Sumpfbereich. Nach unten wird der Gasaustausch durch zwei Strömungsverbindungen mit verschiedenen Höhenangaben ermöglicht, so kann Gas aufgrund des Dichteunterschieds nach oben strömen. Mit nur einer Strömungsverbindung könnte nur ein Druckunterschied einen Massentransfer erzeugen. Das obere Rohr wird durch zwei Zonen simuliert, die im Experiment gemessene Geschwindigkeit wird genau auf der Verbindung der beiden Zonen berechnet, da die Sonde zur Geschwindigkeitsmessung auch ca. in der Mitte des oberen Rohres angebracht war.

Trotz der Änderungen fällt die relative Luftfeuchte gegenüber den Messwerten leicht ab (Abb. 2.43). Die genaue Ursache konnte nicht abschließend identifiziert werden, möglicherweise sind die Randbedingungen (speziell die Wärmeverluste an der Stahlschale) nicht genau genug abgebildet. Der Druck und die meisten Temperaturen sind nahezu konstant über die Versuchsdauer, weshalb auf eine Darstellung verzichtet wird.

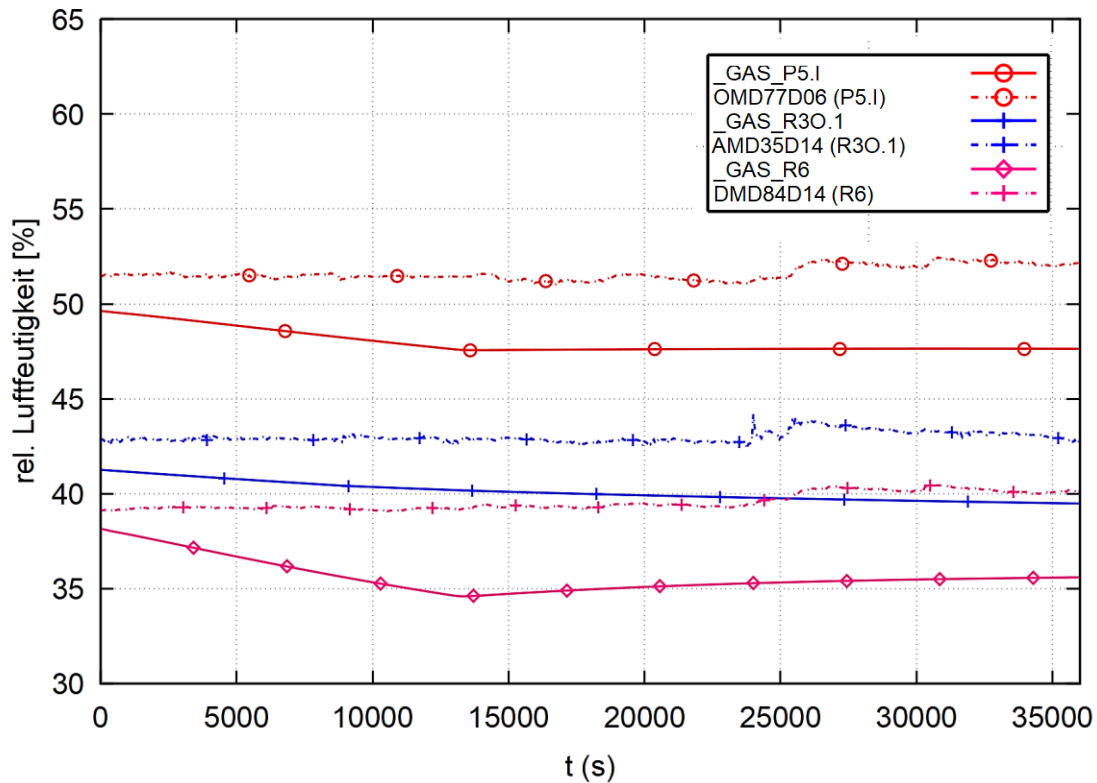


Abb. 2.43 THAI Iod-33, relative Luftfeuchtigkeit in unterschiedlichen Zonen in Rechnung (durchgezogene Linien) und Experiment (unterbrochene Linien)

Die mittels eines Laser-Spektrometers (LASI) gemessene Iodkonzentration fällt in der Rechnung gegenüber den experimentellen Werten etwas zu langsam ab (siehe Abb. 2.44), aber im Datensatz sind Details wie die Coupons sowie die Gaswäscher nicht abgebildet worden. Der Beitrag dürfte zwar gering sein, aber durch eine feine Einstellung der Reaktionskonstanten am Stahl und der Farbe, könnten auch diese als Iodsenke wirkenden Flächen im Datensatz abgebildet werden.

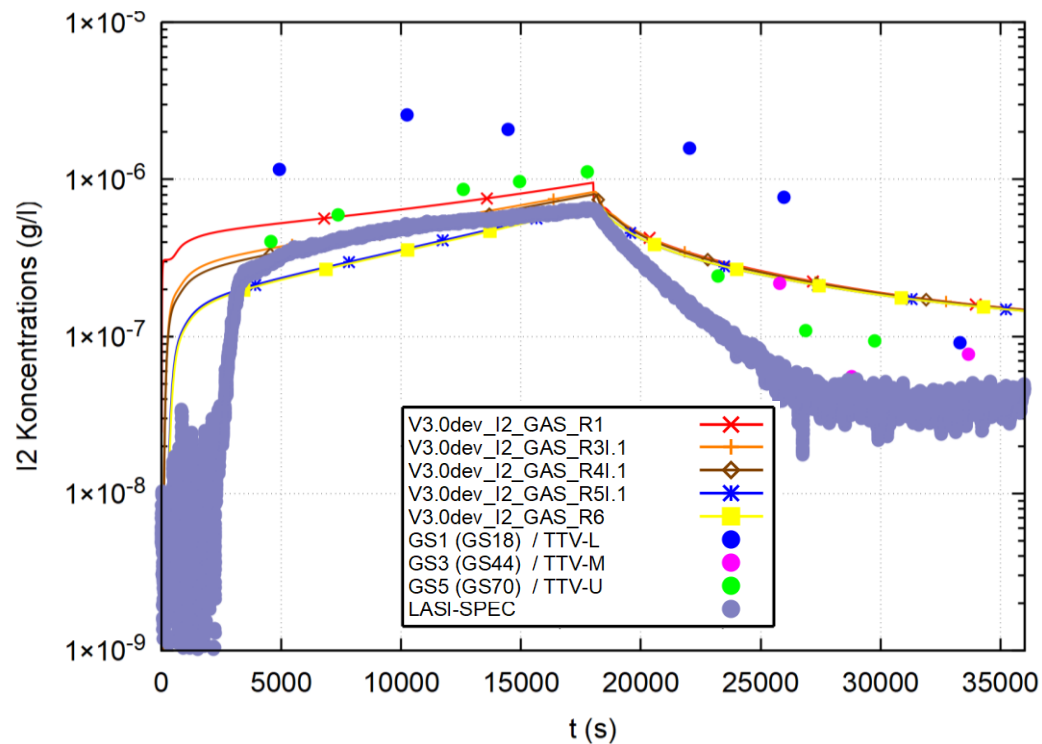


Abb. 2.44 THAI Iod-33, Iodkonzentration in unterschiedlichen Raumbereichen in Rechnung (Linien) und Experiment (Punkte)

Und auch die Konvektionsgeschwindigkeit scheint die experimentellen Daten gut zu reproduzieren (Abb. 2.46). Dafür wurden Daten des Messsystems METUSA (**M**inimal **E**ncroaching **T**urnable **S**treamwise **A**nometers) ausgewertet. METUSA ermöglicht die Messung des mittleren Strömungsfeldes mit sechs Schaufelrädern, die in unterschiedlichen Radien in der oberen Anschlussleitung installiert sind. Die Hauptkonstruktionsmerkmale des METUSA-Gerätes sind drehbare Flansche, die es ermöglichen, nahezu ohne Rückwirkung auf die Strömung die Geschwindigkeiten über den Rohrquerschnitt zu messen, Abb. 2.45.

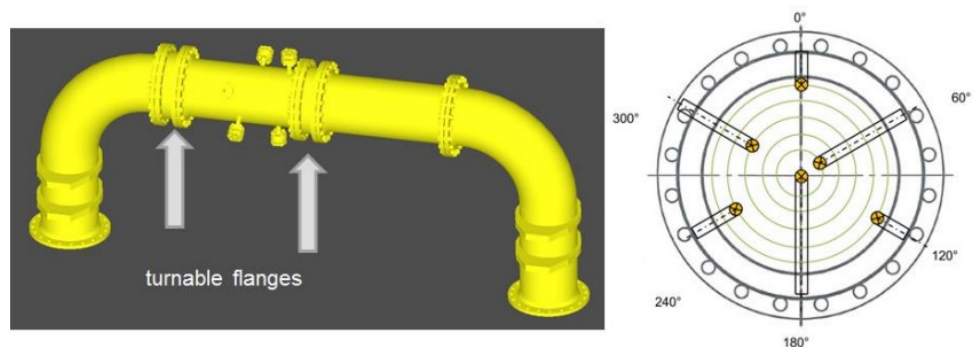


Abb. 2.45 METUSA-Messaufnahme im oberen Verbindungsrohr der THAI-Versuchsanlage /GUP 16/

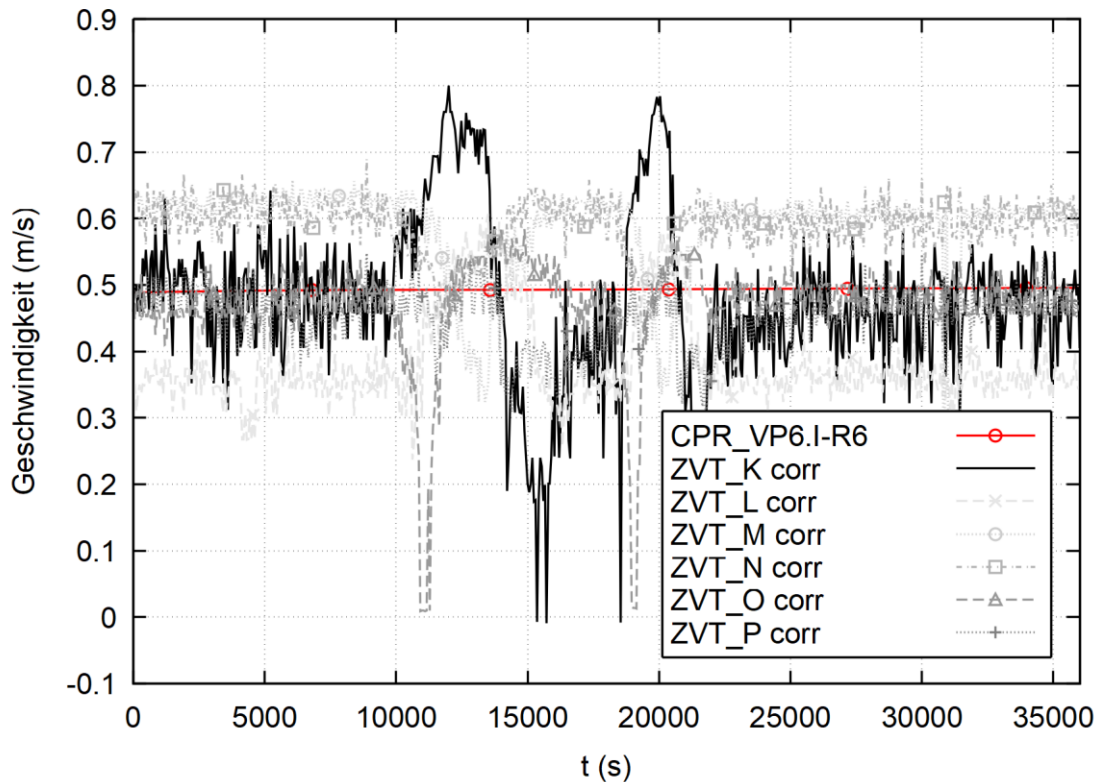


Abb. 2.46 THAI Iod-33, Geschwindigkeit im oberen Verbindungsrohr in Rechnung (rote Linie ) und Experiment (graue Linien für unterschiedliche Messstellen)

2.2.4 OECD/NEA THEMIS WH-33 zur Spaltproduktrückhaltung in Wasser-pools

Im Rahmen des OECD/NEA-Projekts THEMIS hat die GRS am blinden Benchmark für den Pool-Scrubbing-Versuch THAI WH-33 teilgenommen. Die Tests THAI WH-32 bis WH-34, die in der THAI⁺-Anlage durchgeführt wurden, zielten darauf ab, die Aerosolrückhaltung in einer Wasservorlage unter Pool-Scrubbing-Bedingungen im Jet-Regime zu untersuchen. Es wurden drei Tests mit jeweils vier Phasen durchgeführt, bei denen das Gasgemisch, die Einspeisegeschwindigkeit und die Eintauchtiefe der Einspeisung variiert wurden. Die parametrischen Variationen sollen es ermöglichen, den Einfluss von Weber-Zahl, Eintauchtiefe und Dampfkondensationsrate des Jets weitestgehend unabhängig voneinander zu untersuchen. In allen Tests wurden Zinnoxidpartikel (SnO_2) verwendet, die als unfalltypische Aerosole dienen. Die experimentellen Daten sollen die verfügbare Datenbank erweitern und die Codevalidierung sowie den Vertrauensbereich für Vorhersagewerkzeuge zum Unfallablauf verbessern, insbesondere in Bezug auf Pool Scrubbing im "Jet-Regime", wie z. B. beim Bruch von Dampferzeugerrohren. Die Tests

wurden mit einer großen Wasservorlage im THAI-Behälter durchgeführt. Der partikelbeladene Gasstrom wurde über ein horizontales Rohr eingespeist, das mit Wasser überdeckt ist. Der eingespeiste Gasstrom bestand aus einem Luft-Dampf-Gemisch. Die Aerosolkonzentration und Größenverteilung wurden stromauf des Jets und im Gasraum über dem Pool mit Probenahmefiltern, Impaktoren und online mittels eines PALAS Welas® Aerosolspektrometersystems gemessen. Der Gasraum über dem Pool wurde während und nach der eigentlichen Aerosolfreisetzung mittels zusätzlicher Lufteinspeisung gespült. Die dadurch erzielte gute Durchmischung erlaubt eine repräsentative Filtermessung im Gasraum und einen hinreichend schnellen Partikeltransport auf einen Integralfilter, der in der Abgasleitung des Behälters installiert war. Jede Testphase war ausreichend lang, um stationäre Bedingungen zu generieren.

Da der Abgabezeitraum für die Rechnungen nach Ende des Projekts verlängert wurde und die Ergebnisse erst im Rahmen eines entsprechenden THAI-Meetings bei Becker Technologies präsentiert werden sollten, können nachfolgend nur qualitative Aussagen ohne Verweis auf die experimentellen Daten gemacht werden.

Maßgeblich für die COCOSYS-Analysen wurde das Modell SPARC /OWC 91/ in der Version SPARC-B/98 /FIS 98/ zur Anwendung gebracht. Üblicherweise beinhalten Modelle für die Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen vereinfachte Ansätze, die nur teilweise auf reale Anlagenverhältnisse anwendbar sind. In die Version SPARC-B/98 wurde eine Vielzahl von Verbesserungen eingebracht, die wesentlich zu einer erleichterten Anwendung und einer erhöhten Aussagesicherheit der Ergebnisse beitragen. Ein Schwerpunkt dieser Verbesserungen ist die Bereitstellung von Untermodellen, die den Zustandsbedingungen in einer Reaktoranlage genauer Rechnung tragen und wichtige Einflüsse auf das Abscheidungsverhalten erfassen, wie z. B. die Modelle für eingetauchte Gasstrahlen, Strömungsverhältnisse am Verteilerrohr, Blasenbildung am Tauchrohr, Rezirkulation in der Wasservorlage, Freisetzung in flache Wasservorlagen sowie Resuspension an der Wasseroberfläche.

2.2.4.1 COCOSYS-Nodalisierung

Für die COCOSYS-Rechnung wurde der THAI-Behälter (TTV) entsprechend der in Abb. 2.47 dargestellten Basisnodalisierung simuliert. Da der Wasserpool durch eine einzelne Zone repräsentiert wird, liegt die Einspeisung zentral in der Mitte, im Gegensatz zum Experiment, wo die Einspeisung in Wandnähe erfolgte. Über dem Wasserpool ist

das Gasvolumen durch 5 Zonen nodalisiert, in die, entsprechend den experimentellen Vorgaben Ein- bzw. Ausspeisungen für Spülluft und Druckregelung definiert sind.

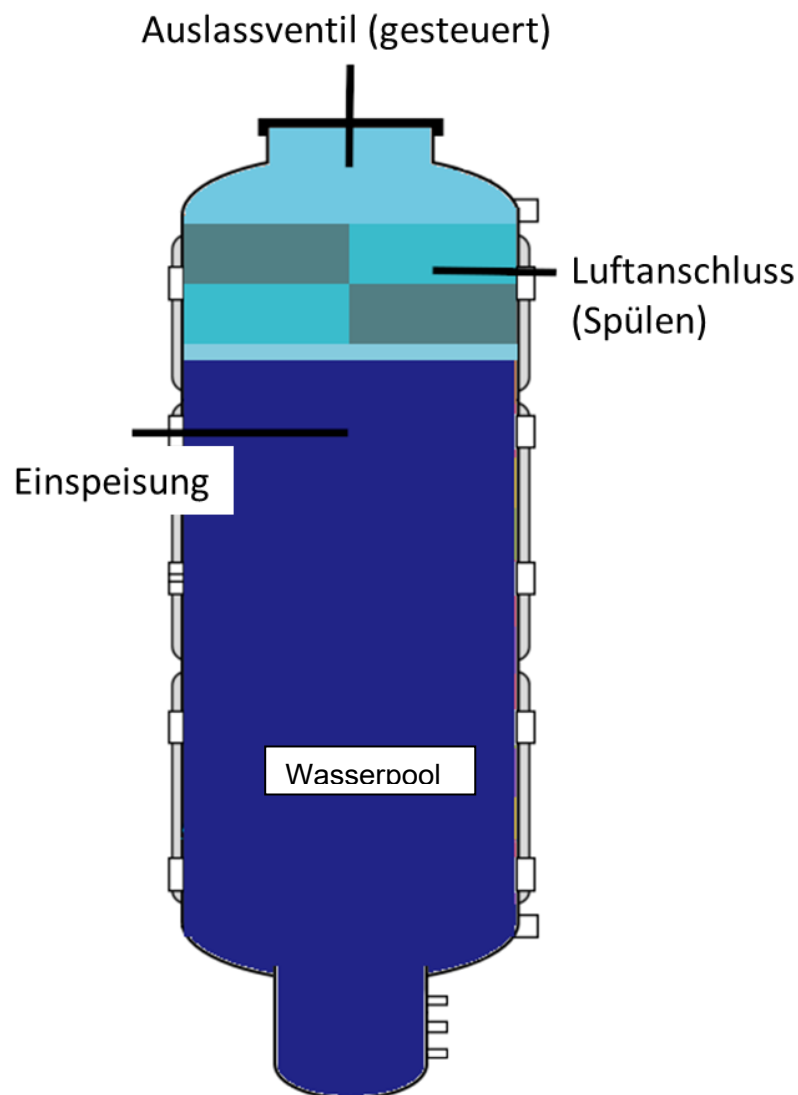


Abb. 2.47 THAI WH-33, COCOSYS-Nodalisierung

2.2.4.2 Simulationsergebnisse

Abb. 2.48 zeigt als Beispiel die Aerosolkonzentration in der Atmosphäre über dem Wasserpool als Ergebnis unterschiedlicher Massenströme für die Dampf-Lufteinspeisung in den Wasserpool. Während die Phasen 1 bis 3 maßgeblich durch die Variation des Einspeise-Massenstroms charakterisiert sind, wurde in der vierten Phase das Spülen der Atmosphäre ausgeschaltet, was zu einer deutlichen Zunahme der Aerosolkonzentration in der Rechnung führte. Nach Freigabe der Ergebnisse werden die Daten der COCOSYS-Rechnung mit den experimentellen Daten eingehend verglichen und die

Modellbasis bewertet. Ein Fazit zum Stand der Pool-Scrubbing-Modellierung kann erst danach erfolgen.

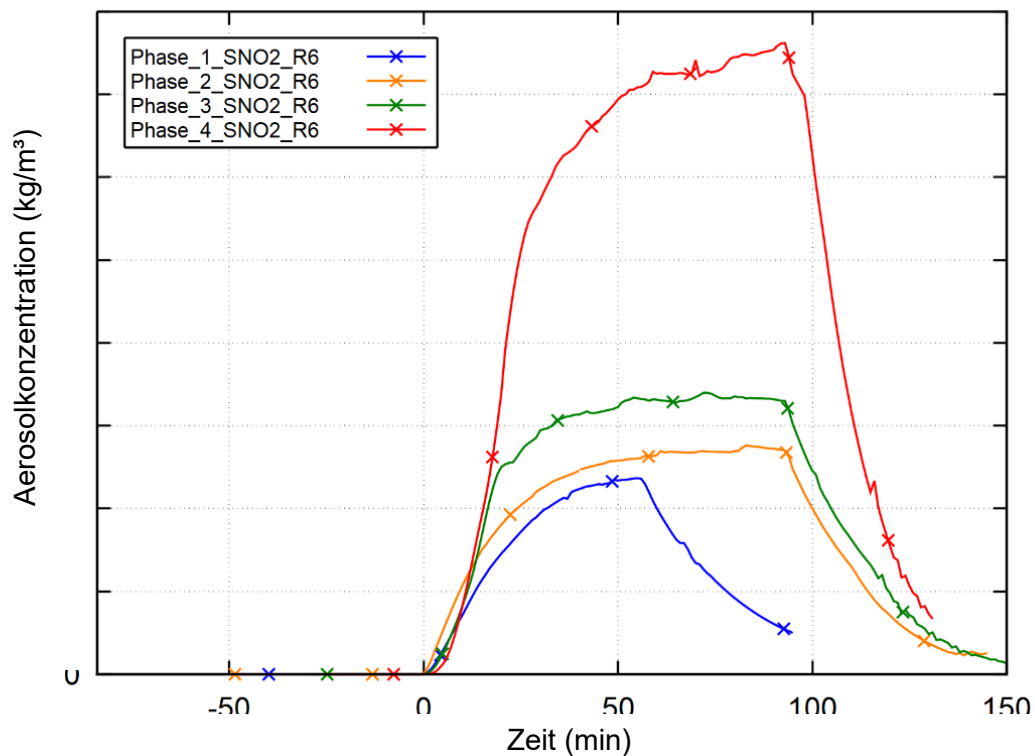


Abb. 2.48 THAI WH-33, zeitlicher Verlauf der Aerosolkonzentration in der Atmosphäre über dem Wasserpool (anonymisierte Darstellung)

2.2.5 THAI AW-4 zu Kondensationsvorgängen an Containmentstrukturen

Mit den Fortschritten in NewAFP können zwar noch keine Unfälle in Anlagen gerechnet werden, aber einzelne Versuche lassen sich nachrechnen. Der Fokus von NewAFP liegt vornehmlich auf der Integration der Chemie in den Spaltprodukttransport, so dass z. B. chemische Verbindungen auch durch Nachzerfälle wieder aufgelöst werden können. Bisher wurden die Chemie und der Spaltprodukttransport nebeneinander gerechnet, d. h., dass die Chemie die Produkte an anderen Stellen verordnete als die Nachzerfallsleistung freigesetzt wird. Auch hatte ein Zerfall keine Auswirkung auf die Zahl der chemischen Verbindungen. An der Aerosolphysik sollte sich so gut wie nichts geändert haben. Zur Überprüfung wurde der Versuch AW4 herangezogen. In diesem Versuch wird in Wasser gelöstes Csl zusammen mit Luft über ein Sprühsystem in den THAI-Behälter eingebracht, die Atmosphäre in dem Behälter ist dabei so weit überhitzt, dass das Wasser verdampft und das Csl als Aerosole in der Atmosphäre verbleibt.

Danach wird mittels eines zweiten Sprühsystems zweimal kurz hintereinander gesprüht, um Aerosole aus der Atmosphäre auszuwaschen. Über die Heizmäntel und elektrischen Heizmatten werden dabei die Randbedingungen stabil gehalten.

Um die Chemie an den Behälterwänden voll umfänglich rechnen zu können, verlangt NewAFP die genaue Eingabe der Unter- und Oberkantenhöhe von Strukturen, so dass die Fläche der Struktur oberhalb und unterhalb der Wasseroberfläche bei Ausbildung eines Wasserpools berechnet werden kann. Falls es notwendig sein sollte, kann man diese Segmentierung bei einigen Strukturen auch abschalten. Die Segmentierung ist aber nicht für alle Wärmeübergangsmodelle in COCOSYS vorgesehen, daher musste im ersten Schritt die Struktureingabe im Datensatz auf ein neueres Wärmeübergangsmodell (CO1) umgestellt werden. Um ausschließlich Änderungen von NewAFP gegenüber AFP zu vergleichen, wurde auch der AFP-Datensatz mit dem CO1-Modell gerechnet.

Bei dieser Umstellung und der damit verbundenen Struktursegmentierung in einen wasserbedeckten und einen Teil oberhalb der Wasseroberfläche wurde festgestellt, dass dieser Fall bei einer temperaturgesteuerten Energieeinspeisung in Strukturen zu unrealistischem Verhalten führt. COCOSYS nimmt die Temperatur des unter Wasser befindlichen Strukturteils zur Steuerung der Einspeisung. Da der Teil unter Wasser längere Zeit aufgrund des guten Wärmeübergangs an das Wasser unter der gewünschten Temperatur liegt, wird der Anteil der Struktur oberhalb des Wassers immer weiter aufgeheizt, wodurch auch die Temperatur der Atmosphäre im THAI-Behälter immer weiter steigt. Die Entwickler wurden darüber informiert. Um das Problem bis zu einer Lösung zu umgehen, wurde die Segmentierung der Struktur unterbunden; dadurch wird die Struktur die gesamte Zeit als oberhalb der Wasseroberfläche befindlich betrachtet.

2.2.5.1 Simulationsergebnisse

Erste Rechnungen zeigten einen deutlichen Unterschied der simulierten Aerosolkonzentrationen. Da an dem Aerosolmodell keine Änderungen vorgenommen wurden, waren diese Unterschiede relativ überraschend. Die Suche nach der Ursache wurde erschwert, da sich nicht nur die Aerosolkonzentration, sondern auch die berechneten Drücke (siehe Abb. 2.49) unterschieden. Zwar kann ein Aerosolpartikel als Kondensationskeim dienen und somit die Partikelkonzentration einen Einfluss auf den Druckverlauf haben, aber ein so deutlicher Einfluss auf den Druck erscheint unrealistisch. Unterschiede im Druck (siehe Abb. 2.49) haben im Allgemeinen auch Auswirkungen auf

Temperatur und Gaszusammensetzung, was wiederum mit den Strömungsverhältnissen wechselwirkt und auch die Ablagerungsmechanismen beeinflusst. Ein Vergleich der Ergebnisse würde also starke Unterschiede in den Rechnungen nahelegen, die aber nicht direkt in den entsprechenden Modellen zu suchen sind. Der Vergleich mit den Messwerten zeigt, dass sich auch die berechnete Thermohydraulik von den Messwerten unterscheidet, der Druckverlauf vor der Umstellung auf CO₁ verhält sich identisch.

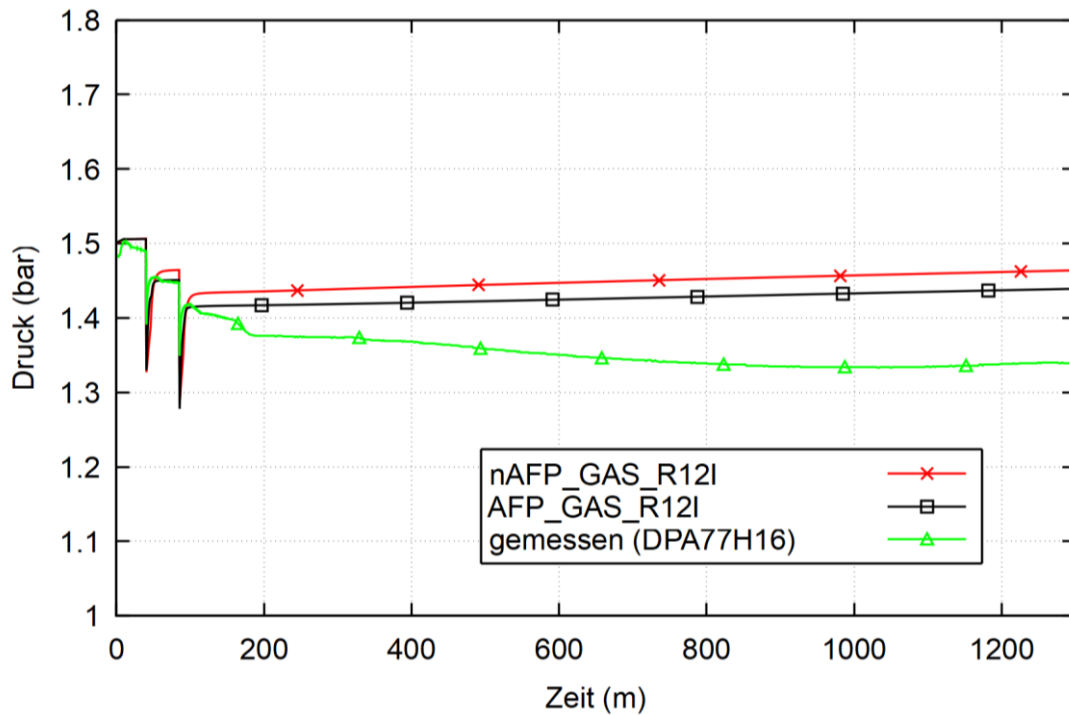


Abb. 2.49 THAI AW-4, berechneter Druckverlauf während der ersten Rechnungen

Erst nachdem die komplette Konditionierungsphase des Behälters (Heizen und Dampfeinspeisung) so eingestellt wurde, dass sich die Temperatur und der Druck zu Beginn des Versuchs im Behälter hinreichend genau reproduzieren ließen, und die Entnahme der Sampling-Leitungen berücksichtigt wurde, konnte der Druckverlauf besser nachgerechnet werden (Abb. 2.50). Im ursprünglichen Datensatz war die Dampfkonzentration zu niedrig und die fehlenden Entnahmen über die Sampling-Leitungen (die im Übrigen nicht den gesamten Versuchsablauf über, sondern in Intervallen geöffnet sind), ließen nur einen Druckabfall über Kondensation zu, um den Druckabfall zu erklären.

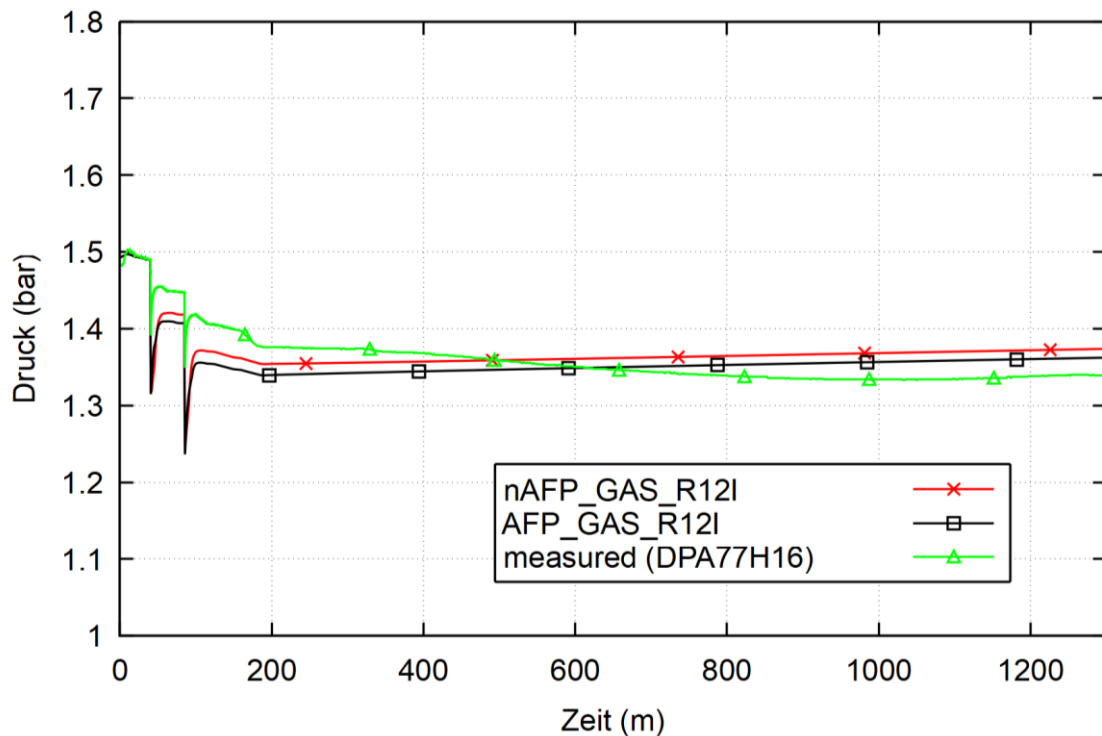


Abb. 2.50 THAI AW-4, Druckverlauf nach der Anpassung der Randbedingungen

Auch wenn die berechneten Druckverläufe deutlich besser mit den Messwerten übereinstimmen, verbleibt das Problem, dass sich die Ergebnisse zwischen AFP und NewAFP deutlich unterscheiden. Um die thermohydraulischen Prozesse besser abzubilden, wären wahrscheinlich Änderungen an der Nodalisierung nötig, die aber im Rahmen des Projekts nicht mehr in Angriff genommen worden sind. Weitergehende Analysen ergaben, dass sowohl AFP als auch NewAFP in das Sprühmodell eingreifen, um Vorgänge an der Tropfenoberfläche zu simulieren. Das Modell wurde überarbeitet und ändert die Depositionsrate der Nebeltröpfchen an der Wasseroberfläche (Abb. 2.51).

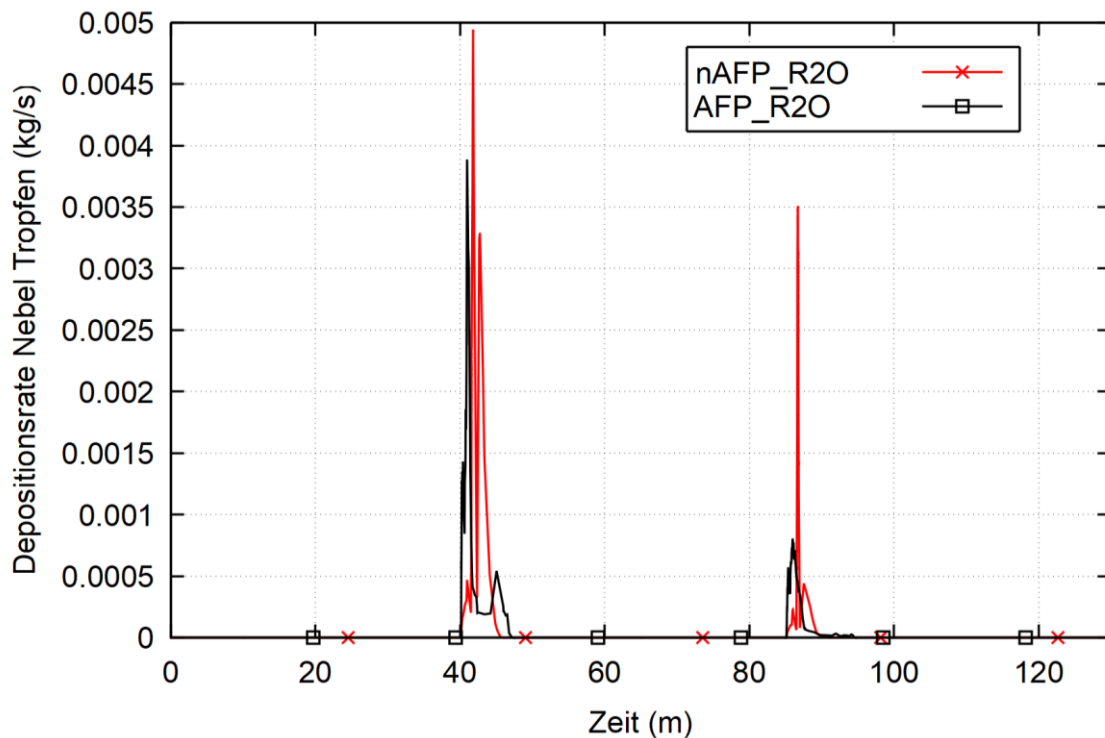


Abb. 2.51 THAI AW-4, Sedimentierungsrate von Nebeltropfen bei AFP und NewAFP

Mit diesen Unterschieden in der Thermohydraulik ist nicht mehr zu erwarten, dass die Unterschiede in der Aerosolkonzentration nicht auffällig wären. Die mittels eines Lasers in der Atmosphäre des THAI-Behälters gemessenen Aerosolkonzentrationen sind in Abb. 2.52 für die Höhe 4,9 m und in Abb. 2.53 für die Höhe 7,7 m dargestellt; es fällt auf, dass in der Phase nach dem Sprühen die Aerosolkonzentrationen, die NewAFP berechnet, etwa 30 – 40 % unter den von AFP berechneten Werten liegen.

Da aber beide Rechnungen schon die Größenordnung der Aerosolkonzentration gut reproduzieren, würde ein alleiniger Vergleich jeder der Rechnungen mit den Messwerten zufriedenstellend sein. Beide Modelle überschätzen aber das Auswaschen durch das Sprühen etwas, direkt nach der zweiten Sprühphase liegt die berechnete Aerosolkonzentration deutlich unter den gemessenen. Hier liegt NewAFP deutlicher unter den Messwerten als AFP. In der Langzeitphase kann man aber sagen, dass AFP augenscheinlich etwas höhere Konzentrationen errechnet als dies die allerdings stark fluktuierenden Messungen nahelegen. Hier liefert NewAFP etwas bessere Ergebnisse. Es bleibt aber gerade in der Kombination mit dem Einfluss auf den Druck ein offener Punkt, der in der Zukunft beachtet werden muss.

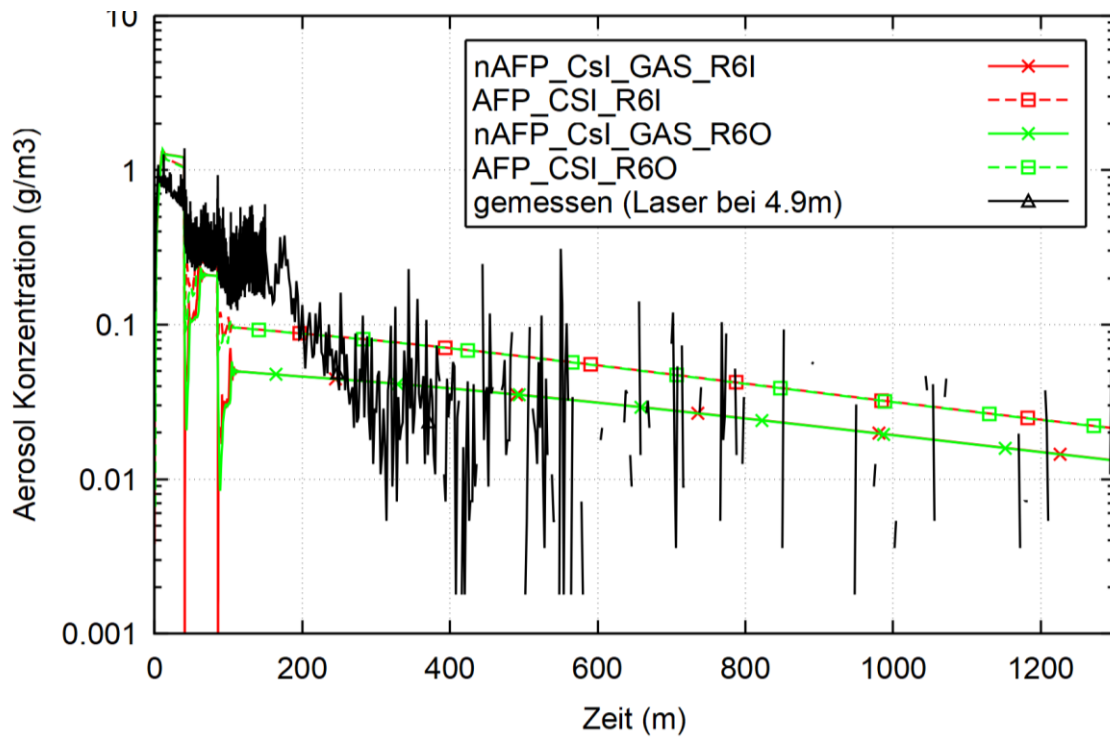


Abb. 2.52 THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe

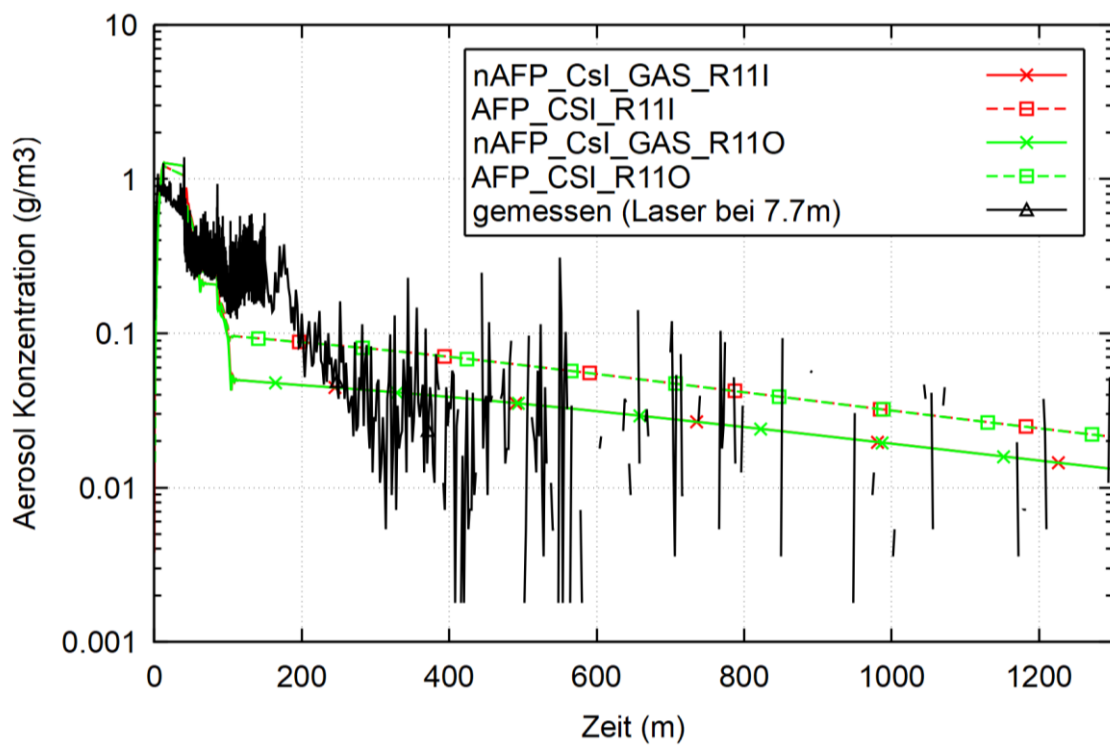


Abb. 2.53 THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 7,7 m Höhe

Da sich die Ergebnisse erst mit dem Einsatz des Sprühsystems so stark unterscheiden und auch die Druckmessungen nicht hinreichend genau reproduziert werden konnten, wurde versucht, die anfängliche Tröpfchengröße (die Größe der Tröpfchen, die die Düse des Sprühsystems verlassen, wird in COCOSYS nicht berechnet, sondern ist eine vom Nutzer vorzugebende Eingabegröße) so weit zu variieren, dass sich der Druck besser reproduzieren lässt. Dies ist eine der empfindlichsten Größen bei der Simulation des Sprühsystems, und bei Nachrechnung von Versuchsanlagen sind diese Daten in Unterlagen, die vom Hersteller der Düsen bereitgestellt werden, einsichtig. Laut solcher Unterlagen ist der anfängliche mittlere Durchmesser der Tröpfchen etwa $5,8 \cdot 10^{-4}$ m. Erst mit einer Verdopplung des Durchmessers (auf etwa $1,2 \cdot 10^{-3}$ m), also ca. einer Veracht-fachung des Volumens des Durchmessers, konnte der Druckverlauf sehr gut reproduziert werden.

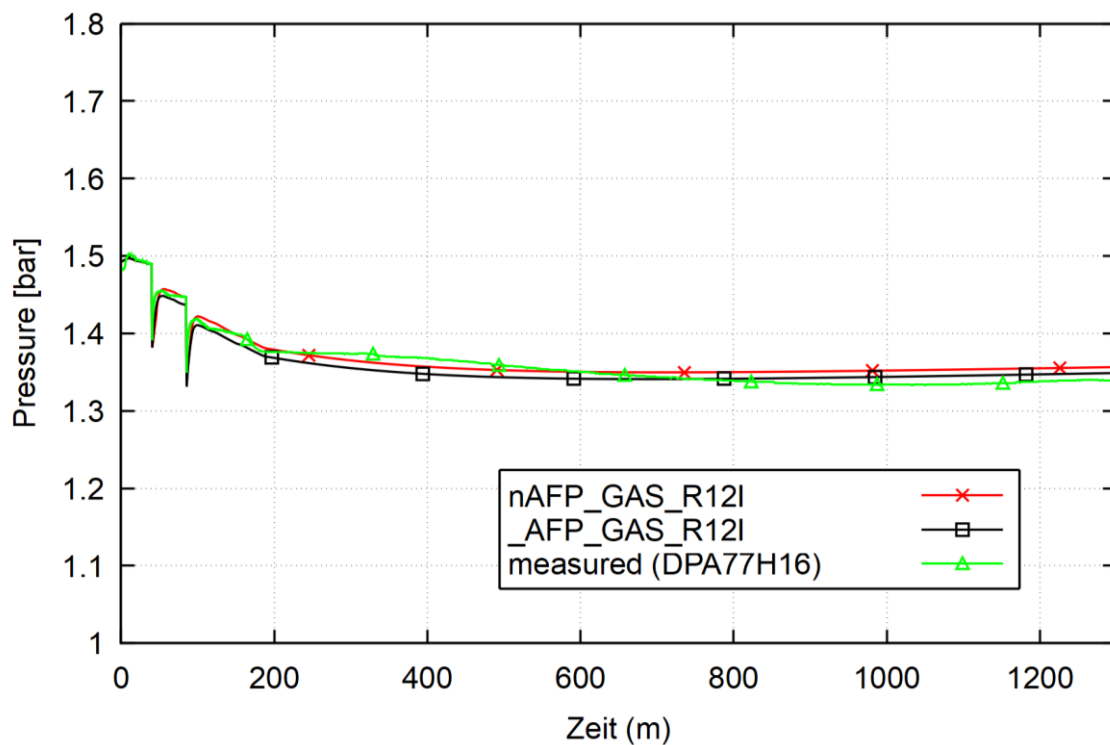


Abb. 2.54 THAI AW-4, Druckverläufe bei Variation der Tropfengröße

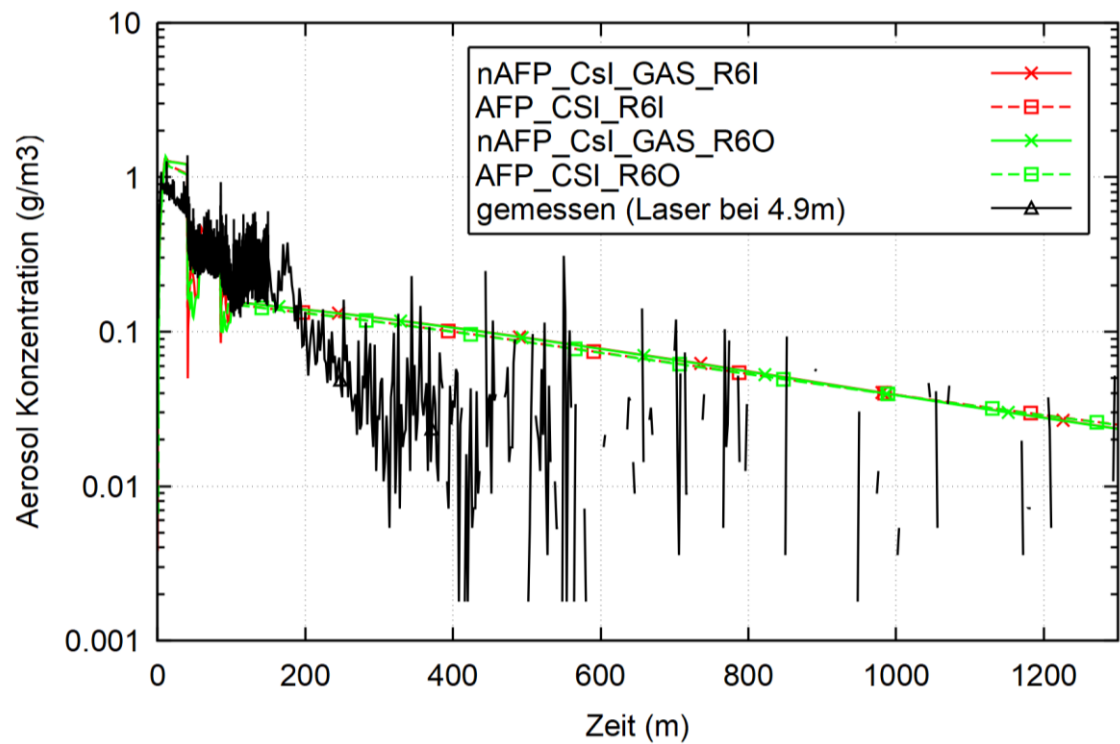


Abb. 2.55 THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe (andere Tropfengröße)

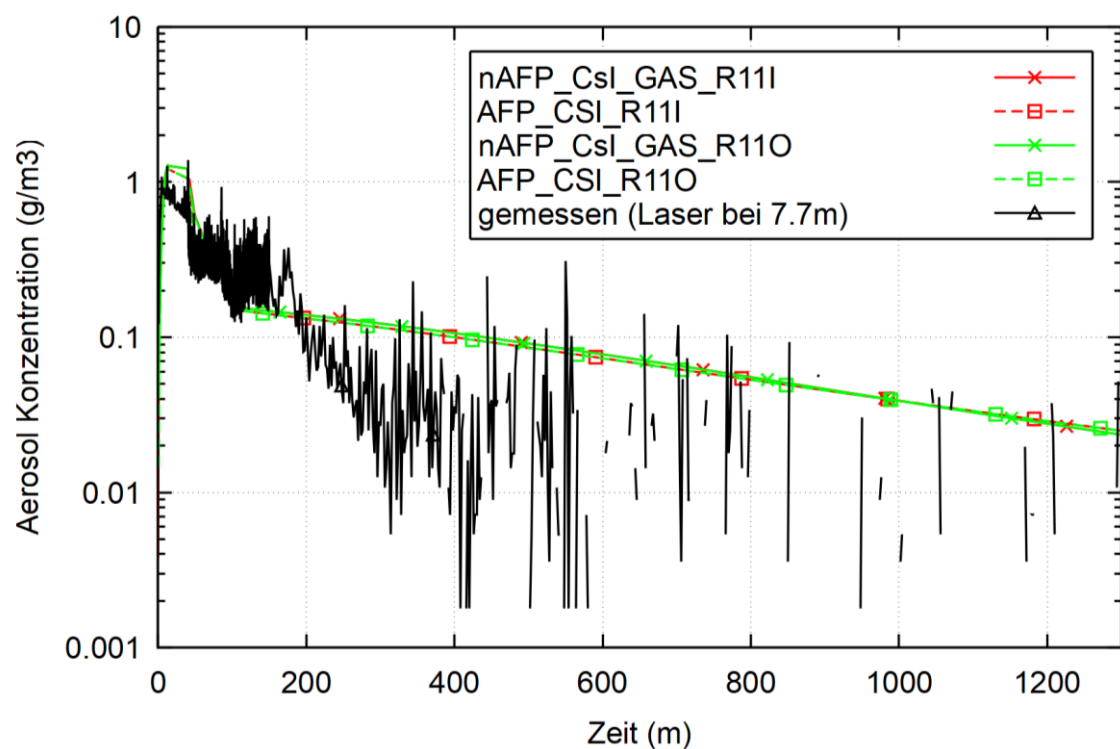


Abb. 2.56 THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe (andere Tropfengröße)

Es ist auf keinen Fall ratsam, bewusst von der Angabe des Herstellers bzgl. der Tröpfchengröße beim Verlassen des Sprühkopfes abzuweichen, da sich dadurch natürlich auch die Zahl der Tröpfchen (es wird der Massenstrom durch das Sprühsystem vorgegeben) und die Austrittsgeschwindigkeit aus der Düse stark ändern.

2.2.5.2 Fazit

Schon zu Beginn der Rechnung war bekannt, das NewAFP langsamer als AFP ist. Der wirkliche Unterschied in der Rechenzeit war aber sehr überraschend, AFP brauchte ca. 5 Minuten, NewAFP dagegen fast 2,5 Tage. Erst nachdem bei weiteren Rechnungen Optionen für die Berechnung chemischer Reaktionen aktiviert wurden, konnte die Rechenzeit auf 2,4 h reduziert werden.

2.2.6 Umsetzung der Regressionstestdatensätze auf NewAFP an Beispielen

Im Regressionstesten für COCOSYS werden vier Aerosolveruche und drei Versuche zur Iodchemie regelmäßig wiederholend mit AFP berechnet. Im Rahmen des Übergangs von AFP zu NewAFP sollen diese regelmäßigen Testfälle auch für NewAFP angepasst und in die regelmäßige Testprozedur eingefügt werden. Einen Überblick über die zu den Themen Aerosol, Chemie und Quellterm relevanten Versuche im Regressionstesten zeigt Tab. 2.4.

Tab. 2.4 Überblick über die für NewAFP relevanten Versuche im Regressionstesten

Aerosolverhalten	
BMC VANAM-M3	Mehrraumtest mit löslichem und hygroskopischem NaOH-Aerosol in trockener und kondensierender Atmosphäre
POSEIDON PA-20	Pool-Scrubbing-Test mit nicht löslichem SnO ₂ -Aerosol
KAEVER K148	Einraumtest mit nicht-löslichem Ag-Aerosol in trockener und kondensierender Atmosphäre
KAEVER K178	Einraumtest mit Mehrkomponenten-Aerosol (Ag, CsI, CsOH) in trockener und kondensierender Atmosphäre
Iodchemie	
THAI Iod-9	I ₂ -Verhalten im Sumpf und in der Atmosphäre mit Ablagerung auf Stahlwänden auch unter kondensierenden Bedingungen
THAI Iod-11	I ₂ -Verhalten im Sumpf und in der Atmosphäre mit Ablagerung auf Stahlwänden auch mit I ₂ -Schichtung
RTF Phebus 1	Laborversuch mit Strahlenquelle zur Wasserchemie und Freisetzung über die Wasseroberfläche

Mit Ausnahme des Pool-Scrubbing-Tests POSEIDON PA-20 sind alle Versuche auf NewAFP umgestellt und gerechnet worden. Der POSEIDON-Test ist ausgelassen worden, da in NewAFP noch das Pool Scrubbing-Modell SPARC fehlt. Im Folgenden sollen die wesentlichen Erkenntnisse aus der Umstellung beschrieben werden. Details über die durchgeführten Experimente sind in dem aktuellen Regressionstestbericht /ARN 22/ beschrieben.

Im Folgenden wird jeweils ein Vergleich von AFP-Ergebnissen mit denen von NewAFP gezogen. Dabei ist die AFP-Rechnung mit einer durchgezogenen und die NewAFP-Rechnung jeweils mit einer gestrichelten Linie in den Grafiken dargestellt.

2.2.6.1 Aerosolversuche

Das Aerosolmodell hat sich abgesehen von der Programmierung nicht wesentlich geändert zwischen AFP und NewAFP. Daher sind die erwarteten Unterschiede geringer als für den Bereich der Iodchemie. Allerdings führt die vereinheitlichte Geometrie mit dem THY-Modul dazu, dass bei Benutzung derselben Strukturen in einem umgesetzten Datensatz auch unterschiedliche geometrische Randbedingungen vorliegen. Für den Aerosolteil betrifft das vor allem die Ablagerungskoeffizienten für Boden-, Decken- und Wandstrukturen. Die Ablagerungskoeffizienten geben die für die verschiedenen Ablagerungsmechanismen zur Verfügung stehenden Flächen pro Zonenvolumen in m^2/m^3 an. In AFP wurden diese in dem Datensatz in den Zonendaten konstant vorgegeben, während diese in NewAFP auch unter Berücksichtigung von Neigungen aus den Strukturdaten berechnet werden. Ein zusätzlicher Unterschied ist die automatische Berücksichtigung von Wasseroberflächen bei der Bildung von Sümpfen, die je nach Lage, definierte Strukturen überdecken können. Somit sind also nicht exakt identische Aerosolergebnisse zwischen AFP und NewAFP zu erwarten, da in dem neuen Modell auch Geometrieänderungen im zeitlichen Verlauf berücksichtigt werden, die mit dem alten AFP nicht abgebildet werden konnten.

In Aerosolversuchen wird unterschieden zwischen trockener Ablagerung und Ablagerung unter kondensierenden Bedingungen, die sich dadurch unterscheiden, dass die Partikel durch Wasseranlagerung wachsen. Bei der Partikelart werden nicht-lösliche und lösliche Partikel unterschieden, wobei lösliche Partikel Wasser anziehen und bereits unterhalb von Sättigungsbedingungen Kondensation an den Partikeln auftritt. Dieses Verhalten führt zu einem Partikelwachstum und zu einer verstärkten Sedimentation der Aerosolpartikel. Unter Containment-Bedingungen während eines Störfalls liegt immer eine

Mischung aus nicht-löslichen und löslichen Aerosolkomponenten vor, weshalb mit Partikelwachstum bereits unterhalb von 100 % relativer Feuchte zu rechnen ist. Diese allgemeinen Bedingungen herrschen in dem Mehrraumversuch VANAM-M3, womit dieser auch die Bedingungen der Einraumversuche KAEVER K148 und K178 abdeckt, wobei diese keine wesentlichen weiteren Erkenntnisse zur NewAFP-Validierung liefern. Daher sollen an dieser Stelle über die Aerosolversuche auch nur die Ergebnisse des Tests VANAM-M3 diskutiert werden.

2.2.6.1.1 BMC VANAM-M3

Der VANAM-M3-Versuch ist in dem Battelle-Model-Containment (BMC) durchgeführt worden und an einen ND*-Fall (s. a. Erläuterung S. 295) entsprechend der Deutschen Risikostudie Phase B /GRS 90/ angelehnt worden. Damit deckt der Versuch Luftfeuchtigkeiten unterhalb von 100 % sowie Phasen mit kondensierenden Bedingungen ab. Als Aerosol ist lösliches Natriumhydroxid (NaOH) verwendet worden, womit auch Kondensation in überhitzter Atmosphäre behandelt wird.

Das Battelle-Model-Containment hat ein freies Volumen von 626 m³. Es wurde rotationsymmetrisch aus Stahlbeton gebaut und ist in mehrere Räume unterteilt. Die VANAM-Testgeometrie (Abb. 2.57) ähnelt einem DWR-Containment.

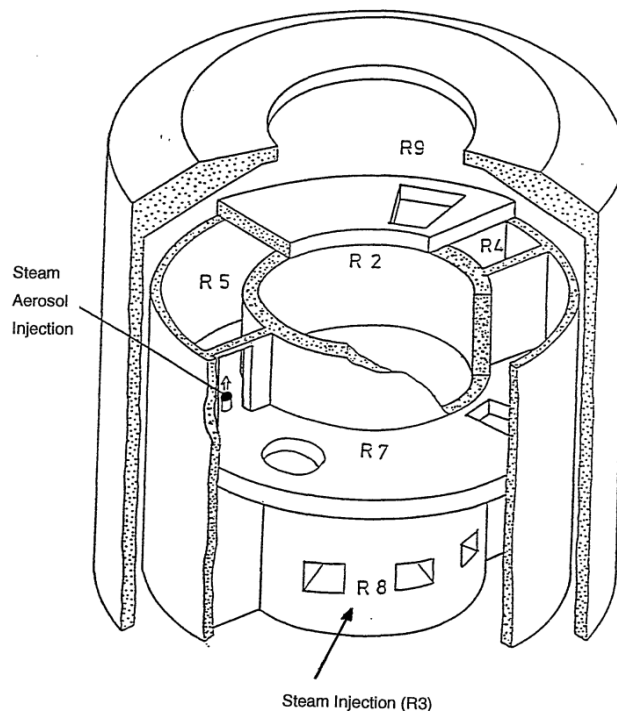


Abb. 2.57 BMC VANAM-M3, Versuchstand /KAN 93/

Thermodynamik

Über das Partikelwachstum durch Kondensation von Wasser ist die Luftfeuchtigkeit die wichtigste thermodynamische Randbedingung für das Aerosolverhalten. Aber auch Temperaturen der Strukturen spielen eine Rolle bei den Ablagerungen durch Thermophorese³ und Diffusiophorese⁴, also durch Temperatur- bzw. Wasserdampfgradienten in den Grenzschichten zu Strukturen. Über die Kondensation von Dampf an den Aerosolpartikeln gibt es auch eine Rückkopplung der Aerosolphysik auf die Thermodynamik. Durch diesen Prozess der Volumen Kondensation, auch Nebelbildung genannt, wird der Atmosphäre Wasserdampf entzogen. Da sich die eigentlichen Aerosolmodelle beim Übergang von AFP zu NewAFP nicht geändert haben, sollten die Änderungen in diesem Bereich aber gering sein. Numerische Identität ist durch die geänderte Behandlung der Geometrie aber nicht zu erwarten. So zeigt der Vergleich des Gesamtdrucks zwischen AFP und NewAFP auch nur geringe Unterschiede in Abb. 2.58, aber keine identischen Ergebnisse.

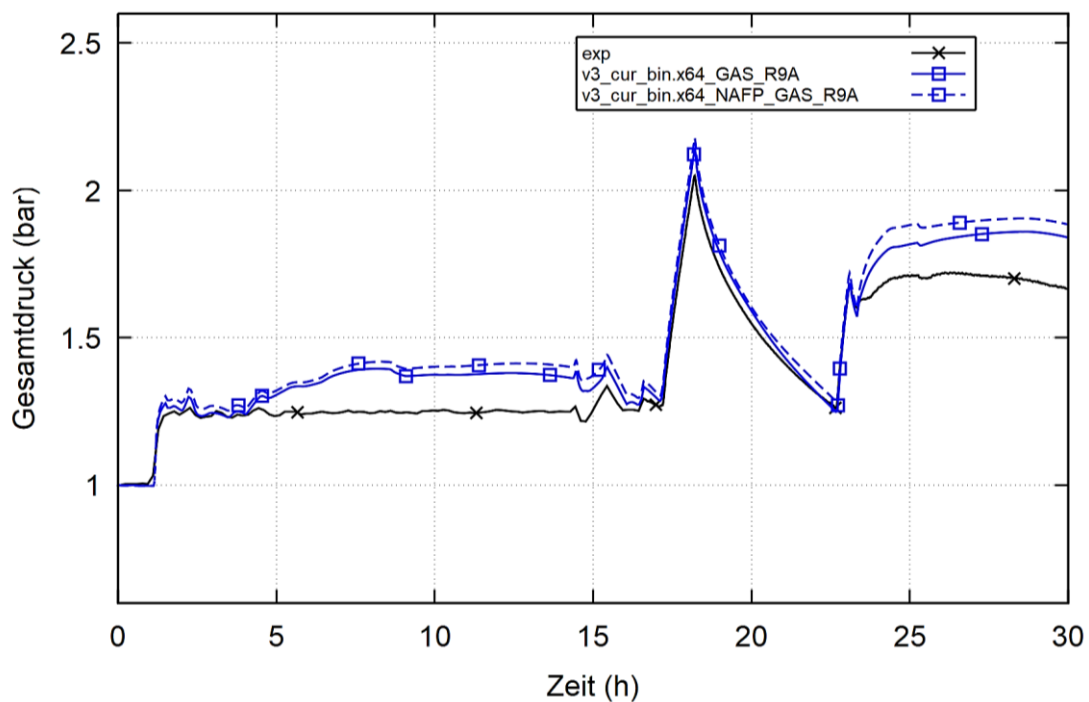


Abb. 2.58 BMC VANAM-M3, Gesamtdruck

³ Als Thermophorese wird in den Naturwissenschaften die Bewegung von Teilchen aufgrund eines Temperaturgradienten innerhalb eines Fluids bezeichnet.

⁴ Diffusiophorese ist die spontane Bewegung kolloidaler Partikel oder Moleküle in einer Flüssigkeit, die durch einen Konzentrationsgradienten einer anderen Substanz induziert wird.

Bis 17,2 h wird der Druck reguliert. Mit der anschließenden Aerosoleinspeisung hört diese Begrenzung auf und der Druck nimmt zu. Die Überschätzung des Drucks in den COCOSYS-Kurven liegt an der nicht simulierten Leckage des BMC, das zu dem Zeitpunkt des Versuchs bereits eine Leckage in den Betonstrukturen aus dem vorhergehenden Versuchsprogramm aufwies. Die Ergebnisse der NewAFP-Rechnung liegen geringfügig oberhalb der AFP-Rechnung. Dieses Verhalten kann durch eine unterschiedliche Volumen Kondensation in den beiden Rechnungen erklärt werden. Die Unterschiede sind aber deutlich unterhalb von 0,1 bar und können als gering eingestuft werden. Ähnliches zeigt sich für den Vergleich der Temperaturen in R6, der in Abb. 2.59 dargestellt ist.

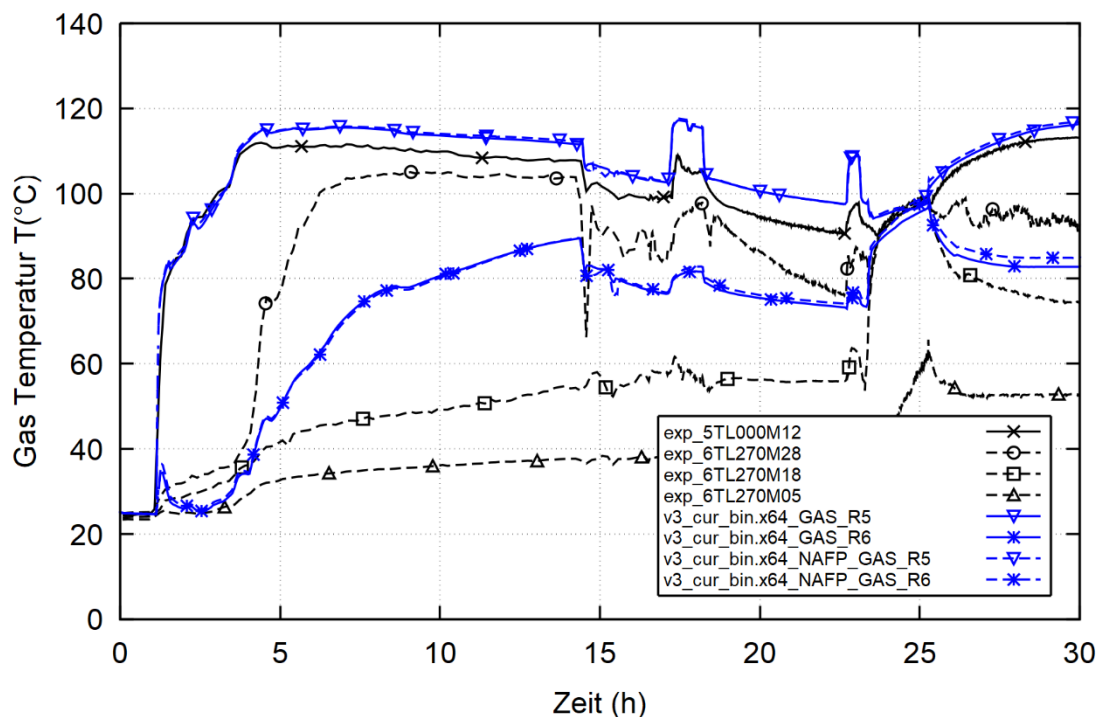


Abb. 2.59 BMC VANAM-M3, Temperaturschichtung in R6

Innerhalb der übereinander liegenden Zonen R5 und R6 (vgl. Abb. 2.57; S. 87) ist im Experiment eine Temperaturschichtung aufgetreten. Durch die grobe COCOSYS-Nodalisation mit zwei Zonen lässt sich dieses Verhalten nur begrenzt wiedergeben. Aber auch in der Rechnung ist die obere Zone R5 deutlich wärmer als die untere Zone R6. Der Vergleich zwischen AFP und NewAFP zeigt beinahe identische Ergebnisse. Etwas deutlichere Unterschiede sind in der relativen Feuchte zu erkennen, die in Abb. 2.60 für die Zone R8 aufgetragen ist.

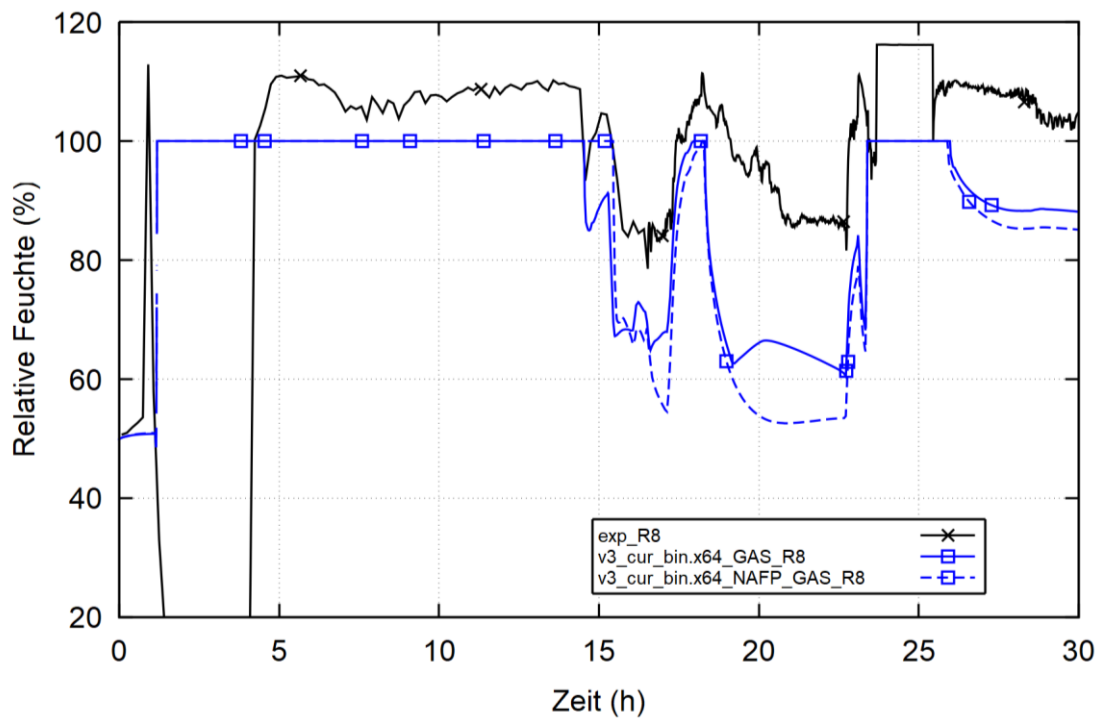


Abb. 2.60 BMC VANAM-M3, relative Feuchte in R8

Bis zu etwa 14,5 h ist die Atmosphäre weitgehend gesättigt, bevor die relative Feuchte aufgrund einer höheren Lufteinspeisung abfällt. Der absolute Wert wird in der COCOSYS-Rechnung niedriger berechnet, aber die Phasen mit kondensierenden Bedingungen werden korrekt wiedergegeben. Für einen detaillierteren Vergleich müssten lokal unterschiedliche Messstellen ausgewertet werden. Die Nodalisation mit COCOOSYS erlaubt aber nur eine zonengemittelte Auswertung. Die Rechnung mit NewAFP zeigt für diese Zone teilweise etwas niedrigere relative Feuchten, wohingegen die Phasen mit kondensierenden Bedingungen beinahe identisch sind. Dieses Verhalten ist aber nicht typisch über alle Zonen. Eine weitere Analyse zeigt, dass in anderen Zonen auch höhere relative Feuchten berechnet werden als mit AFP. Der geringfügig höhere Druck in Abb. 2.58 lässt darauf schließen, dass in der NewAFP-Rechnung etwas mehr Wasserdampf in der Atmosphäre bleibt als in den AFP-Ergebnissen.

Aerosolverhalten

Die Aerosoleinspeisung erfolgte in zwei Phasen nach 17,2 h und nach 22,7 h zusammen mit einem Trägergas aus Luft und Dampf. Zu erkennen sind die Einspeisungen an den Druckanstiegen in Abb. 2.58. Die verwendeten Trägergasgemische sorgen für einen unregelmäßigen Druckanstieg als auch für variierende Feuchtigkeitsbedingungen. Die Ergebnisse für die Aerosolkonzentrationen in den Zonen R8, R9 und R10 sind in den folgenden Grafiken Abb. 2.61 bis Abb. 2.63 aufgetragen.

In allen betrachteten Zonen sind beide Einspeisepeaks mit nachfolgender Ablagerung zu erkennen. Nach der ersten Einspeisung herrschten im Wesentlichen überhitzte Bedingungen, weshalb die Konzentrationsabnahme direkt danach trockene Bedingungen widerspiegelt. Nach der zweiten Einspeisephase herrschten weitgehend gesättigte Bedingungen, weshalb die Ablagerung des Aerosols wesentlich schneller verläuft. Insgesamt wird dieses Verhalten in den COCOSYS-Rechnungen gut wiedergegeben. Die NewAFP-Ergebnisse liegen nach der zweiten Einspeisung in R8 etwas näher an den experimentellen Ergebnissen und in R10 etwas weiter von den experimentellen Ergebnissen entfernt. Das deutet darauf hin, dass die Kondensationsphase aufgrund der unterschiedlichen Ablagerungsflächen unterschiedlich berechnet wird. In Bezug auf die hohen Unsicherheiten bei Aerosolberechnungen können die Aerosolergebnisse aber als nahezu identisch zwischen AFP und NewAFP angesehen werden.

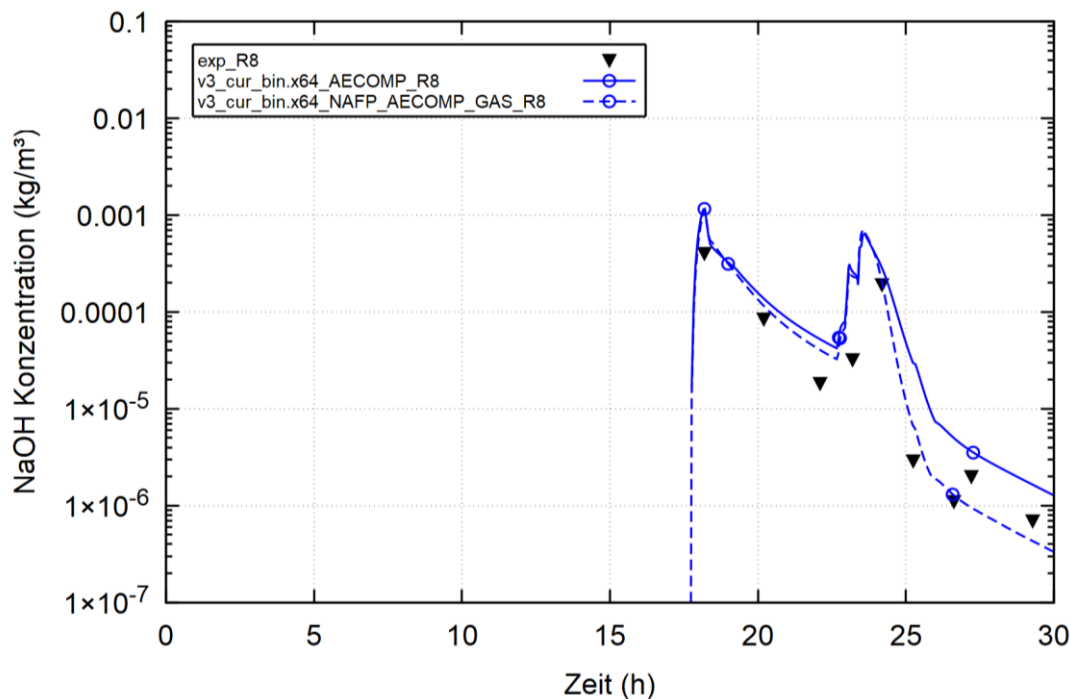


Abb. 2.61 BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R8

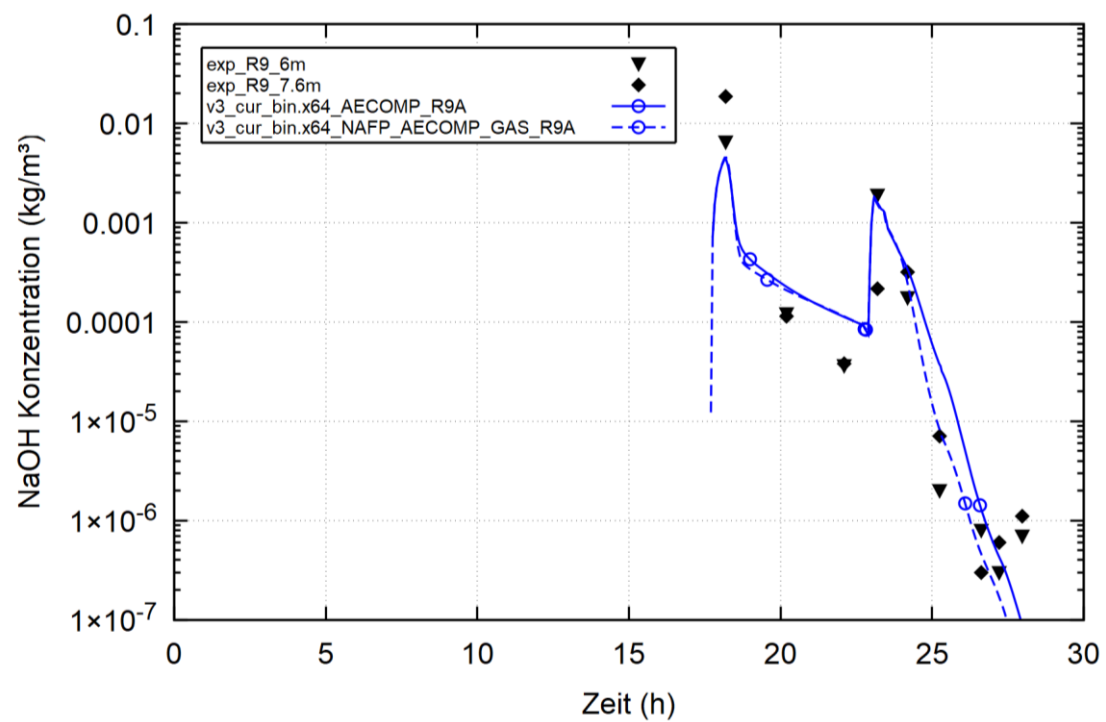


Abb. 2.62 BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R9

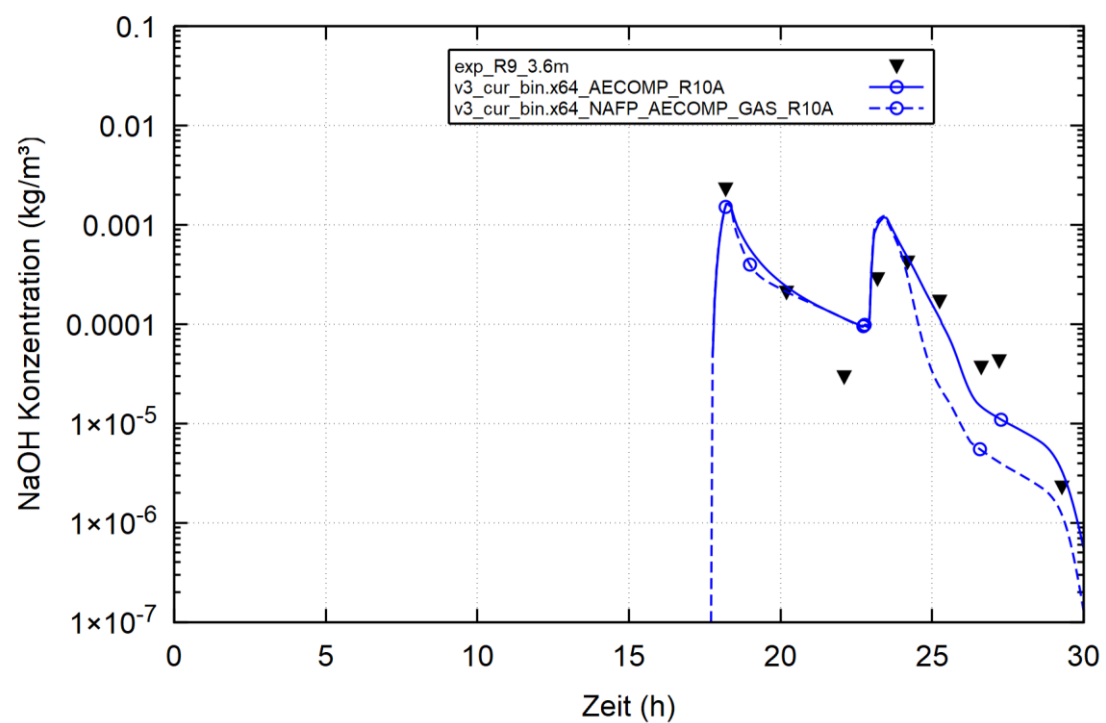


Abb. 2.63 BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R10

2.2.6.2 Iodchemie

Im Vergleich zur Aerosolphysik wurde die Iodchemie beim Übergang von AFP zu NewAFP umfangreich weiterentwickelt. Alle Spezies werden jetzt in einem konsistenten Speziesbaum festgehalten und die Geometrie konsistent aus den Daten für Strukturen und Zonen des COCOSYS-Moduls THY gewonnen. Somit ist keine separate Chemieeingabe wie in AFP mehr nötig. Dieses erlaubt auch die Simulation von kleinen Sümpfen in anderen als der zentralen Sumpfzone und auch in Wasserfilmen auf Strukturen oder in den Tröpfchen des erweiterten Sprühmodells, womit das Auswaschen gasförmiger Spezies aus der Atmosphäre erst ermöglicht wird. Darüber hinaus sind die chemischen Reaktionsgleichungen insbesondere auf gestrichenen Flächen überarbeitet worden. Folglich ist mit deutlichen Unterschieden in den Ergebnissen zu rechnen. Durch den höheren Detaillierungsgrad und der Zunahme der simulierten Wasserzonen ist der Rechenaufwand mit NewAFP folglich auch deutlich erhöht im Vergleich zu AFP.

2.2.6.2.1 THAI Iod-09

Im Versuch THAI Iod-09 ist zu Beginn I_2 in den oberen Bereich des Behälters eingespeist worden. Die Wasservorlage wurde dann so konditioniert, dass sich ein geschichteter Sumpf eingestellt. Dazu wurden die gelösten Iod-Konzentrationen in Abhängigkeit der Höhe an verschiedenen Stellen im Sumpf gemessen. In einer zweiten Versuchsphase wurde der Sumpf umgewälzt und somit die Iodschichtung im Wasser aufgelöst. Beginnend von 24,4 h folgte eine dritte Phase, in der es aufgrund von Wasserdampfeinspeisung zur Kondensation an den Strukturen gekommen ist. In Folge der Wasserschichten auf den Strukturen kam es zu einem Abwaschen von Spezies von den Oberflächen in den Sumpf.

In NewAFP ist das Konzept der Rivuletbildung für das Abwaschen durch Rinnsale (engl. Rivulets) von Strukturen implementiert. Dieses benötigt aber einen erhöhten Rechenaufwand und ist nicht für alle Anwendungsfälle praktikabel. Während spezielle Abwaschversuche mit einer erhöhten Genauigkeit abgebildet werden können, ist es für Anlagensimulationen nicht geeignet, da zusätzliche Strömungspfade für alle beteiligten Strukturen implementiert werden müssen. Daher ist das alte Verhalten aus AFP eines Abwaschens von nassen Strukturen durch künstliche chemische Reaktionen zwischen Wänden in Verbindung zur Gasphase bzw. dem Zonensumpf optional auch in NewAFP verfügbar. Dieses Verfahren ist in der Iod-09-Rechnung angewendet worden, um die Vergleichbarkeit mit AFP zu gewährleisten.

Dazu sind spezifische Reaktionen entsprechend Gl. 2.2 und Gl. 2.3 umgesetzt, die das Abwaschen sowohl von adsorbiertem I_2 auf Stahloberflächen als auch von chemisorbiertem FeI_2 in das Wasservolumen der jeweiligen Zone simulieren.



In den Gleichungen bezeichnet (dep) den adsorbierten Anteil der jeweiligen Spezies I_2 bzw. FeI_2 im Anfangszustand an einer Stahloberfläche (s) in Kontakt zur Gasphase (g) und (w) den Endzustand in der Wasserphase bzw. im Zonensumpf. Dabei wird das Iod in der Sumpfzone als I^- angenommen. Die Reaktionsraten für diese Reaktionsgleichungen sind in der Vergangenheit aus dem Iod-09-Experiment abgeleitet worden.

Chemische Ergebnisse

Die Gesamtiodkonzentration im Verlauf des Iod-09-Experiments ist in Abb. 2.64 dargestellt. Sie ist in verschiedenen Höhen im Sumpf gemessen worden. Mit einer künstlichen Trennung der Zonen ist dieses Verhalten in COCOSYS simuliert worden.

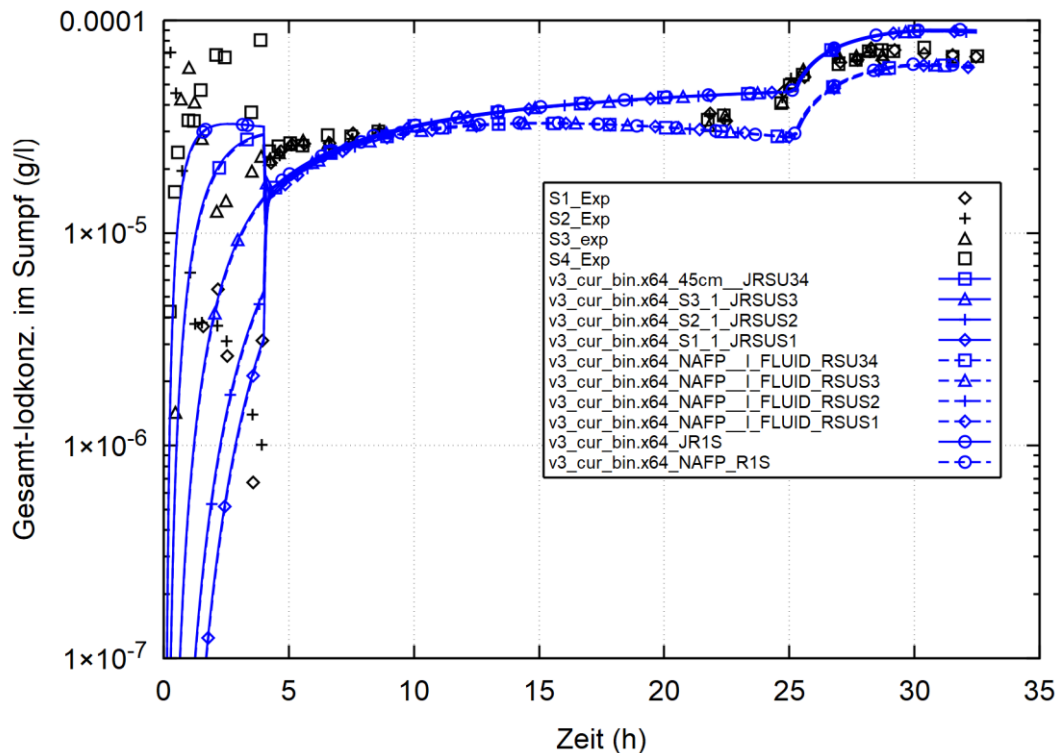


Abb. 2.64 THAI Iod-09, Gesamtiodkonzentration im Sumpf

In der ersten Schichtungsphase zeigen die Iodkonzentrationen Werte bis 10^{-4} g/l in den oberen Schichten, während sie im unteren Bereich mit 10^{-6} g/l um zwei Größenordnungen niedriger sind. Durch die Umwälzpumpe wird in der Grafik instantan nach 4 h die Iodkonzentration im Sumpf homogen verteilt. In der Folge bleiben die Konzentrationen bei Werten von $3 \cdot 10^{-5}$ g/l während der zweiten Phase. In der dritten Phase ab 24,4 h ist eine deutliche Zunahme der Iodkonzentration auf $8 \cdot 10^{-4}$ g/l aufgrund der Abwaschung von Stahl-Oberflächen im THAI-Behälter zu erkennen. Sowohl die anfängliche Schichtung wird in den COCOSYS-Rechnungen gut wiedergegeben als auch die stationäre Phase und die abschließende Kondensationsphase. Im Verlauf des Experiments liegt die NewAFP-Kurve etwas unterhalb der AFP-Kurve. Beide Kurven liegen aber gleich weit von den gemessenen Daten entfernt.

Die I_2 -Konzentration in der Atmosphäre des THAI-Behälters ist in Abb. 2.65 dargestellt.

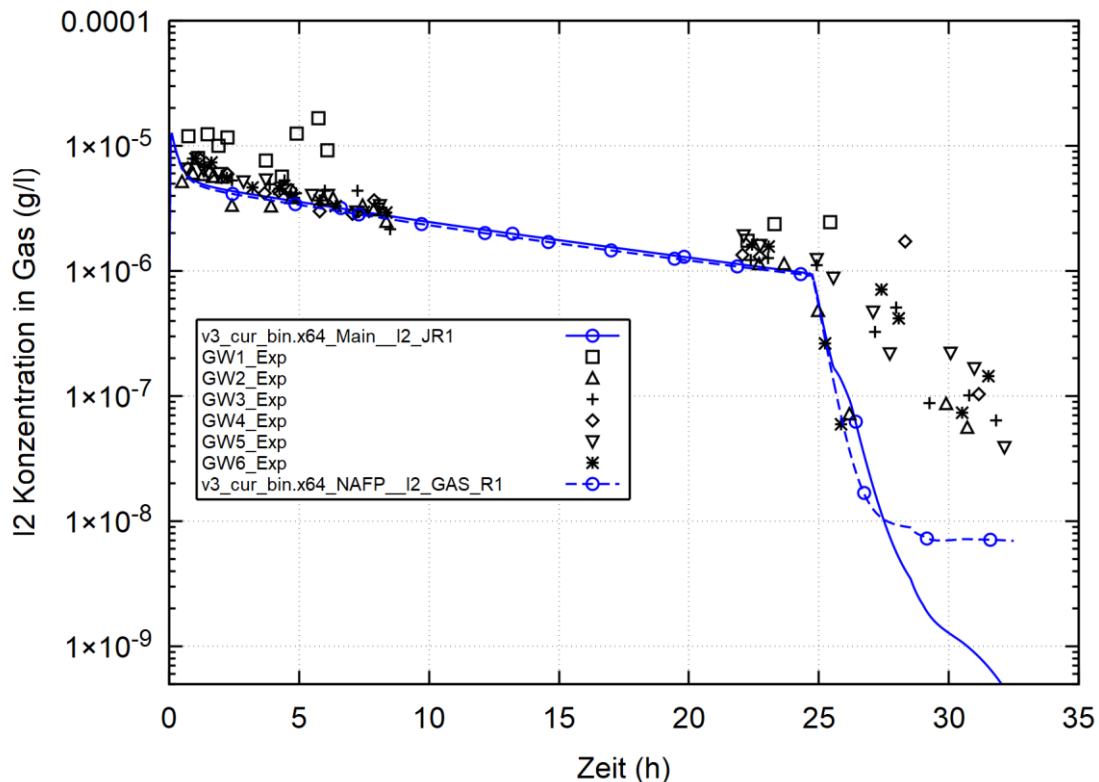


Abb. 2.65 THAI Iod-09, I_2 -Konzentration in der Gasphase

In der ersten Phase liegt sie bei etwa $5 \cdot 10^{-6}$ g/l. Bis 24,4 h, also dem Ende der zweiten Phase, ist die I_2 -Konzentration nur leicht auf einen Wert von $2 \cdot 10^{-6}$ g/l gefallen, bevor sie in der Kondensationsphase deutlich bis auf Werte von $5 \cdot 10^{-8}$ g/l nach 32 h sinkt. Die ersten beiden Phasen werden von AFP als auch NewAFP identisch gut wiedergegeben. In der Kondensationsphase berechnet AFP zu niedrige Konzentrationen mit Werten

kleiner als $1 \cdot 10^{-9}$ g/l. Auch NewAFP unterschätzt die Konzentrationen in der Phase, die aber mit $8 \cdot 10^{-9}$ g/l näher an den experimentellen Werten liegen.

Das anfallende Kondensat wird in THAI Iod-09 über Drainagen in einem externen Tank gesammelt und auch dort sind Iodmessungen durchgeführt worden. Die angefallene Iodmasse in dem externen Tank zeigt Abb. 2.66.

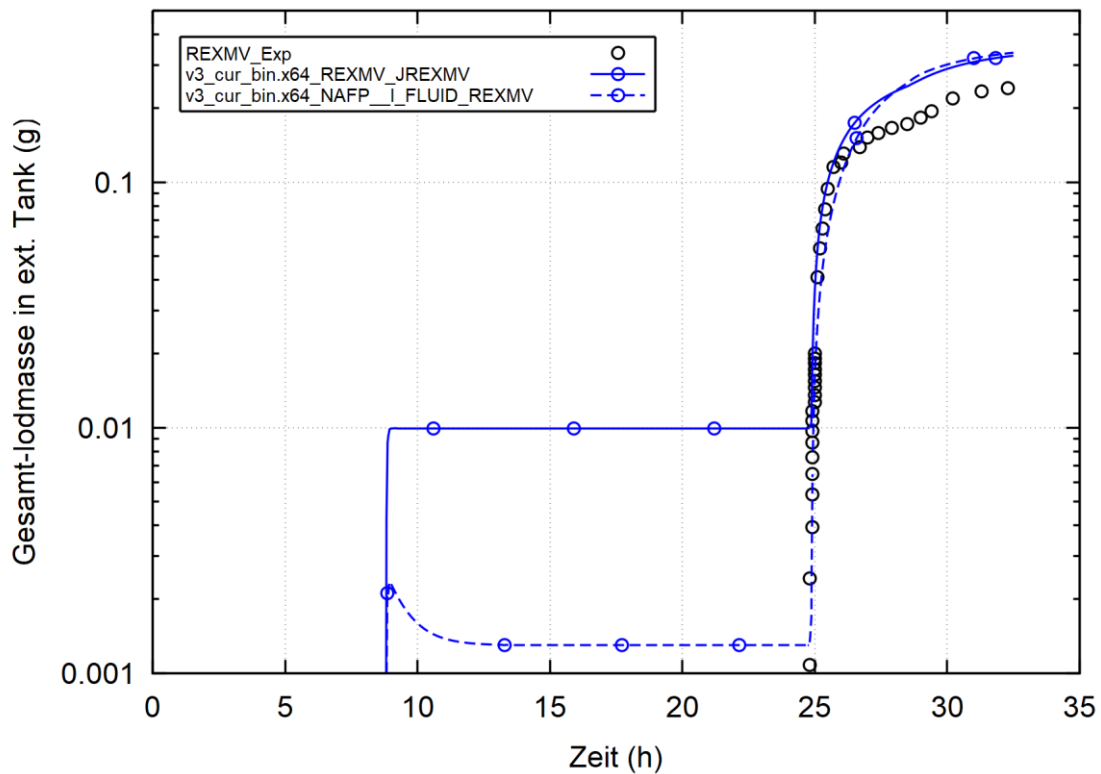


Abb. 2.66 THAI Iod-09, Gesamtiodmasse im Kondensatsammeltank

Experimentelle Werte liegen erst mit anfallendem Kondensat in der letzten Versuchsphase vor. Kleine Werte werden in den COCOSYS-Rechnungen bereits vorher simuliert. Die logarithmische Darstellung zeigt aber eine vermehrte Zunahme nach 25 h. Sowohl AFP und NewAFP berechnen etwas zu hohe Mengen in dem Sammel-tank. Insgesamt ist das Ergebnis im Rahmen der Modellungenauigkeiten in der Iodchemie aber sehr gut.

2.2.6.2.2 THAI Iod-11

Im Versuch THAI Iod-11 wurde das Mehrraumverhalten von Iod in der Gasphase untersucht. Dazu wurde zunächst I_2 in den oberen Teil des Behälters eingespeist. In einem zweiten Schritt ist die Schichtung durch Wärmeabgabe der Heizmäntel und eine so eingestellte Konvektion aufgehoben worden. Dieses ist zusammen mit der Einspeisung

leichten Heliumgases in die untere Behälteratmosphäre geschehen, das als Tracer für die sich einstellende Schichtung dient.

Thermodynamik

Zunächst werden die thermodynamischen Randbedingungen dieses Versuchs erläutert, um die Schichtungsbildung in diesem Experiment darzulegen. Die I₂-Einspeisung beginnt zum Zeitpunkt 0 h mit einer Puff-Freisetzung. Der Absolutdruck im Behälter ist in Abb. 2.67 dargestellt.

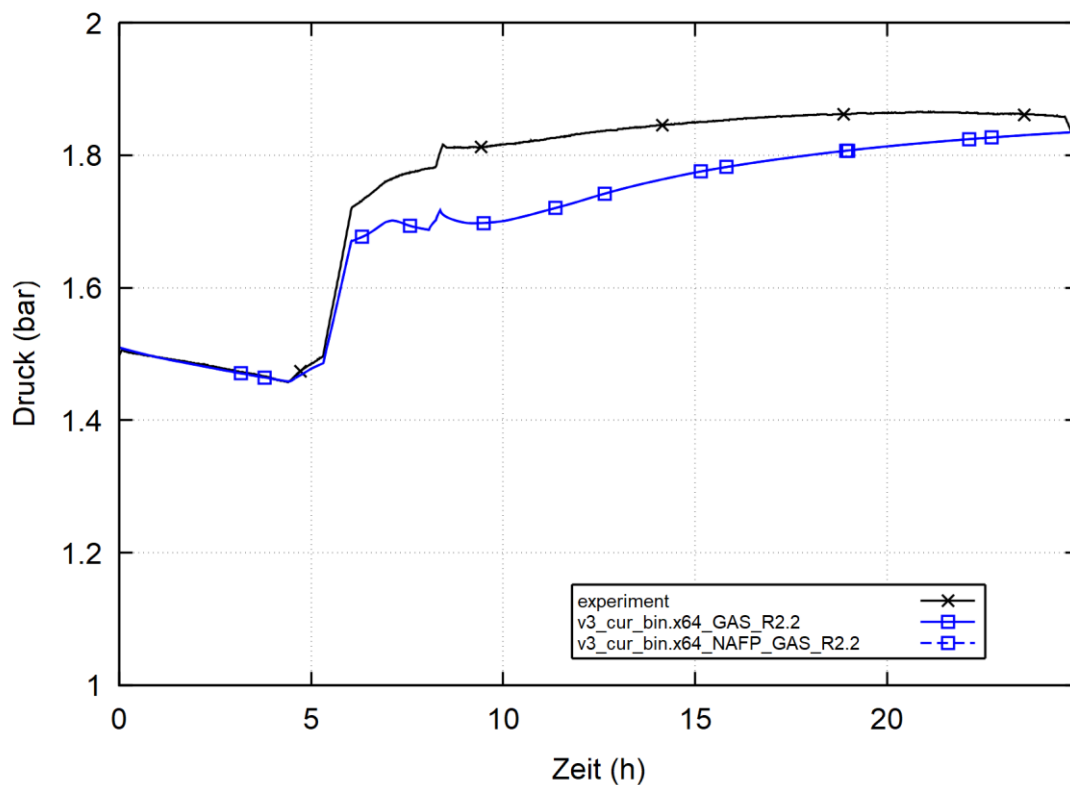


Abb. 2.67 THAI Iod-11, Druck innerhalb des THAI-Behälters

In der ersten Versuchsphase bis etwa 5 h beträgt der Druck etwa 1,5 bar. Die Aufheizphase ist mit einer Druckzunahme auf etwa 1,8 bar nach etwa 5,5 h zu erkennen. In beiden COCOSYS-Rechenfällen mit AFP und NewAFP wird dieser Druckaufbau identisch unterschätzt, wobei die Unterschiede im Vergleich zur Messung gegen Ende des Experiments geringer ausfallen.

Die Temperaturen in zwei verschiedenen Höhen, 2,1 m und 8,4 m, sind in Abb. 2.68 aufgetragen. Im unteren Teil beträgt die Temperatur zu Beginn etwa 30 °C und im oberen 95 °C. Bis zum Beginn der Konvektionsphase bleibt das Temperaturniveau unten

stabil, während es an der oberen Stelle bis auf 90 °C um etwa 5 °C abnimmt. Die folgende Aufheizung schreitet bis 8 h mit 65 °C unten voran, ist dann aber noch nicht abgeschlossen. Ein weiterer Ausgleich ist bis zum Ende des Experiments nach 25 h zu erkennen. Die COCOSYS-Kurven geben dieses Verhalten qualitativ wieder, zeigen aber unabhängig von AFP oder NewAFP eine zu geringe Durchmischung.

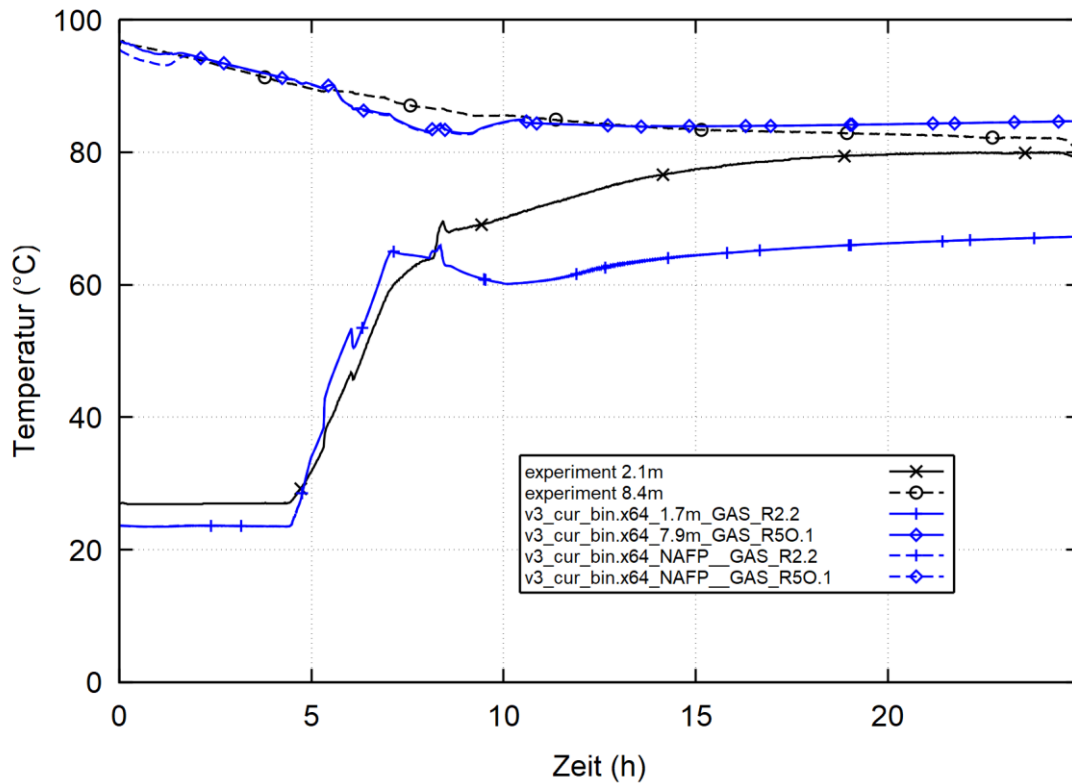


Abb. 2.68 THAI Iod-11, Temperaturen in einer unteren und einer oberen Zone

Um die Geschwindigkeit zu messen, mit der sich die Schichtung abbaut, ist mit der Heizung Helium in den unteren Teil des Behälters eingespeist worden. Die Heliumkonzentrationen in 1,7 m und 8,7 m Höhe sind in Abb. 2.69 dargestellt. Zu erkennen ist, dass sich die Heliumkonzentration nach der Einspeisung bei etwa 5 h, nach etwa 8 h vollständig aufgelöst hat. Dieses Verhalten wird sehr gut von COCOSYS unabhängig von AFP oder NewAFP wiedergegeben. Nach der Durchmischung beträgt die Konzentration etwas weniger als 10 Vol.-% und nimmt aufgrund der steigenden Temperatur und damit zunehmender Verdampfung im weiteren Verlauf leicht ab.

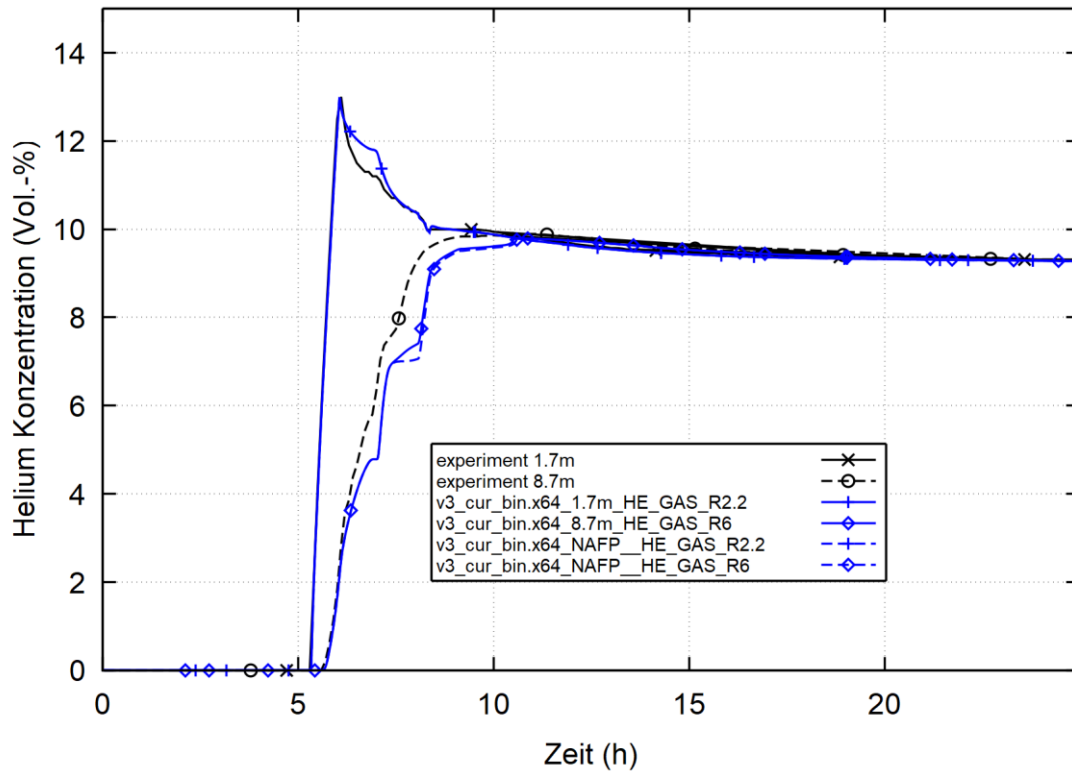


Abb. 2.69 THAI Iod-11, He-Konzentration in einer unteren und einer oberen Zone

Iodchemie

Das Ziel des Versuchs war es zu untersuchen, ob es lokal unterschiedliche Iodkonzentrationen in einem größeren Raum geben kann. In Abb. 2.70 sind die I_2 -Konzentrationen an zwei Positionen oben und unten aufgetragen. Die Schichtung bleibt im Experiment über 5 h stabil mit einer Konzentration von $2 \cdot 10^{-8}$ g/l im unteren Bereich und etwa $2 \cdot 10^{-5}$ g/l im oberen Bereich. Erst in der Vermischungsphase ist ein Ausgleich der Konzentrationen zwischen den Bereichen des Behälters zu erkennen. Dieses Verhalten wird auch in beiden COCOSYS-Rechnungen qualitativ gut wiedergegeben. Die Rechnungen zeigen nach 10 h einen weitgehenden Ausgleich zwischen den Raumbereichen, wobei im Experiment immer noch eine Schichtung zu erkennen ist. Die weitere Ablagerung des Iods bis zum Ende des Experiments ist in der NewAFP-Rechnung weniger ausgeprägt im Vergleich zu AFP. NewAFP überschätzt die Konzentrationen nach 25 h leicht, während AFP diese leicht unterschätzt.

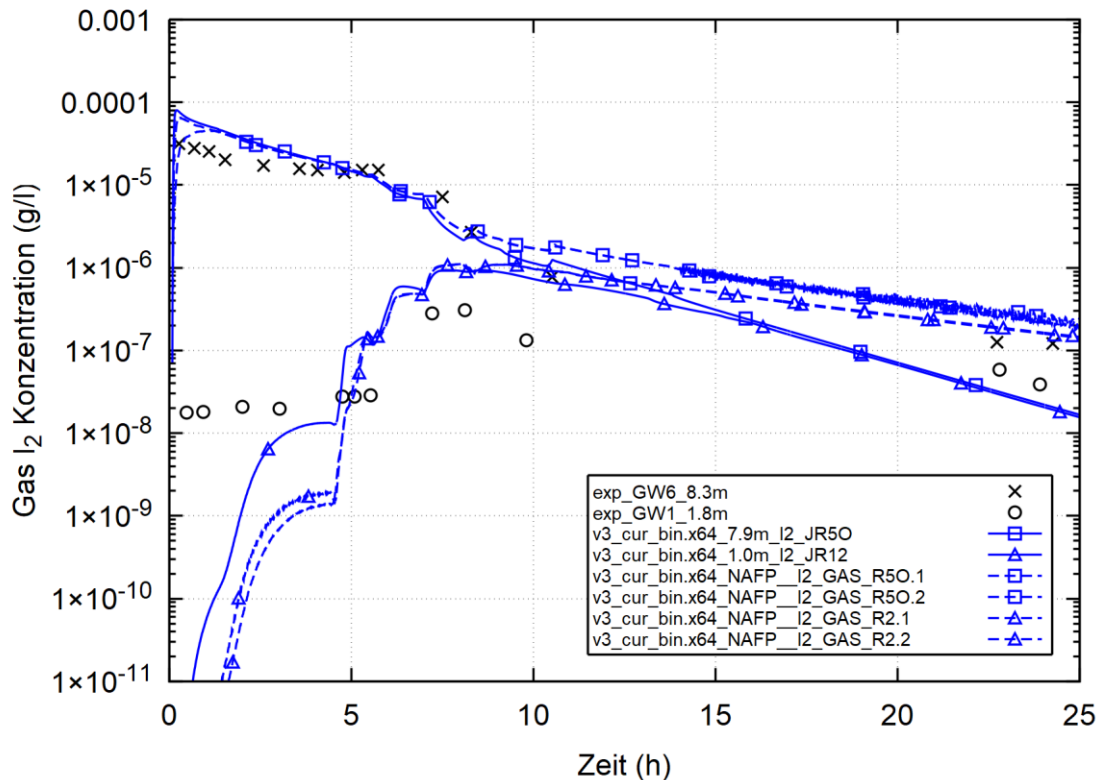


Abb. 2.70 THAI Iod-11, Iodkonzentration auf verschiedenen Höhen des THAI-Behälters

2.2.6.2.3 Phebus RTF-1

Der Test Phebus RTF-1 ist ein kleinskaliger Laborversuch mit einer Strahlungsquelle. Somit werden in diesem Versuch auch die Reaktionen bei vorhandener Dosisleistung untersucht, wobei die Werte über Tabellen im zeitlichen Verlauf vorgegeben werden. Bei der Umsetzung von AFP zu NewAFP stellte sich heraus, dass die Geometrie nicht identisch umzusetzen ist, da die alte AFP-Rechnung unterschiedliche, also inkonsistente, Werte für die Wasseroberfläche im Aerosol- und Chemieteil sowie in der Thermodynamik (THY) benutzt. Im Chemieteil wird die echte Fläche von $0,37 \text{ m}^2$ benutzt, während im THY-Teil der Zone eine Fläche von 10^{-15} m^2 verwendet wird, was die Verdampfung und Kondensation an der Wasseroberfläche unterdrückt. Im Aerosolteil der Zone wird ein Ablagerungskoeffizient für die Bodenfläche (AFLROV) von $0,1 \text{ m}^2/\text{m}^3$ verwendet. Mit dem Volumen der Zone von $0,31 \text{ m}^3$ ergibt sich daraus eine Fläche von lediglich $0,031 \text{ m}^2$, wodurch die Sedimentation von Aerosolpartikeln deutlich kleiner berechnet wird. Nur der Massentransfer gasförmiger Spezies (I_2 , RI) benutzt die korrekte Wasseroberfläche. Derartige Inkonsistenzen in der Wahl der Fläche sind mit NewAFP nicht mehr erlaubt, da die Geometrien der Wasseroberfläche aus dem THY-Modul jetzt

einheitlich auch für die Berechnung des Massentransfers an der Wasseroberfläche sowie die Sedimentation von Aerosolen verwendet werden. Außerdem wird in AFP mit der Option KAEJOD = 1 gerechnet, bei der für IO_x nicht die wirkliche Aerosolkomponente berücksichtigt wird, sondern die Ablagerungen der ersten definierten Aerosolkomponente benutzt werden.

Iodchemie

Die Auswirkungen der unterschiedlichen Beschreibung der Wasseroberfläche lassen sich anhand der Spezies in der Gasphase erkennen. Die Konzentrationen der gasförmigen Spezies I_2 und RI sind in Abb. 2.71 dargestellt. Nur für die theoretischen Kurven ist auch das Aerosol IO_x eingetragen.

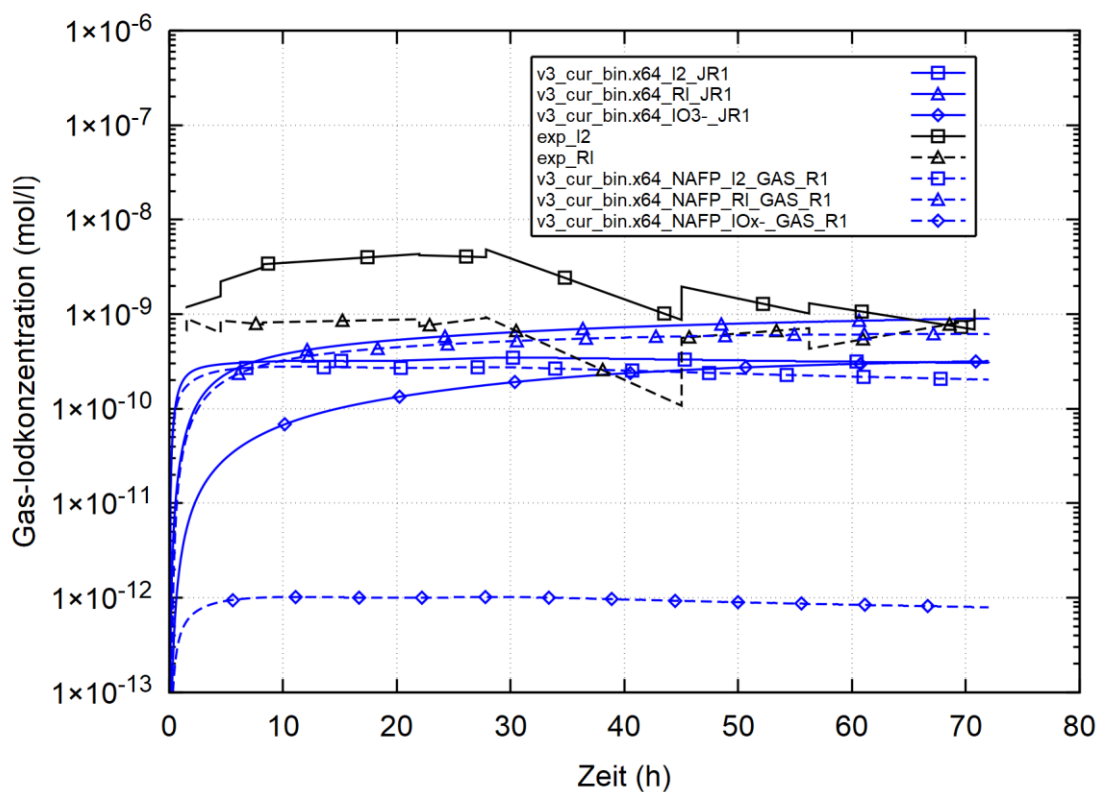


Abb. 2.71 RTF Phebus1, Konzentration von Iodspezies in der Gasphase

Die gasförmigen Spezies sind in der Rechnung mit NewAFP nur unwesentlich geringer als mit AFP. Während die Konzentrationen im Vergleich zum Experiment in den ersten 30 h unterschätzt werden, werden sie am Ende gut wiedergegeben. Im Vergleich zum Experiment zeigen die berechneten Kurven keinen Konzentrationsabfall zwischen 30 und 50 h. Das Aerosol IO_x weist eine um mehr als zwei Größenordnungen niedrigere Konzentration mit NewAFP als mit AFP auf. Das ergibt sich aus zwei Effekten. Zum

einen ist die Sedimentationsfläche für das Aerosol um einen Faktor 10 größer und zum anderen ist die Verdampfung an der Wasseroberfläche realistisch gerechnet, wodurch die Kondensation an den Partikeln berücksichtigt wird. Da größere Partikel schwerer sind, nimmt auch durch diesen Effekt die Sedimentation zurück in den Sumpf zu. Außerdem wird in AFP nicht mit der eigentlichen Aerosolkomponente IO_x gerechnet, weshalb diese Simulation als nicht realistisch bewertet werden muss.

Die Gesamtiodykonzentration in der Gasphase ist in Abb. 2.72 aufgetragen. Da der IO_x -Beitrag im Vergleich zu den gasförmigen Spezies gering ist, ist die Gesamtabweichung nicht so stark. Diese ergibt sich im Wesentlichen aus der geringen berechneten Konzentration von I_2 und RI .

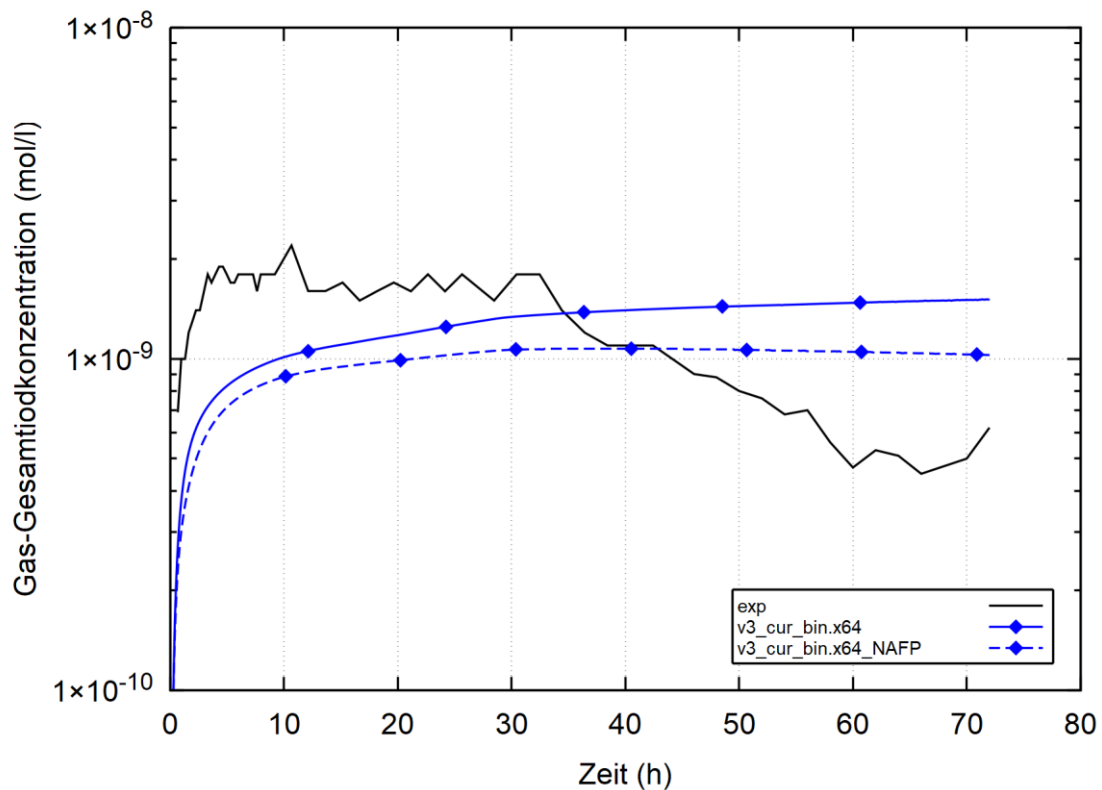


Abb. 2.72 RTF Phebus1, Gesamtiodykonzentration in der Gasphase

Die Gesamtiodykonzentration im Sumpf ist in Abb. 2.73 dargestellt. Die molare Konzentration im Wasser ist mit 10^{-5} mol/l um etwa vier Größenordnungen höher als in der Atmosphäre. Die Messwerte fallen schneller als die Simulation, was auf Ablagerungen auf Oberflächen schließen lässt, da die Konzentrationen in der Gasphase nicht so stark unterschiedlich sind. Ein Unterschied zwischen AFP und NewAFP ist auf dieser Skala nicht zu erkennen. Der Einfluss der Modellunterschiede bezieht sich also nur auf die Gasphase. Dabei muss berücksichtigt werden, dass die Freisetzung in die Atmosphäre den

Anteil der flüchtigen Spezies und somit einen möglichen Quellterm in die Umgebung bestimmt.

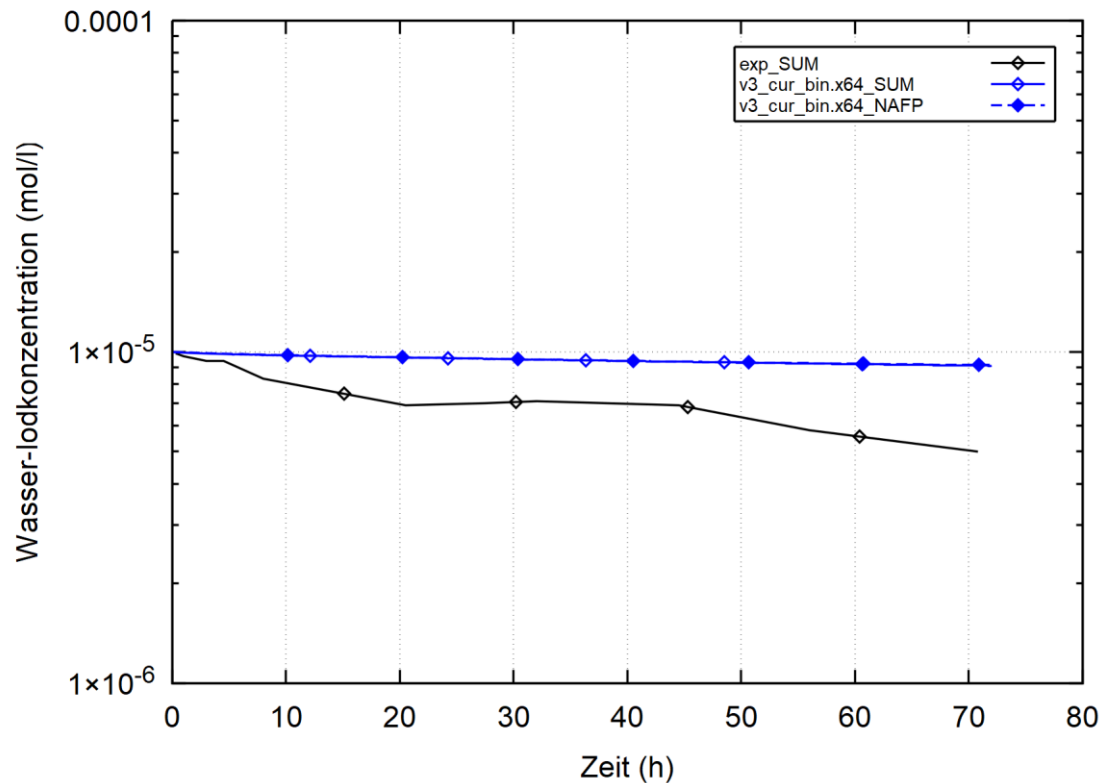


Abb. 2.73 RTF Phebus 1, Iodkonzentration im Wasser gelöst

2.2.6.3 Fazit zum Regressionstesten von NewAFP

Anhand der Analyse des Versuchs VANAM-M3 wird deutlich, dass das Aerosolmodell in NewAFP sowohl trockene als auch nasse Ablagerung von unlöslichem und löslichem Aerosolmaterial korrekt berechnen kann. Obwohl das eigentliche Aerosolmodell im Vergleich zu AFP nicht verändert ist, bestehen Unterschiede in der verwendeten Geometrie. So werden in NewAFP die Aerosolablagerungskoeffizienten aus den THY-Strukturen berechnet und eine zeitabhängige Berechnung in Abhängigkeit von Zonenfüllständen wird dadurch erst möglich. Von Seiten der Aerosolphysik ist das SPARC-Modell noch nicht nach NewAFP transferiert, weshalb der POSEIDON-Versuch zum Thema Pool Scrubbing noch nicht berücksichtigt ist.

Auch die chemischen Versuche sind gut nachgerechnet worden. In THAI Iod-09 zeigt sich, dass das Abwaschen chemischer Spezies von Stahloberflächen simuliert werden kann. Ein Versuch mit Abwaschen von nassen Farbanstrichflächen fehlt noch in der Regressionstestmatrix. Der Versuch THAI Iod-11 bestätigt die Modellierung von

Schichtungen in einer Mehrraumgeometrie. Phebus RTF-1 ist gewählt worden, da dieser Versuch mit Dosisleistung durchgeführt wurde. Das allgemeine Iodverhalten wird mit NewAFP korrekt im Rahmen der typischen Unsicherheiten wiedergegeben, allerdings zeigten sich speziell bei der Betrachtung des IO_x -Aerosols im Test Phebus RTF-1, dass mit NewAFP eine konsistentere Darstellung der Geometrie zwischen THY, Aerosolphysik und Iodchemie gegeben ist. Insgesamt ist eine 1:1-Umstellung der Geometrie zwischen AFP und NewAFP nicht immer möglich und Überlegungen sollten angestellt werden, um die speziellen Anforderungen der AFP-Versionen bzgl. Nodalisierung zu berücksichtigen. So bietet NewAFP keine Möglichkeit, mehrere THY-Zonen zu einer Iodzone zusammenzufassen. Im Gegenteil ist auch ein höherer Detaillierungsgrad möglich, bei dem in jeder THY-Zone und sogar auf einzelnen Strukturen ein Wasservolumen mit Iodchemie gerechnet werden kann.

Der Rechenaufwand hat sich bei NewAFP im Vergleich zu AFP aufgrund des höheren Detaillierungsgrades erhöht. Für reine Aerosolrechnungen ist der Mehraufwand gering. Allerdings gibt es Rechenfälle mit chemischer Simulation, bei denen der Realzeit-Faktor unter 1 fällt, womit die Rechnung länger dauert als das Experiment. Dabei ist zu beachten, dass in einer nachfolgenden Version noch Verbesserungen im gesamten COCOSYS-System durchgeführt worden sind, die nicht NewAFP-spezifisch sind. Genauere Schlussfolgerungen lassen sich daher erst mit Rechnungen der letzten Entwicklungsversion ziehen.

2.3 Validierung des CCI-Moduls in COCOSYS

2.3.1 ACE-Experimente

Im Falle eines Unfalls mit nachfolgendem RDB-Versagen gelangt das geschmolzene Kernmaterial auf das Betonfundament der Reaktorgrube, wodurch nachfolgend eine Wechselwirkung zwischen Schmelze und Beton stattfindet. Während dieser Schmelze-Beton-Wechselwirkung werden Spaltprodukte aus der Schmelzeoberfläche freigesetzt, welche zum Quellterm ins Containment beitragen. Zur Abschätzung dieses Quelltermbeitrags sind Kenntnisse über die ablaufenden Phänomene, welche zur Spaltproduktfreisetzung beitragen, von großer Bedeutung.

Zur Simulation dieser Phänomene steht in COCOSYS ein spezielles Modell zur Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze zur Verfügung. Dieses Modell wurde ursprünglich von VEIKI (Ungarn) für das MEDICIS-Modul von ASTEC entwickelt und in einem späteren Schritt von der GRS ebenfalls in COCOSYS übernommen. Dieses SpaltproduktfreisetzungsmodeLL im MEDICIS-Modul wurde bereits von VEIKI /KÓŠ 07a/ sowie von der GRS anhand einzelner ausgewählter ACE-Versuche validiert /SPE 11/. Später wurde von der Ruhr-Universität Bochum (RUB) das MEDICIS-Modul in COCOSYS 2.4v3+ anhand aller ACE-Versuche erneut validiert /AGE 17/, /THO 97/. Dabei wurde eine Erweiterung des SpaltproduktfreisetzungsmodeLLs erarbeitet, in der die Modellbasis sowohl für den Freisetzungsmechanismus der Verdampfung als auch für die Aerosolfreisetzung ergänzt wurde. Nach dem Abschluss der Validierungsarbeiten wurden die durchgeführten Modellerweiterungen und die damit verbundenen Ergänzungen bzw. Änderungen im Quellcode von COCOSYS an die GRS übergeben.

Ziel der vorliegenden Validierungsarbeiten ist es, den aktuellen Stand der Modellierung im CCI-Modul von COCOSYS hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung unabhängig zu den RUB-Aktivitäten zu überprüfen.

Dazu wurden mit dem CCI-Modul Nachrechnungen ausgewählter Versuche aus der ACE-Versuchsreihe der Phase C des experimentellen ACE-Programms beim Argonne National Laboratory (ANL) durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Nachrechnungen sind in dem folgenden Abschnitt ausführlich diskutiert.

2.3.1.1 Experimentelle Untersuchungen aus dem ACE-Programm

Zur Untersuchung von Ex-Vessel-Phänomenen wurde das ACE-Programm (**A**dvanced **C**ontainment **E**xperiments Program) unter Leitung des Electric Power Research Institute (EPRI) und unter Beteiligung weiterer neunzehn Organisationen, unter anderem der GRS, durchgeführt /THO 97/. Dieses Programm bestand insgesamt aus den vier Test-Phasen A, B, C und D. Die hier relevante dritte Phase C bestand dabei aus sieben ACE-Versuchen, welche in den Argonne National Laboratories (ANL) von 1988 bis 1991 durchgeführt wurden. Ziel dieser Versuchsreihe war die Untersuchung von MCCI-Phänomenen sowie der Spaltproduktfreisetzung während der Beton-Schmelze-Wechselwirkung.

2.3.1.2 ACE-Versuchsaufbau

Der Versuchsaufbau der ACE-Versuche bestand aus einem inneren geschlossenen Gehäuse, in welchem sich Betonfundament und Schmelze befanden. Diese wurden von einem System zur Beheizung mit entsprechender Leistungszufuhr über Wolframelektroden, einem Kühlsystem mit Kühlpanelen an den beiden elektrodenfreien Außenwänden sowie Messinstrumenten umgeben. Das Betonfundament hatte eine quadratische Grundfläche von $0,25 \text{ m}^2$ ($0,50 \text{ m} \times 0,50 \text{ m}$) und eine Höhe von $0,3 \text{ m}$ (s. Abb. 2.74).

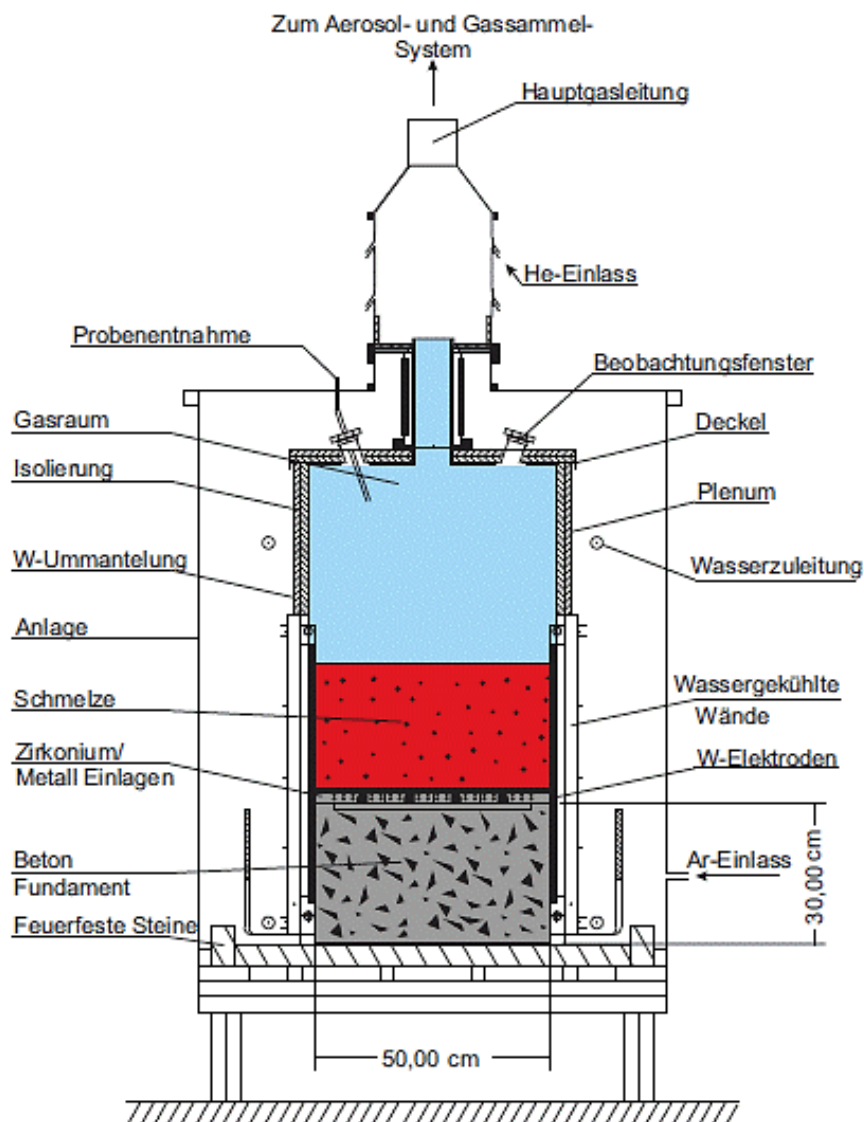


Abb. 2.74 Versuchsaufbau der ACE-Anlage /AGE 17/

Der Deckel des Gehäuses ermöglichte die Entnahme von Aerosolproben sowie die optische Überwachung der Schmelzeoberfläche mit Pyrometer und Videokamera. Der Leerraum zwischen Schmelzeoberfläche und Deckel war mit inertisiertem Gas (Helium)

gefüllt (s. Abb. 2.74). Das anschließende Gassystem beinhaltete Vakuumpumpen, Filter sowie Massenspektrometer. Zur Erfassung der anfallenden Daten waren je nach Versuch bis zu 200 Messinstrumente verbaut. In den Versuchen wurde zunächst jeweils ca. 300 kg prototypisches Kernmaterial für den jeweils betrachteten LWR-Reaktortyp mit einer elektrischen Heizleistung von 35 – 100 kW in einen geschmolzenen Zustand überführt und weiterhin elektrisch beheizt. Dabei wurden Parameter wie der Betontyp, die Schmelzezusammensetzung sowie der Oxidationsgrad der Zirkoniummasse variiert /THO 97/. In der ACE-Versuchsanlage wurde nur die eindimensionale Erosion untersucht, so dass keine seitliche, d. h. radiale Erosion berücksichtigt wurde.

Die Versuche lieferten generell eine wichtige experimentelle Datengrundlage für die Modellvalidierung der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung.

2.3.1.3 Auswahl von Experimenten zur Nachrechnung

Zur Validierung des CCI-Moduls von COCOSYS hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze wurden aus den von der Ruhr-Universität Bochum zur Verfügung gestellten Daten insgesamt vier ACE-Versuche ausgewählt. Die Auswahl der ACE-Versuche wurde auf der Basis der verfügbaren sowohl experimentellen Daten als auch vorhandenen Anfangs- und Randbedingungen durchgeführt, so dass ein großes Spektrum von Testparametern wie Betontyp, Schmelzezusammensetzung, Oxidationsgrad der Schmelze sowie Spaltproduktspezies abgedeckt wurde. Die hier ausgewählten ACE-Versuche und deren Anfangs- und Randbedingungen sind in Tab. 2.5 zusammengestellt.

Tab. 2.5 Anfangs- und Randbedingungen der COCOSYS-Nachrechnungen ausgewählter ACE-Experimente /AGE 17/

Parameter	ACE L2	ACE L6	ACE L7	ACE L8
Betontyp	silikatisch (S)	silikatisch (S)	kalksandstein (LCS)	kalksteinhaltig (L)
Reaktortyp	DWR	DWR	SWR	DWR
Oxidationsgrad Zr [%]	70	30	70	70
Metallmasse [kg]	13,6	34,0	19,6	14,7
Absorbermaterial	-	Ag, In	B ₄ C	Ag, In

Ziel des ACE-L2-Versuchs war es, die Wechselwirkung einer typischen DWR-Schmelze mit einem niedrigen Metallanteil bzw. einem Zirkonium-Oxidationsgrad von 70 %, mit einem Fundament aus silikatischem Beton zu untersuchen. Die Betonzusammensetzung entsprach dabei der in den vorherigen BETA-Versuchen verwendeten Zusammensetzung mit einem niedrigen Gasanteil.

Der Fokus des ACE-L6-Versuchs lag dagegen auf der Untersuchung der Wechselwirkung zwischen einer typischen DWR-Schmelze mit einem hohen anfänglichen Metallanteil in der Schmelze bzw. dem geringsten Zirkonium-Oxidationsgrad von 30 % sowie Absorbermaterialien Silber (Ag) und Indium (In) und einem Fundament aus silikatischem Beton. Die Betonzusammensetzung entsprach der in dem ACE-L2-Versuch verwendeten Zusammensetzung. ACE L6 war der einzige Versuch, in dem die Freisetzung des Spaltprodukts Ruthenium (Ru) untersucht wurde.

Im ACE-L7-Versuch kam eine typische SWR-Schmelze mit einem Zirkonium-Oxidationsgrad von 70 % und einem Anteil des Absorbermaterials Borcarbid (B_4C) sowie einem Betonfundament aus Kalksandstein (Limestone/Common Sand – LCS) zum Einsatz.

Im ACE-L8-Versuch wurde die Wechselwirkung einer typischen DWR-Schmelze mit einem hohen anfänglichen Zirkonium-Oxidationsgrad von 70 % sowie Absorbermaterialien Silber (Ag) und Indium (In), mit einem Betonfundament aus Kalkstein (Limestone (L)) untersucht. Eine Besonderheit des ACE L8-Versuches war, dass die eingespeiste Leistung abgesenkt wurde, nachdem die Oxidationsreaktionen der metallischen Schmelzebestandteile abgeschlossen waren. Dies sollte der Nachzerfallswärme eines abgeschalteten Reaktors entsprechen /AGE 17/.

2.3.1.4 Nachrechnungen der ausgewählten ACE-Experimente

In diesem Kapitel wird zunächst die Modellierung der ausgewählten ACE-Versuche dargestellt. Dies beinhaltet die COCOSYS-Modellierung des Versuchsaufbaus, Rand- und Anfangsbedingungen sowie die Modellierung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und der Spaltproduktfreisetzung mit dem CCI-Modul von COCOSYS.

2.3.1.4.1 COCOSYS-Datensatz

Für die Simulation der ACE-Versuche wurde von der GRS der von der Ruhr-Universität Bochum entwickelte COCOSYS-Datensatz /AGE 17/ übernommen. Da in diesem

Datensatz die alte Eingabestruktur des MEDICIS-Moduls in COCOSYS 2.4v3+ verwendet wurde, musste diese zunächst auf die neue Eingabestruktur des CCI-Moduls in COCOSYS 3.0.1 umgestellt werden.

Der COCOSYS-Datensatz umfasst eine Raumzone (*CAVITY*) für den Gasraum der ACE-Versuchsanlage. Zusätzlich wird eine Zone (*HE-TANK*) eingeführt, aus der zu Beginn der Simulation Inertgas (Helium) in den Gasraum zwischen Schmelzeoberfläche und Deckel eingespeist wird. Die Umgebung wird auch als eine Raumzone (*ENVIRON*) abgebildet. Die Abb. 2.75 zeigt die COCOSYS-Nodalisierung der ACE-Versuchsanlage.

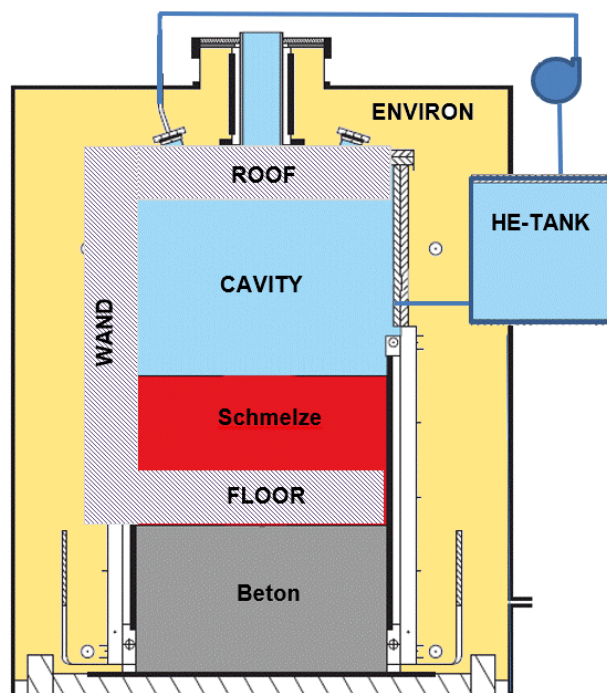


Abb. 2.75 COCOSYS-Nodalisierung der ACE-Versuchsanlage

Zur Modellierung der Zonen wird das Nichtgleichgewichtsmodell von COCOSYS verwendet. Die Zusammensetzung der Atmosphäre (Luft, Dampf, sonstige Gase) kann in COCOSYS auf verschiedene Arten definiert werden. Wie bereits erwähnt, wurde in den ACE-Versuchen der Gasraum oberhalb der Schmelzeoberfläche bis zum Deckel der Versuchsanlage mit Inertgas (Helium) gefüllt /AGE 17/. Aus diesem Grund wird im COCOSYS-Datensatz angenommen, dass die Gasatmosphäre zwischen Schmelzeoberfläche und Deckel in der Zone (*CAVITY*) nur aus Helium (100 % He) besteht. So wird für die Modellierung der Gasatmosphäre die Kombination aus Druck, Gastemperatur und der entsprechenden Heliumpartialdrücke verwendet /ARN 19/.

Die Festlegung bzw. die Berechnung der Gastemperatur in COCOSYS ist von großer Bedeutung, da die Temperaturdifferenz an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre die Leistungsverluste durch die Schmelzeoberfläche bestimmt. Die Gastemperatur oberhalb der Schmelze wird in COCOSYS durch die Kopplung des CCI-Moduls an das THY-Modul berechnet. Basierend auf experimentellen Messwerten für die Gastemperatur wird im COCOSYS-Datensatz die Anfangstemperatur der *CAVITY*-Zone auf 2.000 K gesetzt. In den Nachrechnungen der Ruhr-Universität Bochum /AGE 17/ wurde dagegen eine niedrigere Gastemperatur von 1.200 K angenommen.

Der vereinfachte COCOSYS-Datensatz umfasst auch die Boden-, Wand- und Deckelstrukturen der ACE-Versuchsanlage unter Berücksichtigung der entsprechenden Abmessungen, Materialien und ihren Eigenschaften. Der *CAVITY*-Zone werden insgesamt drei Wärmeleitstrukturen zugeordnet (s. Abb. 2.75). Die Bodenstruktur (Betonfundament) wird durch eine horizontale Wärmeleitstruktur (*FLOOR*) modelliert, die zu Beginn der Simulation durch die Schmelze ersetzt wird. Die Wand- und Deckelstrukturen werden entsprechend mit einer vertikalen (*WAND*) und einer horizontalen (*ROOF*) Wärmeleitstruktur abgebildet (s. Abb. 2.75). Über die Modellierung der Seitenwandstruktur werden auch die Leistungsverluste durch die Kühlung der Wände der Versuchsanlage als Randbedingung berücksichtigt. Für alle wärmeleitenden Strukturen wird das neue kombinierte CO1-Wärmeübergangsmodell in COCOSYS angewendet. Zusätzlich wird das WWR-Wärmeübergangsmodell aktiviert, um die Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche zur seitlichen Wandstruktur sowie die senkrechte Wärmestrahlung zur Deckelstruktur zu berücksichtigen /ARN 19/. Dabei kommen die Sichtfaktoren (Viewfaktoren) zum Einsatz, welche die Verteilung der Strahlung aus der Schmelze auf die Wand- und Deckelstrukturen angeben. Diese wurden für jeden ACE-Versuch experimentell ermittelt /THO 97/. Die von der GRS angegebenen Sichtfaktoren im Vergleich zu den von der Ruhr-Universität Bochum (RUB) verwendeten Werten sind in Tab. 2.6 dargestellt.

Tab. 2.6 Vergleich der Sichtfaktoren für die Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche in der Simulation ausgewählter ACE-Experimente mit COCOSYS

Sichtfaktoren	ACE L2		ACE L6		ACE L7		ACE L8	
	GRS	RUB	GRS	RUB	GRS	RUB	GRS	RUB
Wandstruktur	0,58	1,0	0,52	1,0	0,54	1,0	0,60	1,0
Deckelstruktur	0,42	-	0,43	-	0,42	-	0,40	-

2.3.1.4.2 Anfangs- und Randbedingungen im CCI-Modul

Geometrie der Versuchsanlage

Die ACE-Versuche wurden in einem Gehäuse, bestehend aus einem Betonfundament mit der quadratischen Grundfläche von $0,25 \text{ m}^2$ ($50 \times 50 \text{ cm}$), durchgeführt. Da die Modellierung der Reaktorgrube im CCI-Modul von COCOSYS auf der Annahme einer zylindrischen, axialsymmetrischen Geometrie basiert, wird für die Simulation der ACE-Versuche die quadratische Fläche des Betonbodens in eine kreisförmige Fläche mit entsprechendem Radius von $0,28 \text{ m}$ umgerechnet (s. Abb. 2.76). Hierdurch wird für die Simulation sichergestellt, dass die Rechenergebnisse mit den experimentellen Messdaten vergleichbar sind.

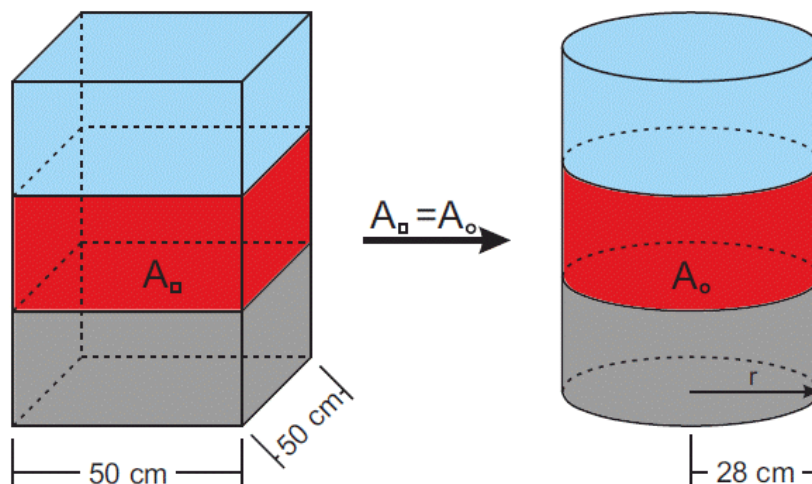


Abb. 2.76 Umrechnung der quadratischen Geometrie der ACE-Versuchsanlage in eine axialsymmetrische Geometrie im CCI-Modul von COCOSYS /AGE 17/

Zusammensetzung der Schmelze

In den ACE-Versuchen wurden ca. 300 kg prototypisches Kernmaterial für einen DWR bzw. SWR mit einem Oxidationsgrad von 30 bis 70% in einem geschmolzenen Zustand verwendet. Für die Modellierung können jedoch von diesen prototypischen Materialien nur chemische Verbindungen berücksichtigt werden, welche in der Schnittstelle zwischen dem CCI-Modul und der Materialdatenbank (MDB) zur Verfügung stehen. Im CCI-Modul können auch keine metallischen Legierungen betrachtet werden. Daher wurden für die Simulation die metallischen Legierungen, wie z. B. Zirkaloy-4, Stahl Typ 304 SS, auf ihre Bestandteile umgelegt /AGE 17/.

Weiterhin wurde auch die Tatsache berücksichtigt, dass bereits während der Aufheizungsphase der Schmelze nichtkondensierbare Gase (CO_2) aus dem Beton entweichen und zu Oxidationsreaktionen, insbesondere des Zirkoniums, führten /AGE 17/. Somit liegt zu Beginn der Betonerosion, und folglich zu Simulationsbeginn, nicht mehr die ursprüngliche gesamte Masse des Zirkoniums im nichtoxidierten Zustand vor. Für die Festlegung der Schmelzmassen zu Beginn der Simulation wurden daher die ursprünglichen Massen von Zr und ZrO_2 basierend auf den anteilig freigesetzten Oxidationsenergien während beider Versuchsphasen unter Berücksichtigung des Zirkaloyanteils neu berechnet /AGE 17/.

Bei der Festlegung der Zusammensetzung der Schmelze ist auch zu beachten, dass während des Versuchsablaufs nicht die gesamte Schmelzmasse in einen geschmolzenen Zustand überführt werden konnte. Da hierfür keine eindeutigen experimentellen Daten über den Segregationsgrad der Schmelze vorlagen, konnten keine zuverlässigen Aussagen darüber getroffen werden, zu welchem Anteil sich tatsächlich die Schmelze während der Versuchsdauer in einem geschmolzenen Zustand befand /AGE 17/. Daher wird hier auch die Annahme getroffen, dass sich die Segregation nur auf die hochschmelzenden Bestandteile UO_2 und ZrO_2 bezieht.

Laut /AGE 17/ wird für den Test ACE L2 eine Masse von 154 kg als nicht geschmolzen angenommen. Der Test ACE L6 wird mit einer maximalen Segregation von 40 % sowie ACE L7 mit einer Segregation von 45 % betrachtet. Für den ACE-L8-Versuch wird gemäß dem Validierungsdatensatz von /AGE 17/ eine Segregation von 48 % gewählt. Die endgültige Anfangsmasse der Schmelze für die Simulation der ausgewählten ACE-Versuche mit dem CCI-Modul von COCOSYS ist in Tab. 2.7 dargestellt.

Tab. 2.7 Anfangsmasse der Schmelze für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mithilfe des CCI-Moduls von COCOSYS

Spezies	Schmelzmasse [kg]			
	ACE L2	ACE L6	ACE L7	ACE L8
UO_2	92,9	131,4	103,7	110,0
ZrO_2	23,2	17,6	39,4	24,0
Zr	4,9	14,9	9,7	9,8
SiO_2	20,9	16,9	12,5	3,4
CaO	3,0	7,3	11,5	20,6
Cr	-	1,8	0,1	-
Ni	-	0,9	0,1	-
Fe	-	6,4	0,4	-

Für die Simulation wurde eine homogene Schmelzekonfiguration angenommen. Diese Annahme steht in Übereinstimmung mit den experimentellen Beobachtungen /THO 97/, dass während der Versuchsphase die Schmelze aufgrund der aufsteigenden Gasblasen aus dem erodierten Beton vollständig vermischt wurde. Diese wurde ebenfalls in vorangegangenen Validierungsarbeiten der ACE-Versuche, sowohl im Bereich der Schmelze-Beton-Wechselwirkung /CRA 07/ als auch im Bereich der Spaltproduktfreisetzung /KÓŠ 07a/, /ARN 22/, /SPE 11/, getroffen.

Zusammensetzung des Betons

Die hier ausgewählten ACE-Versuche wurden mit unterschiedlichen Zusammensetzungen des Betons durchgeführt. Für diese Versuche kommen insgesamt drei verschiedene Betontypen, nämlich silikatisch (S), kalksandstein (LCS) und kalksteinhaltig (L) zum Einsatz, welche sich insbesondere in ihren SiO_2 -CaO- CO_2 -Verhältnissen unterscheiden.

Für die experimentelle Zusammensetzung der verschiedenen Betontypen wurde eine Vielzahl von Materialien verwendet, von welchen jedoch nur bestimmte Hauptkomponenten mit ihren Anteilen in den Simulationen berücksichtigt werden können. Wie bei der Zusammensetzung der Schmelze können in der Simulation nur chemische Verbindungen (SiO_2 , CaO, Al_2O_3 , MgO und usw.) berücksichtigt werden, welche in der Schnittstelle zwischen dem CCI-Modul und der Materialdatenbank (MDB) zur Verfügung stehen.

Außerdem muss in der Simulation die Betonzusammensetzung so angegeben werden, dass die Gesamtsumme der Anteile der Hauptbestandteile 100 % ergibt. Daher wurden die experimentellen Hauptbestandteile, welche in der Modellbasis verfügbar sind, anteilmäßig auf 100 % normiert. Die Zusammensetzung unterschiedlicher Betontypen für die Simulation ausgewählter ACE-Versuche mit dem CCI-Modul von COCOSYS ist in Tab. 2.8 dargestellt.

Tab. 2.8 Zusammensetzung des Betons für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mithilfe des CCI-Moduls von COCOSYS

Spezies	Anteile [%]		
	ACE L2, ACE L6	ACE L7	ACE L8
	silikatisch	kalksandstein	kalksteinhaltig
SiO_2	71,79	29,33	6,50
CaO	14,05	26,93	48,15
Al_2O_3	4,16	3,63	1,78

Spezies	Anteile [%]		
	ACE L2, ACE L6	ACE L7	ACE L8
	silikatisch	kalksandstein	kalksteinhaltig
MgO	0,73	9,95	3,78
Fe ₂ O ₃	1,04	1,66	0,94
H ₂ O	3,83	6,32	3,92
CO ₂	4,40	22,18	34,93

Modellierung des Leistungseintrags

In der ACE-Versuchsanlage wurden 1-dimensionale Experimente durchgeführt, in denen nur die Erosion in axialer Richtung untersucht wurde /THO 97/. Diese wird im CCI-Modul von COCOSYS durch eine 1-dimensionale CCI-Modellierung, in welcher nur der Wärmeübergang in axialer Richtung an der Grenzfläche Schmelze/Beton bzw. Schmelze/Atmosphäre betrachtet wird, simuliert.

In den ACE-Versuchen wird die Schmelze von außen mit einer elektrischen Leistung P_{in} beheizt, welche der Bruttoleistung entspricht. Zusätzlich wird die Versuchsanlage über die Wandstrukturen mit Wasser gekühlt /THO 97/. Daher muss die im Experiment eingespeiste Leistung P_{in} (Bruttoleistung) für die Simulation um die Seitenverluste P_k , welche der abgeführten Kühlleistung der Wandstrukturen entsprechen, reduziert werden. Daraus ergibt sich eine korrigierte (verringerte) Nettoleistung P_N . Dabei setzt sich die Kühlleistung der Wandstrukturen aus dem Anteil P_{cond} , welcher durch direkten Kontakt zwischen der Schmelze und der Wand entsteht, und dem Anteil $P_{seitlich}^{rad}$, welcher der Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche zur Seitenwand entspricht, zusammen. Die Wärmestrahlung zur Seitenwand $P_{seitlich}^{rad}$ trägt ebenfalls zur Erwärmung der Wandstrukturen bei.

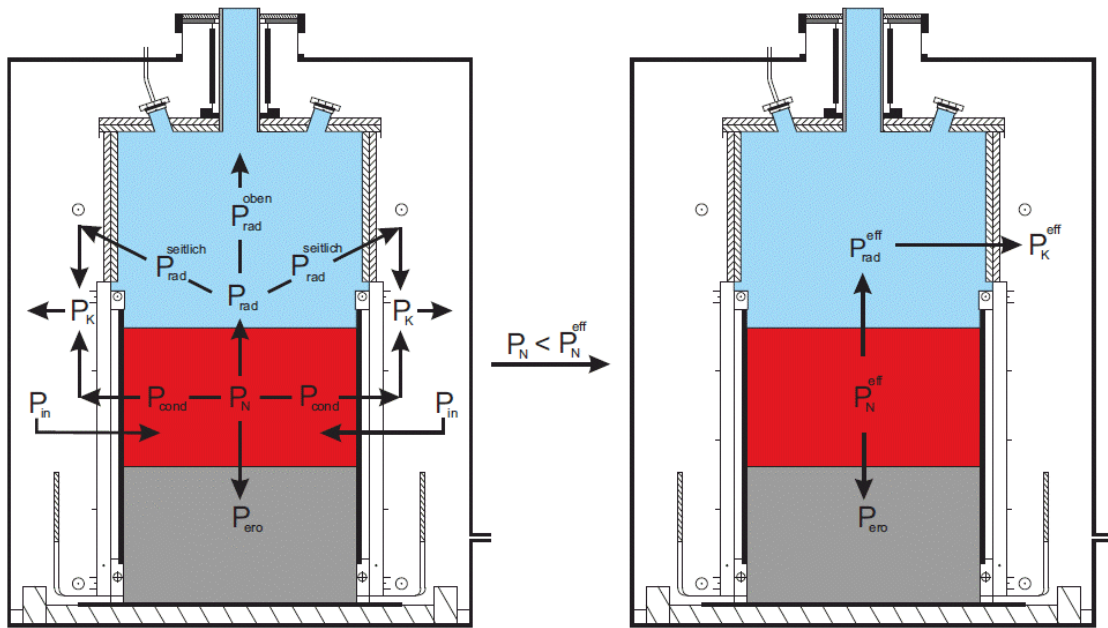


Abb. 2.77 Aufteilung der eingespeisten Leistung in den ACE-Versuchen /AGE 17/

Die Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche wird daher in zwei Teile aufgeteilt, also die zuvor genannte Wärmestrahlung zur Seitenwand $P_{\text{seitlich}}^{\text{rad}}$ sowie die senkrechte Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche zum Deckel $P_{\text{oben}}^{\text{rad}}$. Daher soll die experimentell gemessene, senkrechte Wärmestrahlung durch die Schmelzeoberfläche um den seitlichen Anteil der Wärmestrahlung $P_{\text{seitlich}}^{\text{rad}}$ erhöht werden. Somit ergeben sich die effektiven Wärmeverluste durch die Schmelzeoberfläche ($P_{\text{rad}}^{\text{eff}}$) für die Simulation mit dem CCI-Modul (s. Abb. 2.77, rechts).

Aus diesem Grund muss die bereits korrigierte (verringerte) Nettogleistung P_N um den Anteil der Wärmestrahlung zur Seitenwand $P_{\text{seitlich}}^{\text{rad}}$ erhöht werden, so dass sich letztlich eine größere effektive Nettogleistung (P_N^{eff}) für die Simulation mit dem CCI-Modul ergibt (s. Abb. 2.77, rechts). Die effektive Nettogleistung (P_N^{eff}) wird dabei im Eingabedatensatz vorgegeben.

Ansatz zur Berechnung der Betonerosion

Das CCI-Modul in COCOSYS verwendet ein empirisches Modell zur Simulation der Betonzerstörung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Hierbei kommt das von der GRS entwickelte Wärmeübergangsmodell zum Einsatz, welches auf experimentellen Analysen basiert und keine detaillierten mechanistischen Phänomene, wie z. B. die Formation einer Kruste an der Schnittstelle zwischen Schmelze/Beton, betrachtet. In diesem

Ansatz wird die Wärmestromdichte q an der Grenzfläche Schmelze/Beton näherungsweise über einen konstanten effektiven Wärmeübergangskoeffizienten h_{eff} dargestellt (Gl. 2.4):

$$q = h_{eff}(T_{corium} - T_{dec}) \quad (2.4)$$

Die empfohlenen Werte für den effektiven Wärmetransferkoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Beton wurden ursprünglich analytisch auf der Basis von Nachrechnungen ausgewählter 2D-MCCI-Experimente, wie z. B. ACE, MACE, CCI und VULCANO, abgeleitet /SPE 12a/. Die Wärmestromdichte kann auch über die Erosionsgeschwindigkeit v_{dec} , die Betondichte $\rho_{concrete}$ sowie die Zerstörungsenthalpie H_{dec} berechnet werden (Gl. 2.5):

$$q = \rho_{concrete} H_{dec} v_{dec} \quad (2.5)$$

Wie aus den beiden Gleichungen zu sehen ist, spielen die Zerstörungstemperatur und -enthalpie eine wichtige Rolle für die Berechnung der Betonerosionskinetik.

Basierend auf Experimenten der MOCKA-Serie (KIT Karlsruhe) wurde festgestellt, dass die für den MCCI-Prozess relevante Betonzerstörungstemperatur mindestens 1.800 K (1.526 °C) sein soll, unabhängig davon, ob der Beton eine Armierung enthält oder nicht. Bisher wurde in den meisten CCI-Rechnungen eine Zerstörungstemperatur von ca. 1.500 K angenommen. Daher werden hier alle Nachrechnungen ausgewählter ACE-Versuche mit Einsatz des CCI-Moduls in COCOSYS 3.0.1 unter Berücksichtigung einer erhöhten Betonzerstörungstemperatur von 1.800 K durchgeführt. Die aus den MCCI-Experimenten abgeleiteten Wärmeübergangskoeffizienten dürfen nur in Verbindung mit der hier gemachten Annahme über die Zerstörungstemperatur (T_{dec}) des Betons verwendet werden.

Zur Interpretation von MCCI-Experimenten wurde von der GRS ein universeller Ansatz unter Berücksichtigung konsistenter Eingabeparameter zu MCCI mit erhöhter Zerstörungstemperatur von 1.800 K und empirischen, effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze (Beton- und Schmelzeoberfläche) vorgeschlagen /SPE 20/. Dieser Ansatz wurde aus den Ergebnissen einer sehr umfassenden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse abgeleitet, die für 2D-MCCI-Experimente

(OECD CCI-3, MOCKA5.7) mit rein oxidischer Schmelze sowie mit geschichteter Schmelze (Oxid/Metall) und silikatischem Beton mit/ohne Armierung durchgeführt wurde /SPE 20/. Laut dieser Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse liegen die empfohlenen Wärmeübergangskoeffizienten bei $300 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Wärmeübergang an der Schnittstelle Schmelze/Boden und $1.600 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Wärmeübergang an der Seitenwand im Falle oxidischer Schmelze in einer Grube aus silikatischem Beton und unter Berücksichtigung einer höheren Zerstörungstemperatur von 1.800 K . An der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre wird ebenfalls ein Wert von $300 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ angesetzt, der gleich groß ist wie der Wert an der Schnittstelle Schmelze/Boden. Der universelle Ansatz für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter zu MCCI wurde bereits anhand des VBES-U5-Tests /BOU 18/, der an der VULCANO-Testanlage bei CEA Cadarache, Frankreich durchgeführt wurde, validiert. Mit dem CCI-Modul wurde auch hier ausreichende Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen des VBES-U5-Tests erzielt /BAK 18b/.

Analog zu dem GRS-Modellansatz wurde in den von der Ruhr-Universität Bochum durchgeführten COCOSYS-Basisrechnungen auch das effektive Wärmeübergangsmodell angewendet /AGE 17/. In diesem Modellansatz wurden die ursprünglich von den Codeentwicklern empfohlenen Basiswerte /ARN 22/, /SPE 12a/ für die effektiven Wärmetransferkoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Beton für $h_{\text{eff}}^{\text{unten}}$ sowie an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre für $h_{\text{eff}}^{\text{oben}}$ verwendet. Im Gegensatz zum universellen GRS-Ansatz wurden von der Ruhr-Universität Bochum unterschiedliche Werte für die Betonzerstörungstemperatur eingesetzt. Die von der GRS angewendeten CCI-Modellparameter im Vergleich zu den von der Ruhr-Universität Bochum (RUB) verwendeten Werten sind in Tab. 2.9 dargestellt.

Tab. 2.9 Vergleich der Modellparameter zu MCCI für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mit COCOSYS

Modellparameter	ACE L2		ACE L6		ACE L7		ACE L8	
	GRS	RUB	GRS	RUB	GRS	RUB	GRS	RUB
$T_{\text{dec}}, \text{ K}$	1800	1519	1800	1519	1800	1573	1800	1670
$h_{\text{eff}}^{\text{unten}} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$	300	300	300	300	300	200	300	200
$h_{\text{eff}}^{\text{oben}} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$	300	300	300	300	300	300	300	300

Modellierung der Spaltproduktfreisetzung

Das aktuelle Spaltproduktfreisetzungsmodell im CCI-Modul von COCOSYS wurde von VEIKI entwickelt und anhand der ASTEC-Version V1.3 rev. 2 getestet /KÓS 07b/. Dieses Modell basiert auf dem Ansatz im ELSA-Modul von ASTEC, welches unter anderem die Spaltproduktfreisetzung aus einem Schmelzepool im unteren Plenum des RDB berechnet. Das von VEIKI entwickelte Modell zur Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze wurde von der GRS für das CCI-Modul von COCOSYS übernommen.

In der aktuellen Version des CCI-Moduls wird die Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in COCOSYS basierend auf dem Effekt der Verdampfung betrachtet. In diesem Ansatz basiert die Spaltproduktfreisetzung auf der Verdampfung einer Flüssigkeit, getrieben durch einen Gradienten in der Stoffmengenkonzentration an der Schnittstelle zwischen flüssiger und gasförmiger Phase, an welcher angenommen wird, dass sich langfristig ein Gleichgewichtszustand einstellt. Schließlich ergibt sich folgende Formel (Gl. 2.6) für die Berechnung des freigesetzten Massenstroms $\dot{m}_i$ pro Spezies i während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung:

$$\dot{m}_i = j_i M_i A \frac{p_i}{RT} \quad (2.6)$$

In der Gleichung steht j_i für die Geschwindigkeit der aufsteigenden Gasblasen aus dem erodierten Beton, welche durch die Schmelzeoberfläche in die Atmosphäre austreten, M_i für die molare Masse, A für die Schmelzeoberfläche, p_i für den Partialdruck jeder Spezies sowie T für die Schmelzetemperatur. R ist die allgemeine Gaskonstante.

Dieses Modell zur Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze wurde ursprünglich anhand ausgewählter ACE-Versuche mit der Erkenntnis validiert, dass insbesondere die semi- und schwerflüchtigen Spaltprodukte wie beispielsweise Lanthan, Ruthenium und Bor stark in ihrer Freisetzung unterschätzt werden /KÓS 07b/, /SPE 11/.

Für die Berücksichtigung der Spaltprodukte im CCI-Modul gilt wie bei der Zusammensetzung der Schmelze, dass nur Spaltproduktspezies betrachtet werden können, welche in der Schnittstelle zwischen Spaltproduktfreisetzungsmodul und MDB (Poolcav.mdb) zur Verfügung stehen. Aus diesem Grund kann in der aktuellen CCI-Modellierung für die Simulation von Borcarbid B_4C nur das Element Bor B verwendet werden. Ebenso kann für das Spaltprodukt Tellur (Te) nur die Verbindung Zinntellurid ($SnTe$), welche im ACE-

L2-Versuch zum Einsatz kam, als anfängliche Spaltproduktmasse in der Schmelze betrachtet werden. Für die Simulation der Spaltproduktfreisetzung der ACE-Versuche L6, L7 und L8 kann hingegen nur der Telluranteil aus der Verbindung mit Zirkonium berücksichtigt werden /AGE 17/. Die anfänglichen Spaltprodukt- und Strukturmaterialmassen für die Simulation ausgewählter ACE-Versuche sind in Tab. 2.10 dargestellt.

Tab. 2.10 Spaltprodukt – und Strukturmaterialmasse für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mit dem CCI-Modul von COCOSYS /AGE 17/

Spezies	Masse [kg]			
	ACE L2	ACE L6	ACE L7	ACE L8
BaO	0,78	0,79	1,41	1,55
La ₂ O ₃	0,62	0,63	1,14	1,23
SrO	0,50	0,53	0,96	1,04
CeO ₂	1,25	1,28	2,23	2,51
MoO ₂	0,91	0,94	1,70	1,84
SnTe	0,20	-	-	-
Te (aus ZrTe ₂)	-	0,15	0,13	0,15
Ru	-	0,38	-	-
B (aus B ₄ C)	-	-	0,78	-
Ag	-	1,19	-	1,19
In	-	0,22	-	0,22

2.3.1.5 Simulationsergebnisse

Experiment ACE L2

Im ACE-L2-Versuch wurde silikatischer (S) Beton sowie ein prototypisches Kernmaterial eines DWR-Typs mit einem hohen Zirkoniumoxidationsgrad von 70 % verwendet. Ein Vergleich zwischen der vom CCI-Modul in COCOSYS 3.0.1 berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung (rote Kurve) und dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt (schwarze Kurve) für das ACE-L2-Experiment ist in Abb. 2.78 dargestellt. Insgesamt zeigt die Abbildung, dass die Simulation unter Anwendung des empfohlenen Werts ($300 \text{ W/m}^2\text{K}$) für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Beton, der in früheren Nachrechnungen /BAK 18b/ von 2D-MCCI-Versuchen mit silikatischem Beton validiert wurde, die experimentellen Werte zufriedenstellend reproduziert. Zwar weist der Verlauf der berechneten Erosionstiefe eine geringfügige Unterschätzung des experimentell ermittelten

Erosionsfortschritts auf, jedoch wird der experimentelle Endwert der Betonerosion zum Ende der Simulation gut wiedergegeben. Die im Laufe der Simulation leicht unterschätzte Erosion weist darauf hin, dass eine geringere Leistungsabgabe sowohl an den Beton als auch durch die Schmelzeoberfläche berechnet wird.

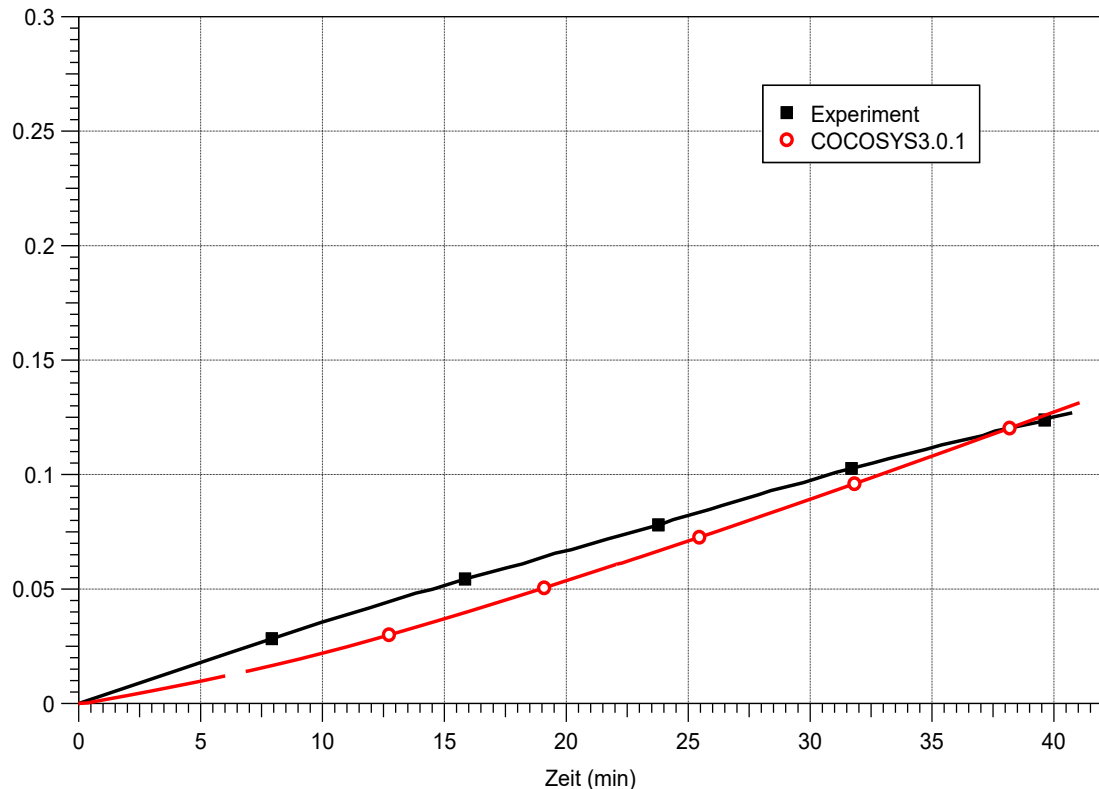


Abb. 2.78 ACE L2, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt

Der in der Simulation geringere Leistungsverlust der Schmelze durch die Betonerosion lässt sich durch die Verwendung einer im Vergleich zum bislang verwendeten Wert von ca. 1.500 K erhöhten Betonzerstörungstemperatur (ca. $T_{dec.} = 1.800$ K) im CCI-Modul erklären. Als Konsequenz wird die Temperaturdifferenz ($T_{corium} - T_{dec}$) kleiner (s. Gl. 2.4), was zu einem geringeren Wärmestrom an der Schnittstelle Schmelze/Beton führt. Dies hat zur Folge, dass die berechnete Schmelzetemperatur kontinuierlich ansteigt und schließlich die experimentellen Temperaturmesswerte um maximal ca. 200 K überschätzt (s. Abb. 2.79). An dieser Stelle ist zu erwähnen, dass die Schmelzetemperatur ein wichtiger Parameter ist, denn diese hat einen großen Einfluss auf die Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze. (s. Gl. 2.4). Zusätzlich ist hier noch zu bemerken, dass dieses Rechenergebnis in Übereinstimmung mit den von der Ruhr-Universität Bochum erzielten Validierungsergebnissen steht /AGE 17/.

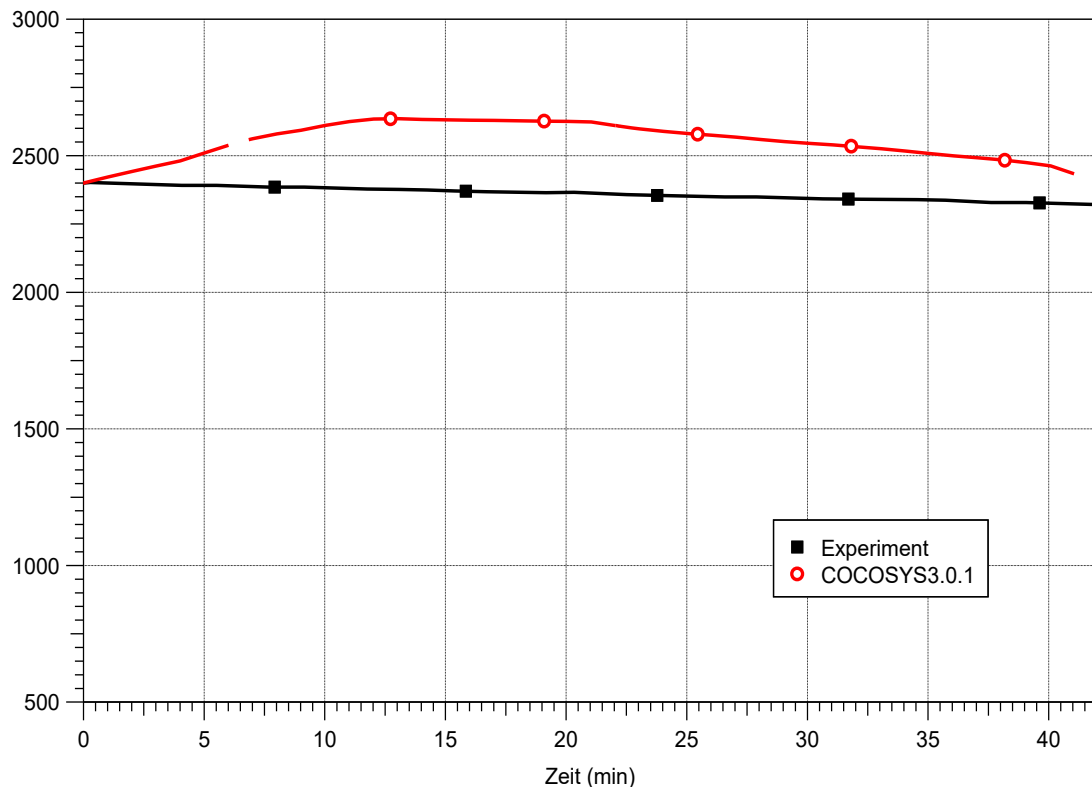


Abb. 2.79 ACE L2, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten

Für den ACE-L2-Versuch wird vom CCI-Modul unter Anwendung des empfohlenen Wertes ($300 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$) für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre während der gesamten Versuchsdauer ein zu niedriger Leistungsverlust durch die Schmelzeoberfläche berechnet (s. Abb. 2.80). Insbesondere zu Beginn und Ende der Nachrechnung liegen die Oberflächenverluste deutlich unter den experimentell ermittelten Oberflächenverlusten. In vorherigen Analysen von der Ruhr-Universität Bochum /AGE 17/ wurde auch gezeigt, dass die COCOSYS-Simulation mit dem effektiven Wärmetransfermodell unter Verwendung der empfohlenen Basiswerte für den effektiven Wärmetransferkoeffizienten die experimentellen Oberflächenverluste deutlich unterschätzt. Als Gründe für die aufgefundenen Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment können hier u. a. auch die experimentellen Unsicherheiten sowohl bei der Aufteilung des Leistungseintrags als auch bei der Auswertung der aus den Thermoelementmessungen abgeleiteten Temperaturen zur Detektion des Erosionsfortschritts sowie der Schmelztemperatur identifiziert werden.

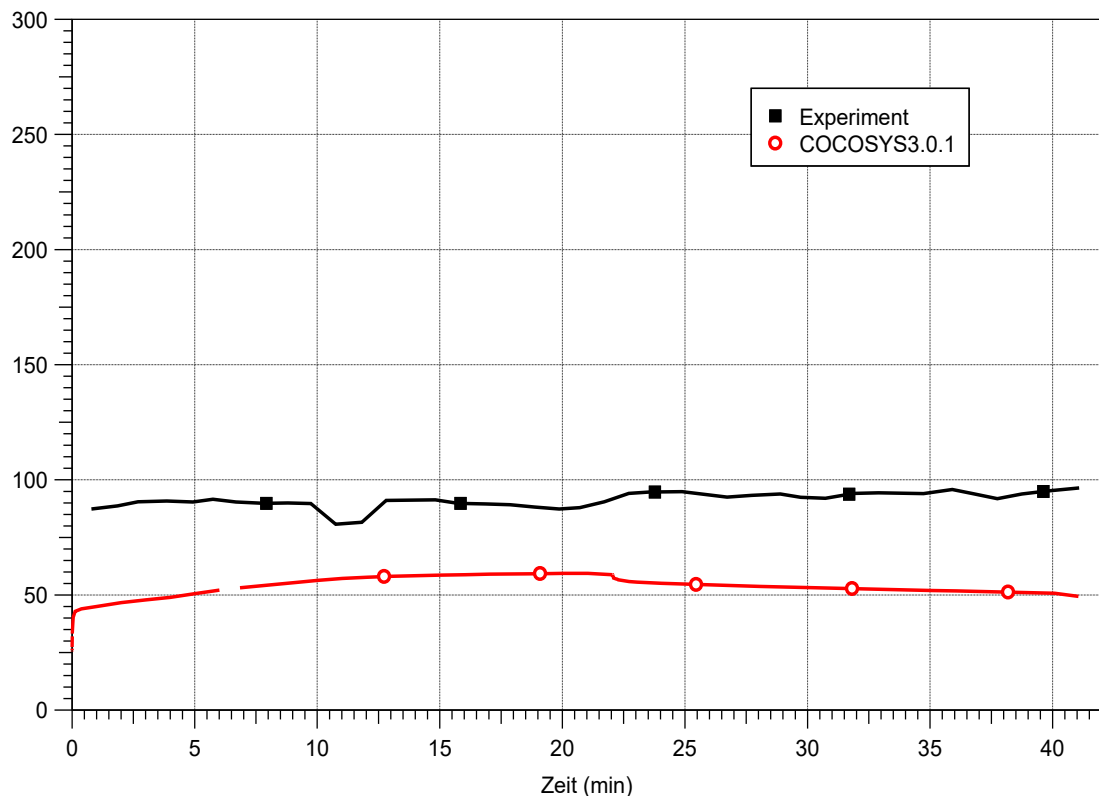


Abb. 2.80 ACE L2, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den aus dem Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche

In Abb. 2.81 sind die vom CCI-Modul berechneten Anteile der aus der Schmelze freigesetzten Spaltprodukte mit den im Experiment ermittelten Anteilen der freigesetzten Spaltprodukte (bezogen auf das Anfangsinventar) verglichen. Für die Simulation mit dem empfohlenen Ansatz für die Wahl der unsicheren MCCI-Eingabeparameter im CCI-Modul und der daraus resultierenden Schmelzetemperatur, welche den experimentellen Verlauf überschätzt, liegen die erzielten Freisetzungsraten für Barium (Ba), Cerium (Ce) und Strontium (Sr) sowie für Tellur (Te) deutlich oberhalb der experimentellen Freisetzungswerte. Hier fällt auf, dass sich der Einfluss der Schmelzetemperatur auf jedes der oben genannten Spaltprodukte gleichermaßen auswirkt. Die Freisetzung von Molybdän weist entgegen den Erwartungen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten auf.

Hingegen wird die Freisetzung von Lanthan in der Simulation signifikant (um rund vier Größenordnungen) unterschätzt. Diese momentan deutlich unterschätzte Freisetzungsrate von Lanthan (La) ist auf die in der aktuell vorhandenen Modellierung Nichtberücksichtigung der oxidischen Spezies (z. B. La_2O_3) für dieses Spaltprodukt zurückzuführen.

Dabei wird zurzeit nur die elementare Form von Lanthan (La) für die Freisetzung durch Verdampfung berücksichtigt.

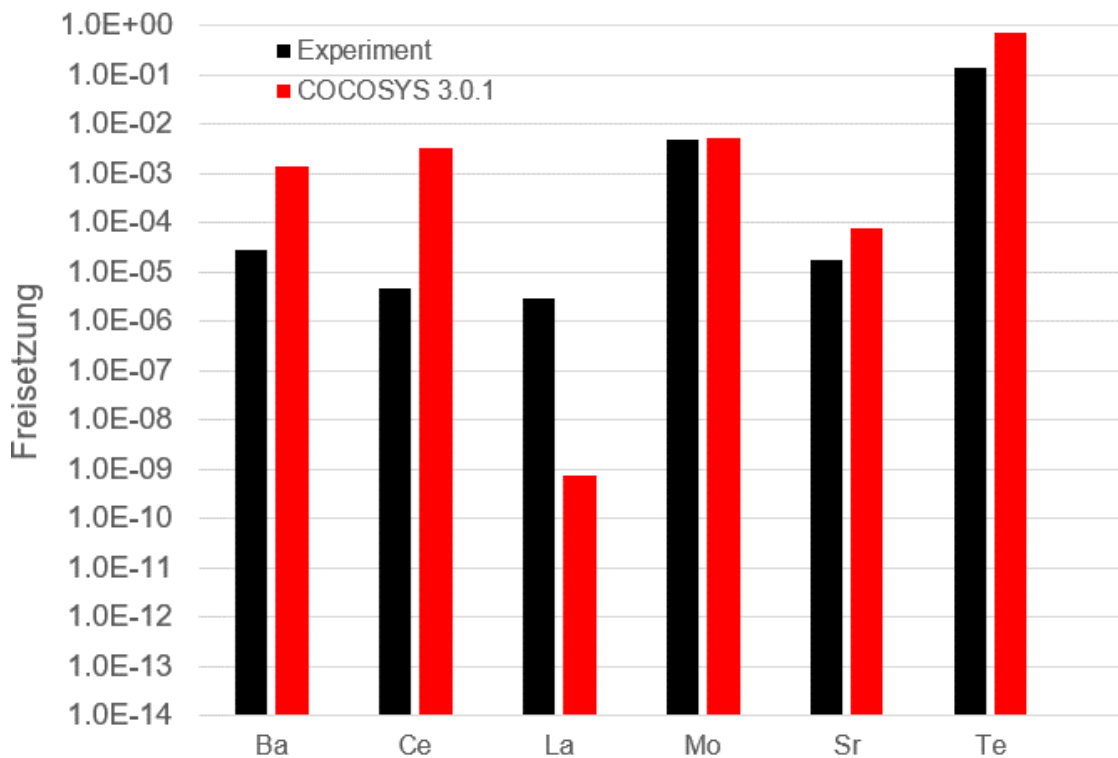


Abb. 2.81 ACE L2, Vergleich der von COCOSYS 3.0.1 berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzung von Spezies (schwarze Balken)

Experiment ACE L6

Wie auch im ACE-L2-Versuch wurde hier silikatischer Beton sowie ein prototypisches Kernmaterial eines DWR-Typs verwendet. Dieser Versuch wurde jedoch mit einem im Vergleich zu ACE L2 niedrigeren Zirkoniumoxidationsgrad von 30 % durchgeführt.

Abb. 2.82 zeigt den Vergleich der vom CCI-Modul in COCOSYS 3.0.1 berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung (rote Kurve) mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt (schwarze Kurve) für das ACE-L6-Experiment. Der Vergleich zeigt, dass unter Verwendung des universellen Ansatzes für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter zu MCCI (effektive Wärmetransferkoeffizienten und Betonzerstörungstemperatur) mit silikatischem Beton im CCI-Modul eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen des ACE-L6-Versuchs erzielt wird. Auf der Abbildung ist deutlich zu erkennen, dass die Simulation mit dem empfohlenen Wert (300 W/m²*K) für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten die experimentellen

Werte des Erosionsfortschritts gut wiedergibt. Zum Ende der Simulation wird jedoch der experimentelle Erosionsfortschritt geringfügig unterschätzt.

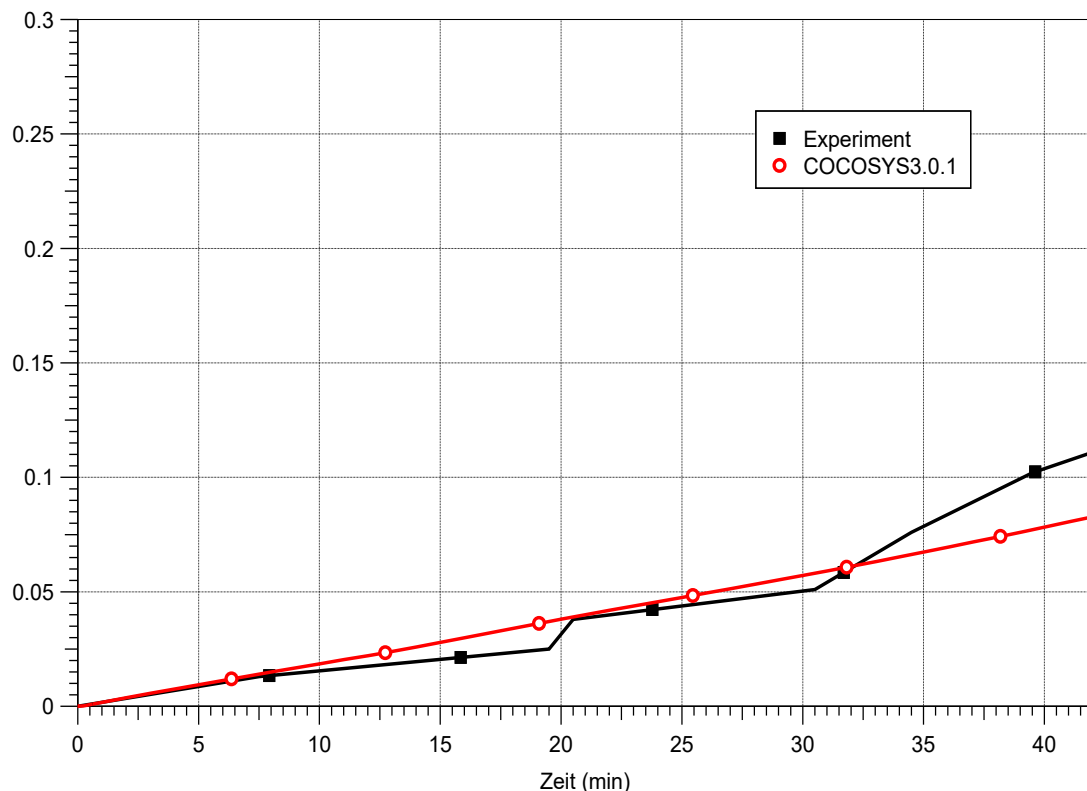


Abb. 2.82 ACE L6, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt

In der vorliegenden Nachrechnung des ACE-L6-Versuchs führt die Verwendung einer im Vergleich zum bislang verwendeten Wert von ca. 1.500 K erhöhten Betonzerstörungstemperatur ($T_{\text{dec.}} = 1.800 \text{ K}$) im CCI-Modul zur Verringerung der Temperaturdifferenz ($T_{\text{corium}} - T_{\text{dec.}}$) und damit zum geringeren Wärmestrom an der Grenzfläche zwischen Schmelze und Beton. Dies hat zur Folge, dass die berechnete Schmelzetemperatur höher liegt und somit den experimentellen Schmelzetemperaturverlauf zufriedenstellend widerspiegelt. In der Nachrechnung der Ruhr-Universität Bochum /AGE 17/ zeigte sich dagegen, dass die Anwendung einer niedrigeren Betonzerstörungstemperatur (1.519 K) im CCI-Modul zu einer niedrigeren Schmelzetemperatur als im Experiment führte. An dieser Stelle wird noch einmal darauf hingewiesen, dass die Abbildung der Schmelzetemperatur eine große Rolle spielt, da diese als Haupteinflussparameter bei der Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze betrachtet wird.

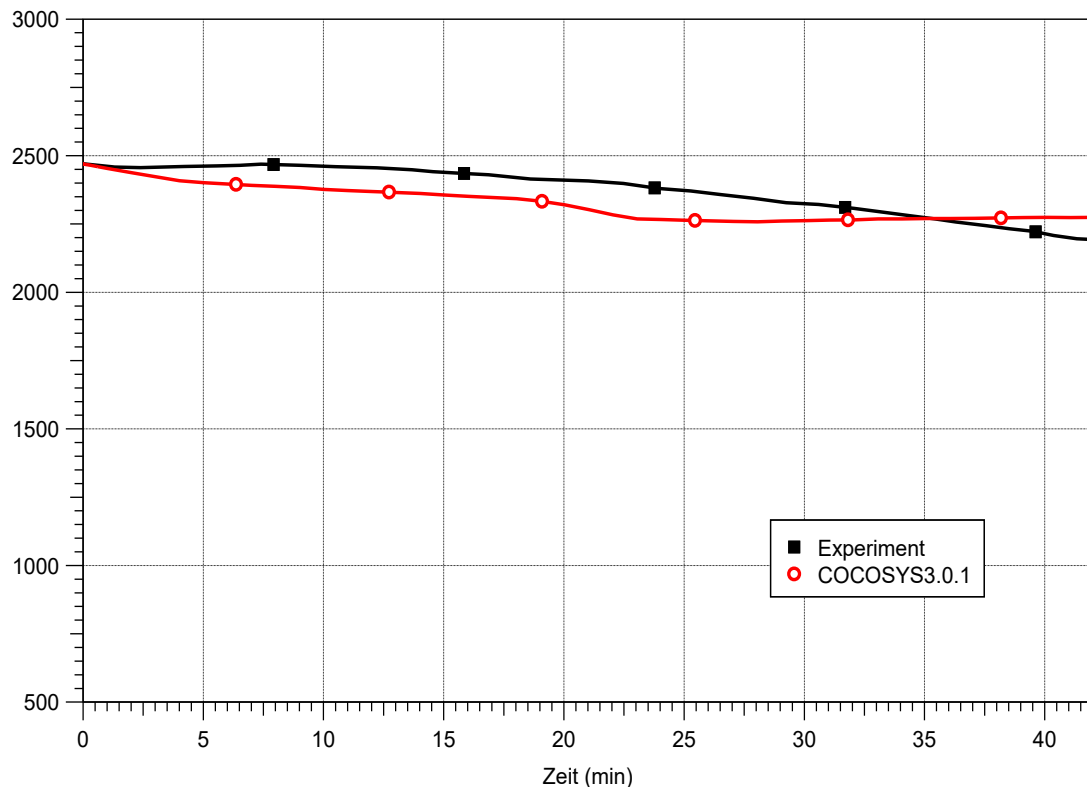


Abb. 2.83 ACE L6, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermolemente ermittelten Temperaturwerten

In Abb. 2.84 werden die berechneten Leistungsverluste durch die Schmelzeoberfläche der im Versuch ermittelten Oberflächenverluste (korrigierte Leistungsverluste) gegenübergestellt. Der Vergleich zeigt, dass die vom CCI-Modul berechneten Leistungsverluste unter Anwendung des empfohlenen Wertes ($300 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$) für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre eine gute Übereinstimmung mit den experimentell erhaltenen Leistungsverlusten durch die Oberfläche aufweisen. Diesbezüglich soll noch erwähnt werden, dass die Oberflächenverluste der Schmelze von der Temperaturdifferenz an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre abhängig sind. Daher wird durch die Berechnung einer hohen Gastemperatur (ca. 1.500 K) die Temperaturdifferenz geringer und somit wird weniger Leistung durch die Schmelzeoberfläche an die Atmosphäre abgegeben.

Wie bereits oben diskutiert, liegt der Schwerpunkt der Nachrechnungen der ACE-Versuchsreihe auf der Untersuchung der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Dabei ist der ACE-L6-Versuch der einzige, in dem das Spaltprodukt Ruthenium (Ru) untersucht wurde. Darüber hinaus kamen im ACE L6 noch die Absorbermaterialien Silber (Ag) und Indium (In) zum Einsatz. An dieser Stelle

ist zu bemerken, dass in der aktuellen Version des CCI-Moduls von COCOSYS 3.0.1 die Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze durch den Effekt der Verdampfung betrachtet wird.

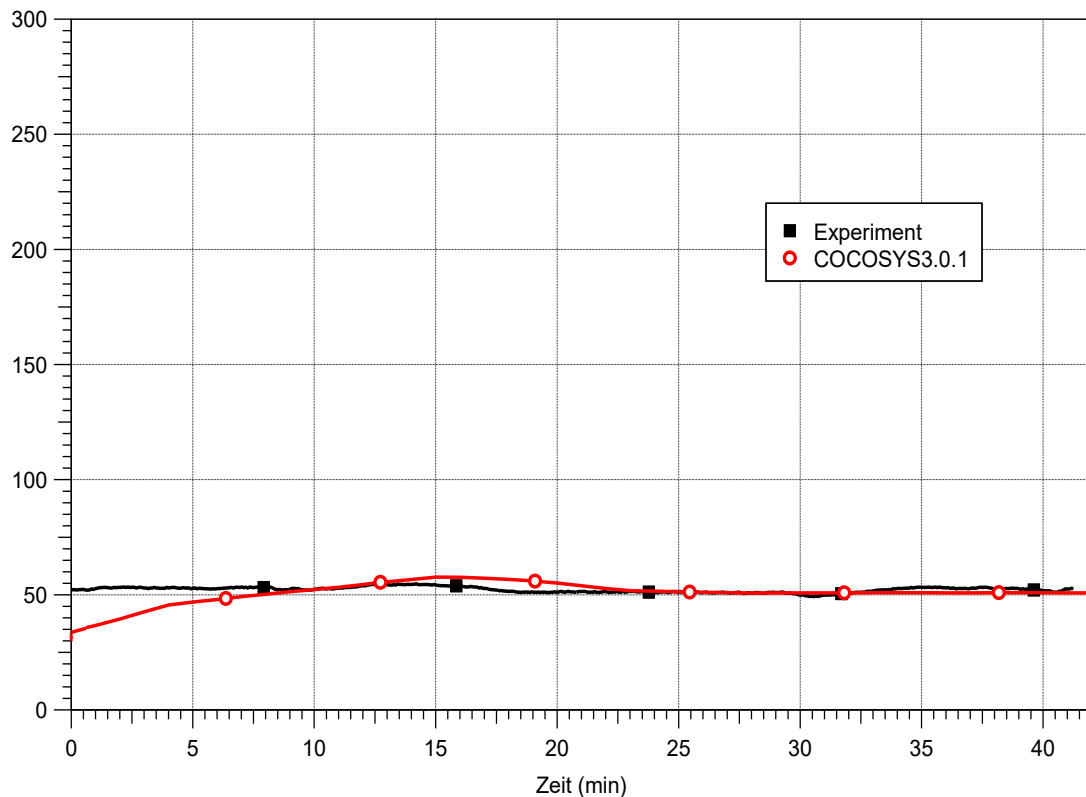


Abb. 2.84 ACE L6, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den aus dem Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche

In Abb. 2.85 sind die vom CCI-Modul berechneten Anteile der aus der Schmelze freigesetzten Spaltprodukte mit den im Experiment ermittelten Anteilen der freigesetzten Spaltprodukte (bezogen auf das Anfangsinventar) verglichen. Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, liegen die erzielten Simulationsergebnisse für Barium, Cerium, Silber und Indium sowie vergleichsweise für Tellur annähernd in der Größenordnung der experimentellen Freisetzungsraten. Dagegen zeigen die vorliegenden Simulationsergebnisse, dass insbesondere die Spezies Lanthan und Ruthenium in ihrer Freisetzung deutlich unterschätzt werden. Dies liegt daran, dass in der aktuellen CCI-Modellierung nur die elementare Form der beiden Spezies (Ru, La) für die Freisetzung betrachtet wird und ihre oxidischen Verbindungen (z. B. RuO_3 , RuO_4 , La_2O_3), die ebenfalls als flüchtig bekannt sind, nicht berücksichtigt werden. Anzumerken ist hierbei, dass in bereits vorangegangenen Analysen /AGE 17/ ebenfalls ähnliche Ergebnisse hinsichtlich der Freisetzung dieser zwei Spezies festgestellt wurden. Dies ist beispielhaft an einem Vergleich der vom MEDICIS-Modul in COCOSYS V2.4v3+ berechneten Freisetzung von

Ruthenium mit der im Experiment ermittelten Freisetzungsrate von Ruthenium nach dem ACE-L6-Versuch dargestellt (s. Abb. 2.86).

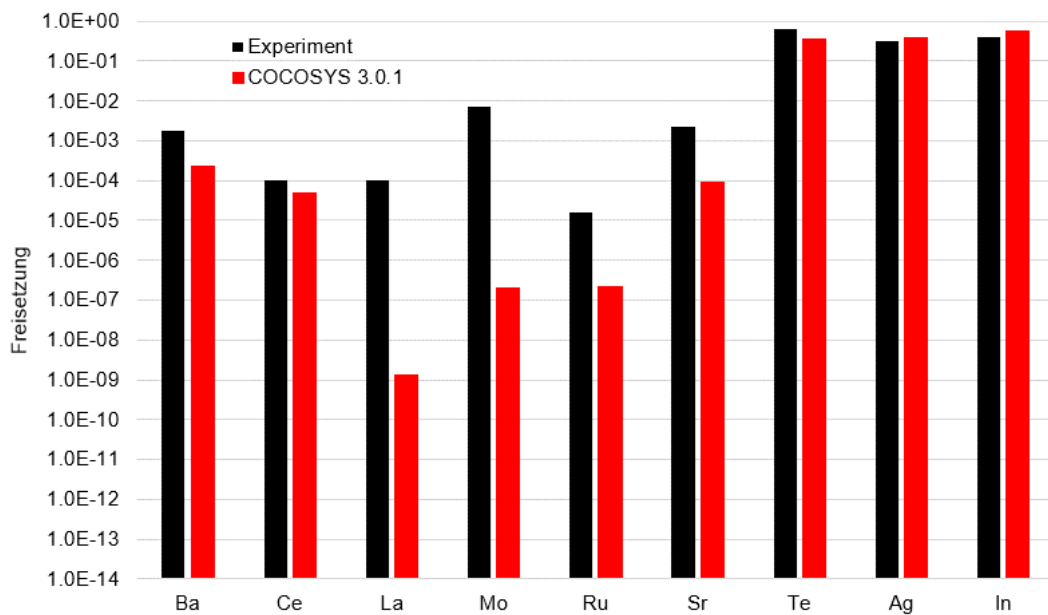


Abb. 2.85 ACE L6, Vergleich der von COCOSYS 3.0.1 berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzung von Spezies (schwarzer Balken)

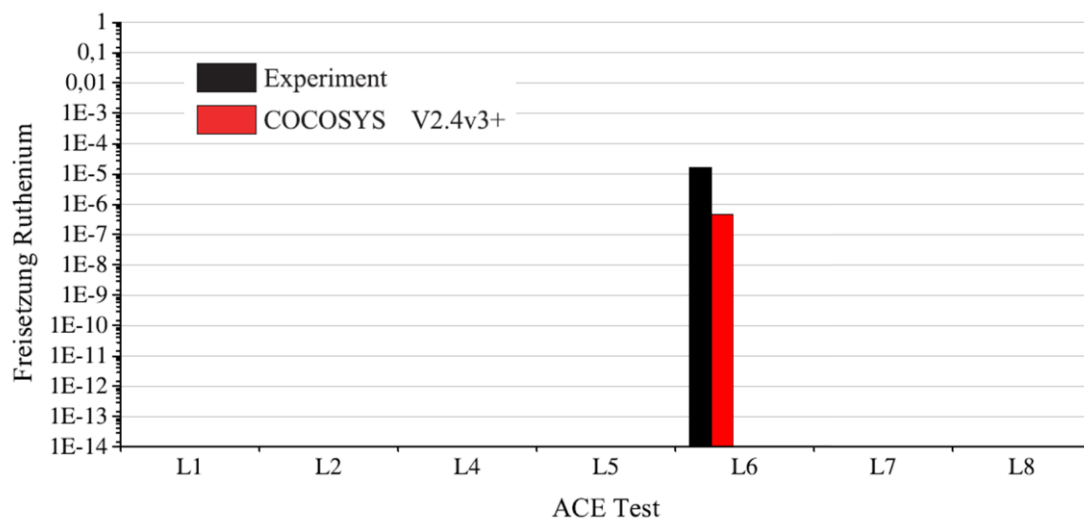


Abb. 2.86 ACE L6, Vergleich der von COCOSYSv2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Ruthenium (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten Freisetzungsrates von Ruthenium (schwarzer Balken) /AGE 17/

Bei den Validierungsarbeiten ist zu beachten, dass die experimentellen Messwerte hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung mit Unsicherheiten verbunden sind. Diese sind am Beispiel des Versuchs ACE L6 pro Spaltprodukt in /AGE 17/ zusammengefasst.

Experiment ACE L7

Im ACE-L7-Versuch wurde ein typisches Kernmaterial für einen SWR-Typ mit einem Zirkoniumoxidationsgrad von 70 % und einem Betonfundament aus Kalksandstein (engl. Limestone/Common Sand – LCS) verwendet.

In Abb. 2.87 ist für den ACE-L7-Versuch die vom CCI-Modul berechnete Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt (schwarze Kurve) verglichen. Auch für diesen Versuch wurde der universelle Ansatz für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter im CCI-Modul angewendet, der in früheren Nachrechnungen von 2D-MCCI-Versuchen mit oxidischer Schmelze und silikatischem Beton validiert wurde.

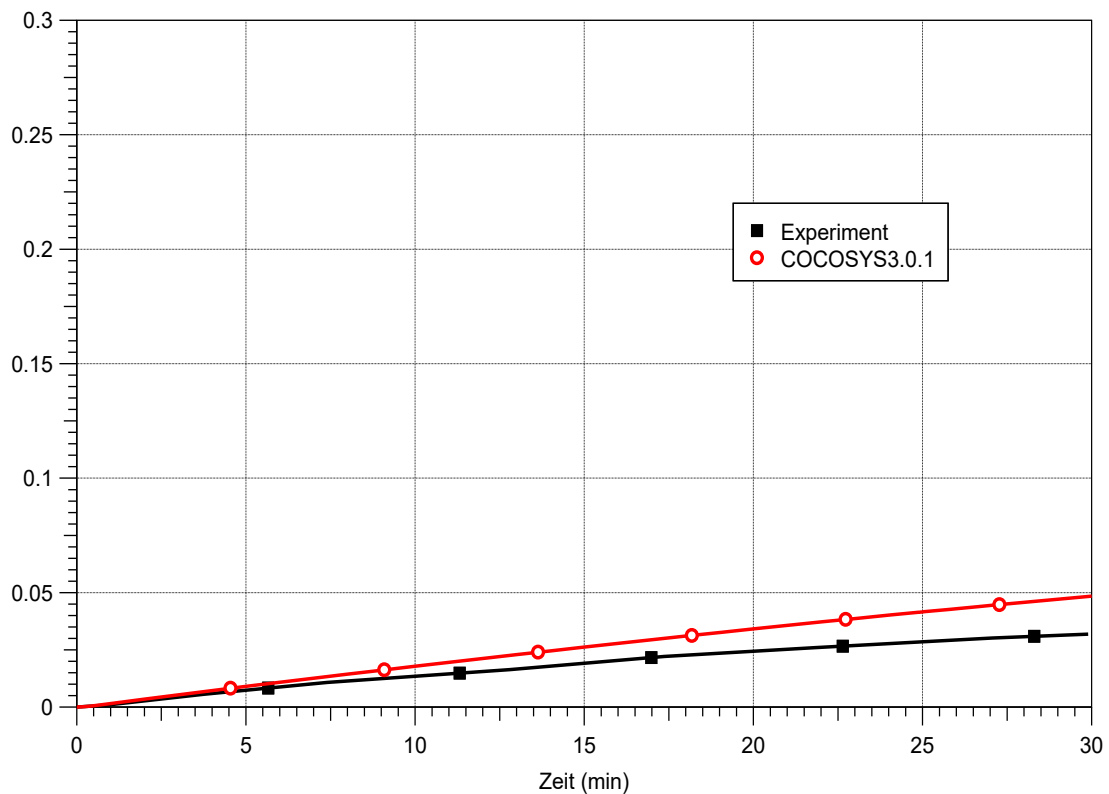


Abb. 2.87 ACE L7, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt

Der Vergleich zeigt, dass die Simulation mit dem empfohlenen Wert ($300 \text{ W/m}^2\text{K}$) für die effektiven Wärmetransferkoeffizienten an den Schnittstellen Schmelze/Beton sowie Schmelze/Atmosphäre eine geringfügige Überschätzung der Betonerosionstiefe aufweist. Bei der Auswertung der Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment ist

noch zu berücksichtigen, dass weiterhin experimentelle Unsicherheiten sowohl bei der Aufteilung des Leistungseintrags als auch bei der Auswertung der aus den Thermoelementmessungen abgeleiteten Temperaturen zur Detektion des Erosionsfortschritts sowie der Schmelztemperatur bestehen.

Hier ist noch zu erwähnen, dass in diesem Versuch eine verbesserte Darstellung der Schmelztemperatur verglichen mit den experimentellen Messwerten durch die Verwendung eines geringeren effektiven Wärmetransferkoeffizienten von $200 \text{ W/m}^2\text{K}$ an der Schnittstelle Schmelze/Beton sowie Schmelze/Atmosphäre erzielt werden kann. Durch die Reduzierung des effektiven Wärmetransferkoeffizienten an beiden Schnittstellen wird weniger Leistung an den Beton abgegeben, was zu einer kleineren Betonerosion sowie zur Erhöhung der Schmelztemperatur führt. Dies hat zur Folge, dass die Simulation dieses Versuchs durch die Festlegung geringerer effektiver Wärmeübergangskoeffizienten die experimentellen Werte zufriedenstellender wiedergibt.

Für den ACE-L7-Versuch führt die Anwendung im Vergleich zum bislang verwendeten Wert von ca. 1.500 K einer höheren Betonzerstörungstemperatur von 1.800 K im CCI-Modul ebenso zur Reduzierung der Temperaturdifferenz ($T_{\text{corium}} - T_{\text{dec}}$) und somit zur Verringerung des Wärmeflusses an der Grenzfläche zwischen Schmelze und Beton. Als Folge ergibt sich eine höhere Schmelztemperatur, welche die experimentellen Werte größtenteils zufriedenstellend wiedergibt (s. Abb. 2.88). Jedoch wird der experimentelle Endwert der Schmelztemperatur in der Simulation um ca. 150 K unterschätzt. Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass der universelle Ansatz für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter, der ursprünglich für 2D-MCCI-Versuche mit silikatischem Beton validiert wurde, auch auf 1D-MCCI-Versuche mit kalksandsteinhaltigem Beton (LCS) anwendbar ist und akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen liefert.

In der Nachrechnung der Ruhr-Universität Bochum /AGE 17/ zeigte sich dagegen, dass die Anwendung einer niedrigeren Betonzerstörungstemperatur (1.573 K) im MEDICIS-Modul von COCOSYSV2.4v3+ zu einer niedrigeren Schmelztemperatur als im Experiment führte. Dabei wurde die Schmelztemperatur noch deutlich unterschätzt berechnet.

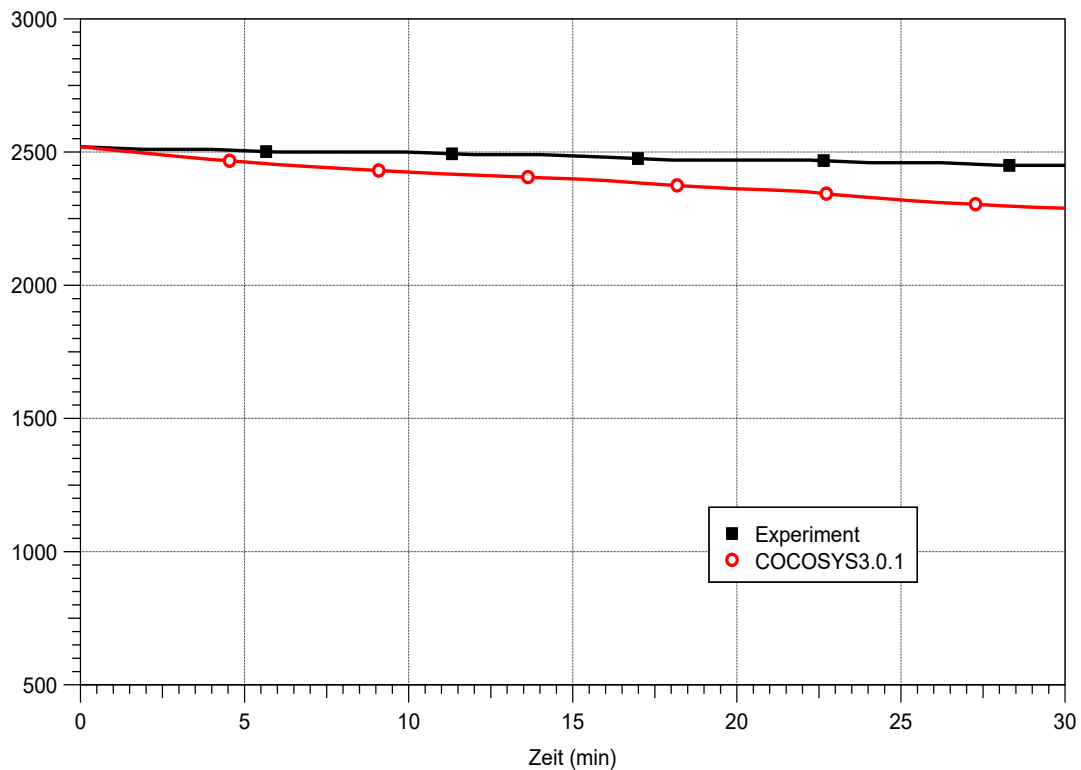


Abb. 2.88 ACE L7, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten

Wie bei den anderen ACE-Versuchen lag auch hier das Hauptaugenmerk auf der Untersuchung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze. Der ACE-L7-Versuch ist einer der ACE-Versuche, in dem unter anderem das Absorbermaterial Borcarbid (B_4C) in der Schmelzmasse verwendet und ebenfalls mit ihrer Freisetzungsrates erfasst wurde. Abb. 2.89 zeigt den Vergleich der vom CCI-Modul berechneten Anteile der aus der Schmelze freigesetzten Spaltprodukte mit den im Experiment ermittelten Anteilen der freigesetzten Spaltprodukte. Der Abbildung lässt sich entnehmen, dass die experimentellen Freisetzungsrates für die Spezies Barium und Cerium sowie für die Spezies Molybdän, Strontium und Tellur zufriedenstellend durch die Nachrechnung abgebildet werden. Hingegen zeigt sich, dass die Freisetzungsrates von Bor um rund vier Größenordnungen unterschätzt wird. Der Hauptgrund für diese deutlich niedrige Freisetzungsrates von Bor ist darin zu sehen, dass in der gegenwärtigen CCI-Modellierung nur die elementare Form von Bor (B) für die Freisetzung betrachtet wird und die Freisetzung von oxidischem Bor (B_2O_3) nicht berücksichtigt wird. Weiterhin zeigt sich auch, dass die berechnete Freisetzung von Lanthan (La) deutlich unterschätzt wird, was die Folge der im Abschnitt zu dem Experiment ACE L6 bereits diskutierten Nichtberücksichtigung der oxidischen Verbindungen von La (z. B. La_2O_3) in der aktuellen CCI-Modellierung in COCOSYS ist.

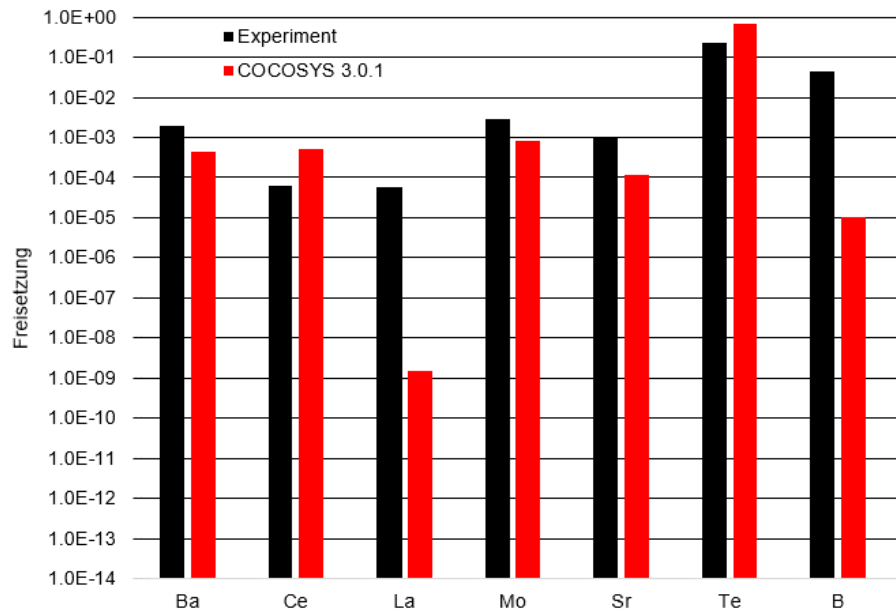


Abb. 2.89 ACE L7, Vergleich der berechneten Anteile der aus der Schmelze freigesetzten Spaltprodukte mit den im Experiment ermittelten Anteilen der freigesetzten Spaltprodukte (bezogen auf das Anfangsinventar)

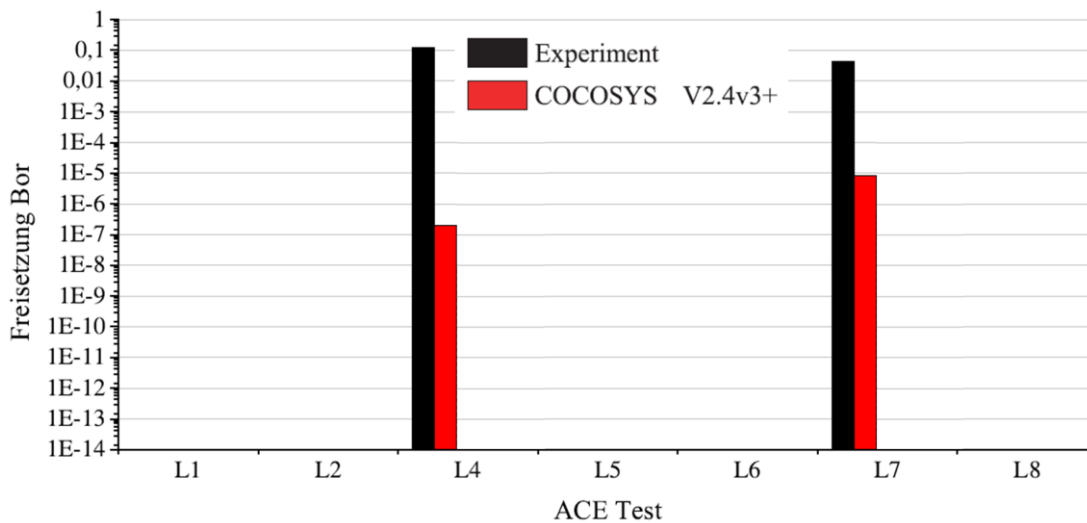


Abb. 2.90 ACE L7, Vergleich der von COCOSYSv2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Bor (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Borfreisetzung (schwarzer Balken) /AGE 17/

In den von der RUB durchgeführten Analysen /AGE 17/ wurden auch ähnliche Ergebnisse hinsichtlich der Freisetzung dieser zwei Spezies erzielt. Abb. 2.90 zeigt beispielsweise einen Vergleich der vom MEDICIS-Modul in COCOSYS V2.4v3+ berechneten Freisetzung von Bor (roter Balken) mit der im ACE-L7-Versuch ermittelten Freisetzungsrates von Bor (rechts, schwarzer Balken).

Experiment ACE L8

Im Unterschied zu ACE L7 wurde der ACE-L8-Versuch mit kalksteinhaltigem Beton (Limestone) durchgeführt, welcher den höchsten Gasanteil in der Zusammensetzung besitzt.

Abb. 2.91 stellt die vom CCI-Modul in COCOSYS berechnete Betonerosionstiefe in axialer Richtung im Vergleich zum im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt (schwarze Kurve) für das ACE-L8-Experiment dar. Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, ist die berechnete Betonerosionstiefe im Vergleich zum Experiment zu Beginn geringfügig unterschätzt.

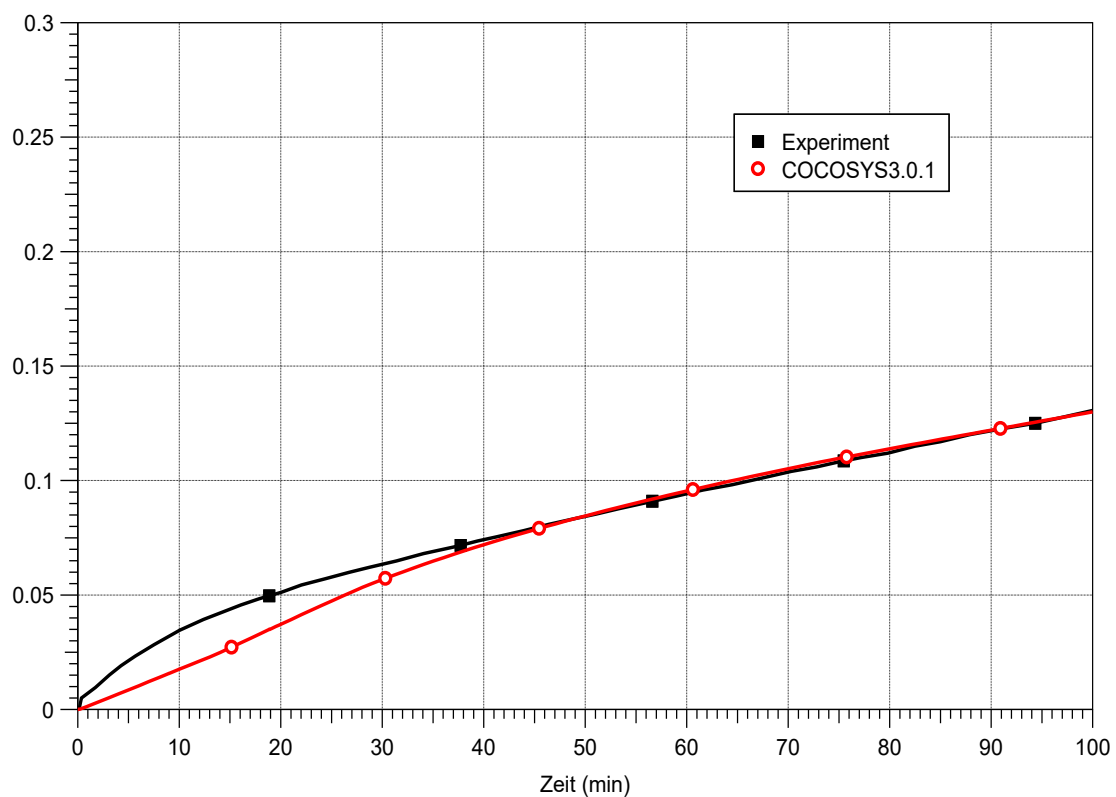


Abb. 2.91 ACE L8, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt

Langfristig zeigt allerdings der Betonerosionsverlauf in der Simulation unter Anwendung des universellen Ansatzes für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter (effektive Wärmetransferkoeffizienten und Betonzerstörungstemperatur) im CCI-Modul eine sehr gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Erosionsfortschritt. So zeigt sich hier die generelle Anwendbarkeit des ursprünglich für 2-D-MCCI-Versuche mit silikatischem

Beton validierten Ansatzes im CCI-Modul auch auf 1D-MCCI-Versuche mit kalksteinhaltigem Beton.

In Abb. 2.92 ist die vom CCI-Modul berechnete Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten verglichen. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, werden anfänglich die experimentell ermittelten Temperaturwerte sehr gut durch die Simulation abgebildet. Ab ca. 20 Min. nach Beginn der Simulation lässt sich ein deutlich ausgeprägter Abfall der Schmelztemperatur beobachten. Dies hängt damit zusammen, dass während des ACE-L8-Versuchs die eingespeiste Leistung abgesenkt wurde, nachdem die Oxidationsreaktionen der metallischen Bestandteile in der Schmelze abgeschlossen waren.

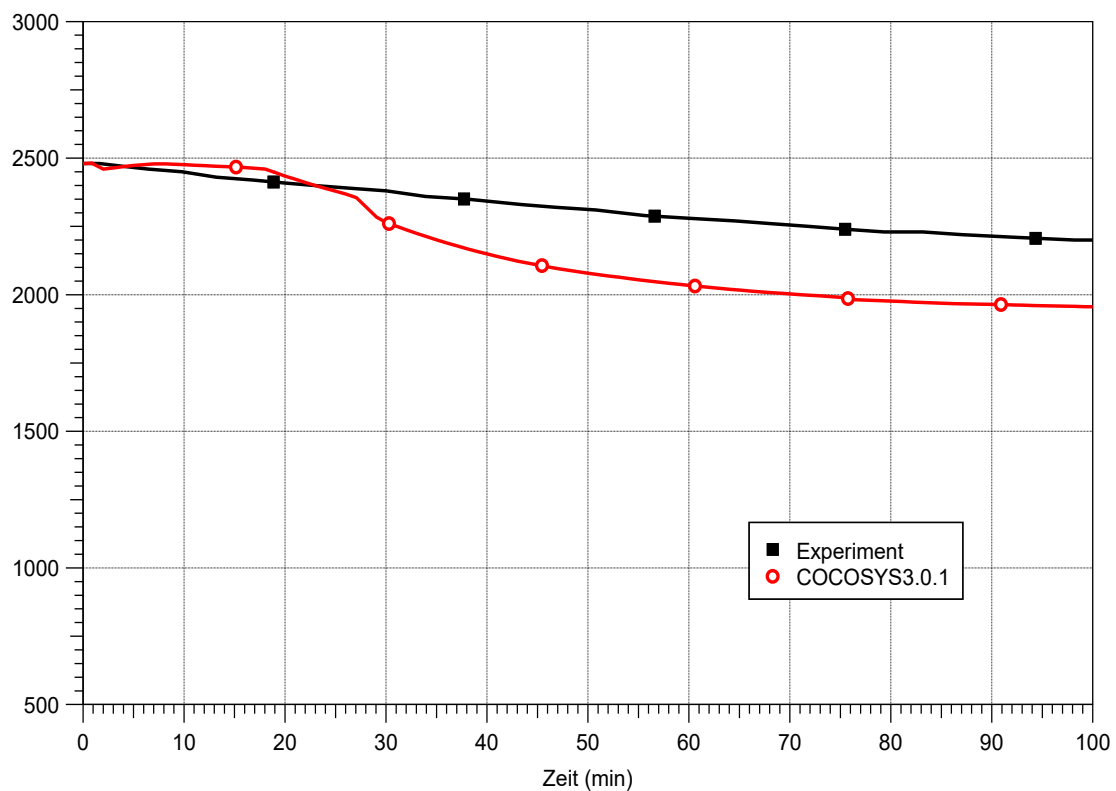


Abb. 2.92 ACE L8, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten

Zu erkennen ist, dass im Experiment kein deutlicher Abfall der gemessenen Schmelztemperatur festgestellt wurde, während die Leistung auf einem niedrigen Niveau, im Vergleich zum ursprünglich höheren Wert, gehalten wurde. Eine mögliche Ursache für dieses Temperaturverhalten im ACE L8 wären die experimentellen Unsicherheiten bei der Auswertung der aus den Thermoelementmessungen abgeleiteten Temperaturen zur Detektion der Schmelztemperatur.

Aufgrund des abfallenden Verlaufs der berechneten Schmelztemperatur werden die experimentellen Werte bis zum Ende der Simulation deutlich unterschätzt. In diesem Zusammenhang ist noch anzumerken, dass ähnliche Simulationsergebnisse hinsichtlich der Schmelztemperatur auch in den von der RUB durchgeführten Nachrechnungen für ACE L8 erzielt wurden /AGE 17/. Dabei zeigte sich, dass die Anwendung einer im Vergleich zum hier verwendeten Wert (1.800 K) niedrigeren Betonzerstörungstemperatur (1.670 K, Tab. 2.9, S. 117) im MEDICIS-Modul von COCOSYS V2.4v3+ eine noch niedrigere Schmelztemperatur als im Experiment zur Folge hatte. Hier ist noch zu beachten, dass die berechnete Schmelztemperatur als Grundlage für die nachfolgende Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze herangezogen wird.

Abb. 2.93 zeigt den Vergleich der vom CCI-Modul berechneten Leistungsverluste durch die Schmelzeoberfläche mit den im Versuch ermittelten Oberflächenverlusten (korrigierte Leistungsverluste). Am Anfang weist die Simulation mit dem empfohlenen Wert (300 W/m²*K) für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre eine geringfügige Überschätzung der Leistungsverluste durch die Oberfläche auf, wodurch als Folge die Erosionstiefe geringfügig unterschätzt wird. Langfristig wird jedoch der Verlauf der experimentellen Oberflächenverluste von der Simulation sehr gut wiedergegeben.

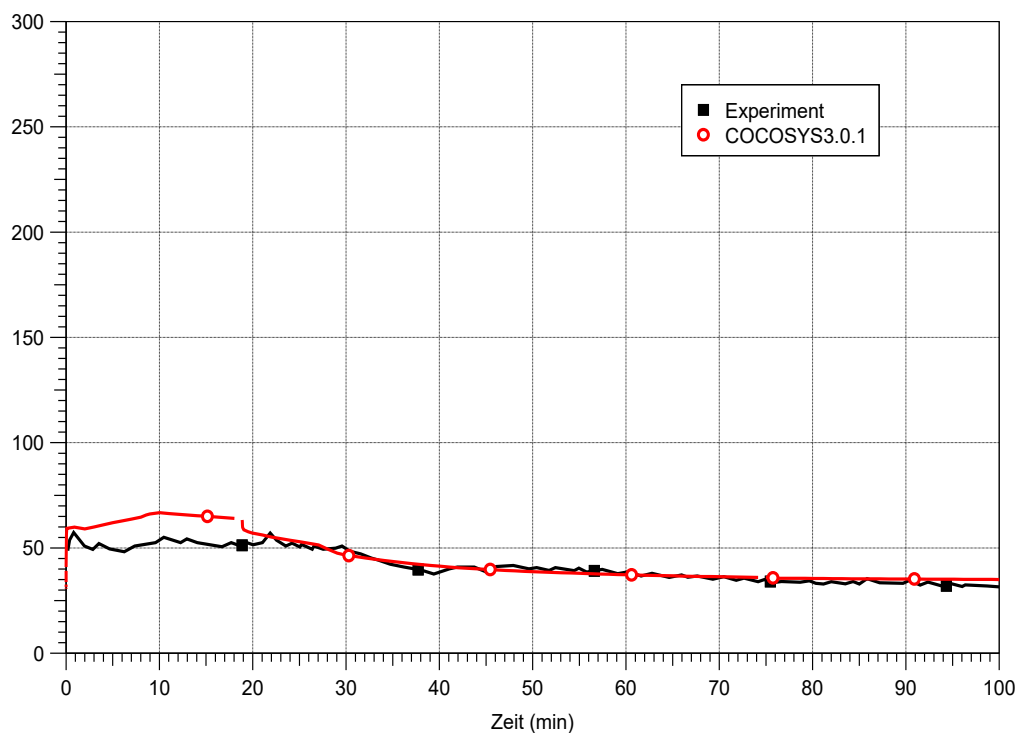


Abb. 2.93 ACE L8, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den im Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche

Basierend auf der vorliegenden Simulation des ACE L8 wird weiterhin die Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze betrachtet. Wie auch im ACE-L6-Versuch, wurden hier unter anderem die Absorbermaterialien Silber (Ag) und Indium (In) verwendet. In Abb. 2.94 ist die von COCOSYS 3.0.1 berechnete Freisetzung von Spezies (rote Balken) im Vergleich zu der im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzung von Spezies (schwarze Balken) dargestellt. Wie aus dem Vergleich zu sehen ist, werden die experimentellen Daten für die leichtflüchtigen Spezies Tellur, Silber und Indium sehr gut durch die Simulationen abgebildet.

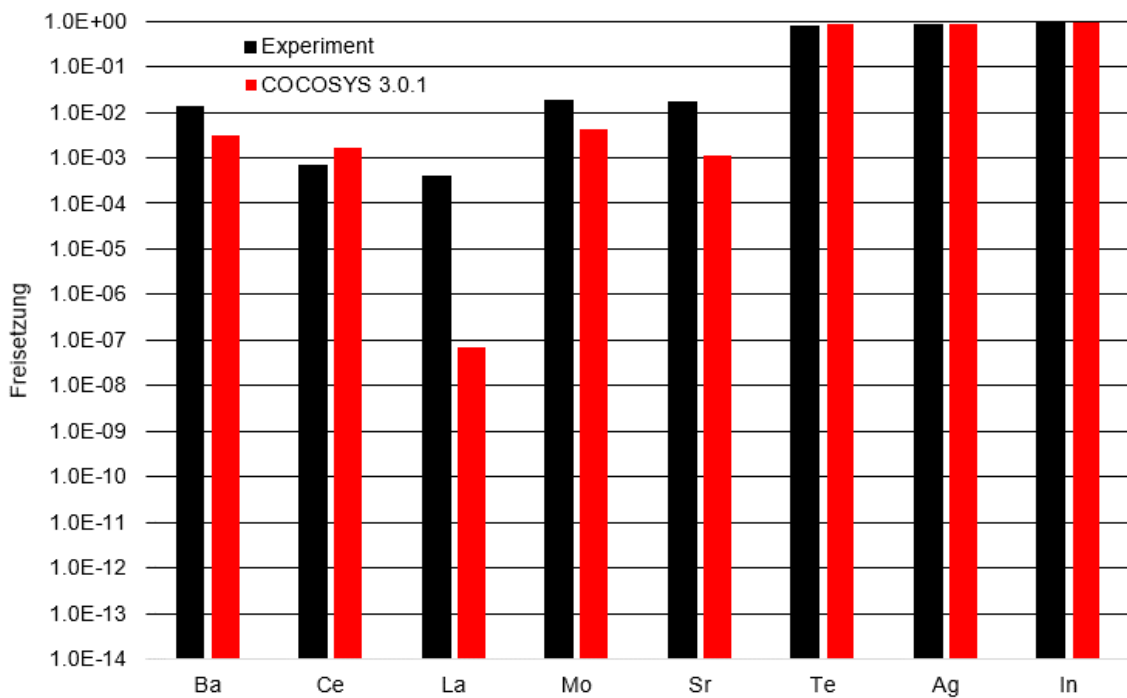


Abb. 2.94 ACE L8, Vergleich der von COCOSYS berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit den im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzungsraten von Spezies (schwarzer Balken)

Weiterhin stehen auch die Simulationsergebnisse für die Spezies Barium, Cerium, Molybdän sowie für Strontium in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Messwerten. Der größte Unterschied in den Simulationsergebnissen zeigt sich wie in den anderen Nachrechnungen für das Spaltprodukt Lanthan, für welches nur die elementare Form (La) für die Freisetzung in der aktuellen Version des CCI-Moduls in COCOSYS betrachtet wird.

Wie bereits im Abschnitt zum Experiment ACE L6 diskutiert, ist der Hauptgrund für diese Abweichungen die Tatsache, dass in der aktuellen CCI-Modellierung die oxidischen Verbindungen von Lanthan (z. B. La_2O_3), nicht berücksichtigt werden. In früheren

Nachrechnungen, die von der RUB durchgeführt wurden /AGE 17/, wurden ebenfalls ähnliche Ergebnisse hinsichtlich der Freisetzung von Lanthan (La) festgestellt. Dies ist beispielhaft an einem Vergleich der von COCOSYS V2.4v3+ berechneten Freisetzung von Lanthan mit der im Experiment ermittelten Freisetzungsrate von Lanthan gezeigt. Dabei ist deutlich zu sehen, dass die Freisetzung von Lanthan mittels der damaligen Modellbasis in der früheren COCOSYS-Version (roter Balken) stark unterschätzt wird.

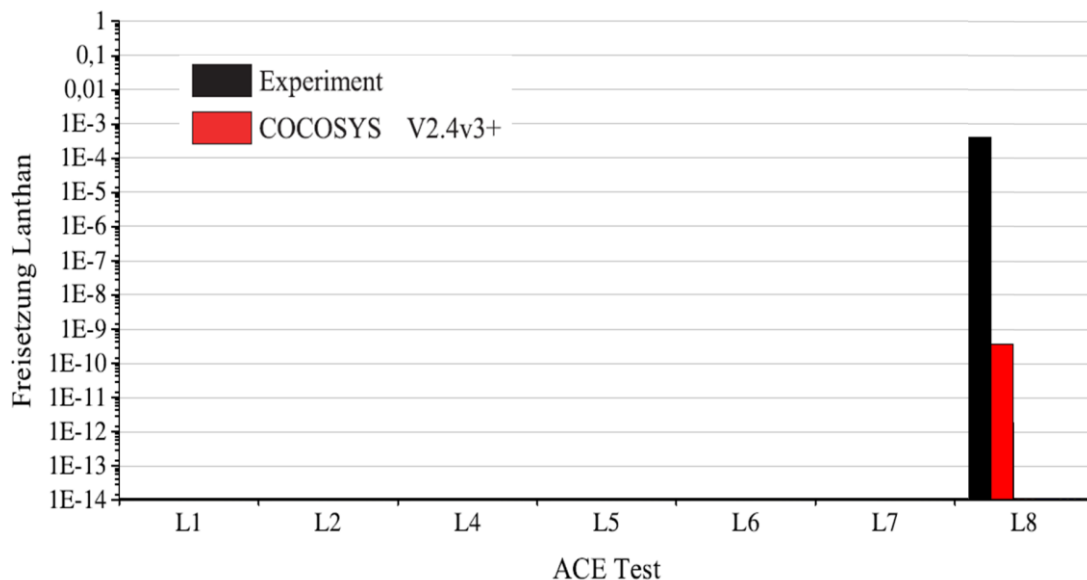


Abb. 2.95 ACE L8, Vergleich der von COCOSYS v2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Lanthan (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten anteiligen Lanthanfreisetzung (schwarzer Balken) /AGE 17/

2.3.1.6 Fazit

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die Nachrechnungen ausgewählter ACE-Experimente unter Verwendung des von der GRS empfohlenen universellen Ansatzes für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter (effektive Wärmetransferkoeffizienten und Betonzerstörungstemperatur und -enthalpie) im CCI-Modul akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen zeigen. Dabei stellt sich heraus, dass für die hier ausgewählten ACE-Versuche die Simulation mit dem empfohlenen Wert von $300 \text{ W/m}^2\text{K}$ für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Beton sowie an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre die experimentellen Werte des Erosionsfortschritts zufriedenstellend wiedergibt.

Für die Simulation des Erosionsverhaltens sowie des Schmelzetemperaturverlaufs in den vorliegenden Nachrechnungen ist die Anwendung einer im Vergleich zum bislang

verwendeten Wert (ca. 1.500 K) erhöhten Betonzerstörungstemperatur (1.800 K) im CCI-Modul von COCOSYS von entscheidender Bedeutung. Dieser Wert für die relevante Zerstörungstemperatur basiert auf den neuesten Erkenntnissen aus den im KIT-Karlsruhe durchgeführten MOCKA-Experimenten. Die Anwendung einer höheren Zerstörungstemperatur hat zur Folge, dass die berechnete Schmelzetemperatur höher liegt und somit den experimentellen Schmelzetemperaturverlauf zufriedenstellend widerspiegelt. Insgesamt hat für alle ACE-Versuche die Simulationsqualität, insbesondere hinsichtlich der berechneten Schmelzetemperatur, eine wichtige Rolle, da diese als Grundlage für die nachfolgende Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze verwendet wird.

Weiterhin ist anzumerken, dass die vor der GRS empfohlenen effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze nur in Verbindung mit der Annahme einer erhöhten Betonzerstörungstemperatur von 1.800 K verwendet werden dürfen.

Auf der Grundlage der durchgeführten Nachrechnungen lässt sich auch schlussfolgern, dass der universelle Ansatz für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter, der ursprünglich für 2D-MCCI-Versuche mit silikatischem Beton (VBES-U5, OECD CCI-3, MOCKA 5.7) validiert wurde, auch auf 1D-MCCI-Versuche sowohl mit kalksandsteinhaltigem (LCS) als auch mit kalksteinhaltigem (L) Beton (z. B. ACE L7 und ACE L8) anwendbar ist und akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen liefert.

Die auftretenden Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment lassen sich durch die im Experiment vorhandenen Unsicherheiten sowohl bei der Aufteilung des Leistungseintrags als auch bei der Auswertung der aus den Thermoelementmessungen abgeleiteten Temperaturwerten zur Detektion des Erosionsfortschritts sowie bei der Bestimmung der Schmelzetemperaturwerte erklären.

Zielsetzung der vorliegenden Validierungsarbeiten war es, den aktuellen Stand der Modellierung im CCI-Modul von COCOSYS, hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung, zu überprüfen.

Basierend auf den durchgeführten Nachrechnungen lässt sich festhalten, dass die Simulationsergebnisse für die Spezies Barium und Strontium sowie für die Spezies Tellur, Silber und Indium annähernd in der Größenordnung der experimentellen

Freisetzungsraten liegen. Des Weiteren kann festgehalten werden, dass die berechnete Freisetzungsrates für das Spaltprodukt Molybdän eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Freisetzungsraten aufweist. Ausnahme bildet hier der ACE-L6-Versuch, in dem die Simulationsergebnisse für Molybdän deutlich unterhalb der experimentellen Freisetzungswerte liegen. Hier ist jedoch zu beachten, dass die experimentellen Freisetzungsraten mit großen Unsicherheiten durch verschiedene Fehlerquellen behaftet sind. Im ACE-L6-Versuch ergab sich beispielsweise ein maximaler Fehler von 67 % für die Freisetzungsrates von Molybdän.

Hingegen wird die Freisetzung von Lanthan und Ruthenium in allen ACE-Versuchen deutlich unterschätzt. Der Hauptgrund für diese Abweichungen ist die Tatsache, dass in der aktuellen Version des CCI-Moduls in COCOSYS 3.0.1 nur die elementare Form (La, Ru) der beiden Spezies für die Freisetzung betrachtet wird und ihre oxidischen Verbindungen (z. B. RuO_3 , RuO_4 , La_2O_3), die ebenfalls als flüchtig betrachtet sind, nicht berücksichtigt werden. Ähnliche Ergebnisse hinsichtlich der Freisetzung von Lanthan und Ruthenium wurden ebenfalls in früheren Nachrechnungen von anderen Instituten (Ruhr-Universität, Bochum und VEIKI, Ungarn) festgestellt. Im Prinzip gehört Ruthenium zu den schwer-flüchtigen Spaltprodukten und hat eine geringe Freisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Jedoch kann Ruthenium unter höheren Temperaturen leicht-flüchtige oxidische Verbindungen wie RuO_3 , RuO_4 , RuO oder RuO_2 bilden. Diese oxidischen Verbindungen können dazu führen, dass das sonst schwerflüchtige Spaltprodukt eine hohe Freisetzungsrates erreicht. Aus diesem Grund kann die Freisetzung von Ruthenium potenziell einen großen Beitrag zum gesamten Quellterm liefern. Außerdem ist Lanthan wegen seines Isotops (^{140}La) auch von großer Bedeutung für die Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze. Lanthan kann in der Schmelze entweder in elementarer La oder in oxidischer La_2O_3 Form vorliegen. So kann die Freisetzung vom sonst schwerflüchtigen Spaltprodukt La ebenfalls eine große Rolle für den Quelltermbeitrag ins Containment spielen.

Einzige Ausnahme bei den schwerflüchtigen Spaltprodukten bildet das Spaltprodukt Cerium (Ce), für welches die experimentellen Freisetzungsrates zufriedenstellend durch die Nachrechnungen abgebildet werden. Nur im ACE-L2-Versuch werden die experimentellen Freisetzungsrates für Cerium in der Simulation überschätzt, was auf die Überschätzung der Schmelzetemperatur zurückzuführen ist. So zeigt sich der Einfluss der Schmelzetemperatur auf die Spaltproduktfreisetzung, der durch den Verdampfungsmechanismus in der CCI-Modellierung verursacht wird.

Bei der Nachrechnung des ACE-L7-Experimentes mit Einsatz von Borcarbid (B_4C) zeigt sich weiterhin, dass die Freisetzungsrates von Bor in der Simulation mit dem CCI-Modul wesentlich unterschätzt wird. Die im Vergleich zum Experiment deutlich niedrigere Freisetzungsrates von Bor ist auf die Nichtberücksichtigung von oxidischem Bor (B_2O_3) in der aktuellen CCI-Modellierung zurückzuführen. Dabei wird aktuell für die Simulation von Borcarbid (B_4C) nur die elementare Form von Bor (B) betrachtet.

Des Weiteren ist zu bemerken, dass aktuell in der CCI-Modellierung von COCOSYS 3.0.1 kein Modell für die mechanische Aerosolfreisetzung von Spaltprodukten aus der Schmelze durch Mitriss von Tröpfchen in Folge des Zerplatzens von Gasblasen beim Austritt des Gasblasenstroms an der Schmelzeoberfläche zur Verfügung steht. Ein solches Modell wird jedoch benötigt, um das Phänomen für den realen Prozess der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze zu berücksichtigen.

Auf der Basis der durchgeführten Validierungsarbeiten kann gefolgert werden, dass die aktuelle CCI-Modellierung in COCOSYS hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung modifiziert bzw. erweitert werden muss, um die Aussagefähigkeit für den gesamten Quelltermbeitrag ins Containment unter den zu erwartenden Störfallbedingungen zu verbessern.

Hierzu werden folgende Aspekte zur Verbesserung/Erweiterung des CCI-Moduls in COCOSYS hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze vorgeschlagen:

- Erweiterung des Spaltproduktfreisetzungmodells zur Berücksichtigung der oxidischen Verbindungen (RuO_3 , RuO_4 , RuO oder RuO_2) für die Spaltprodukte Lanthan und Ruthenium
- Korrelation für Sauerstoffpartialdruck
- Erweiterung der Schnittstelle zwischen Spaltproduktfreisetzungsmodule und Materialdatenbank (Poolcav.mdb) um zwei oxidische Verbindungen (B_4C und B_2O_3) für das Spaltprodukt Bor
- Implementierung eines Modells zur Berücksichtigung der Aerosolfreisetzung mittels Tropfenmitriss in Folge des Zerplatzens von Gasblasen beim Austritt des Gasblasenstroms an der Schmelzeoberfläche.

2.3.2 Erprobung der Anwendbarkeit des Kernfänger-Modells in COCOSYS auf das EPR™-Konzept

Für die Simulation der Rückhaltung und der langfristigen Schmelzekühlung im Kernfänger einer EPR™-Anlage (Europäischer Druckwasserreaktor, Framatome) steht dem COCOSYS-Nutzer das von der GRS entwickelte Kernfänger-Modell zur Verfügung. Dieses Modell kombiniert das Aufschmelzmodell (im CCI-Hauptmodul) zur Berechnung der Interaktion zwischen Kernschmelze und Opfermaterial sowie das CCV-Modell für den Wärmeübergang von der heißen Kernschmelze an die gekühlten Kernfängerplatten.

Zielsetzung der durchgeführten Arbeiten war es, das Kernfänger-Modell sowie das CCI-Hauptmodul (CCI) in COCOSYS speziell in Bezug auf deren Anwendung auf das EPR™-Design auszutesten.

Zur Überprüfung der Anwendbarkeit des Kernfänger-Modells wurden COCOSYS-Testrechnungen mit einem vereinfachten Datensatz für das EPR™-Containment durchgeführt. Dabei wurden die passive Schmelzekühlung durch Wasserüberflutung der Kernschmelze sowie die aktive Langzeitkühlung der Kernschmelze mit geschlossenem Kreislauf im Fall eines Unfalls mit RDB-Versagen untersucht.

2.3.2.1 Kernfänger-Konzept im Containment des EPR™-Designs

Eines der wichtigen Ziele des EPR™-Designs ist die Sicherstellung der Langzeitintegrität des Containments, das die letzte Barriere für radioaktive Stoffe zur Umgebung darstellt. Für den Fall eines Unfalls mit RDB-Versagen darf die austretende Kernschmelze keine radiologischen Auswirkungen außerhalb der Anlage verursachen. Diese Anforderung kann nur erfüllt werden, wenn die Wechselwirkung der Kernschmelze mit dem Betonfundament des Containments verhindert wird. Zur Rückhaltung und langfristigen Abkühlung der Kernschmelze ist im EPR™-Design ein System zum Auffangen der Kernschmelze, der sogenannte „Kernfänger“, vorgesehen. Dabei handelt es sich um ein Konzept, bei dem sich die austretende Kernschmelze zunächst unterhalb des RDB am Boden der Reaktorgrube sammelt und nach Durchschmelzen eines Schmelzstopfens über einen Auslaufkanal in einen Ausbreitungsraum fließt und sich dort auf eine große Fläche ausbreitet. Die Ausbreitungsfläche besteht aus einer Opferbetonschicht, die zuerst als eine Rückhaltung der Schmelze wirkt und die Bodenplatten vor dem direkten Kontakt mit der Schmelze schützt. Mit Hilfe passiver und aktiver Einrichtungen wird nach dem Ausbreiten der Kernschmelze auf der Ausbreitungsfläche Wasser aus dem

Flutbecken (IRWST) zur Flutung und Kühlung der Kernschmelze eingespeist. Das Ausbreitungskonzept des EPR™-Designs ist in Abb. 2.96 dargestellt.

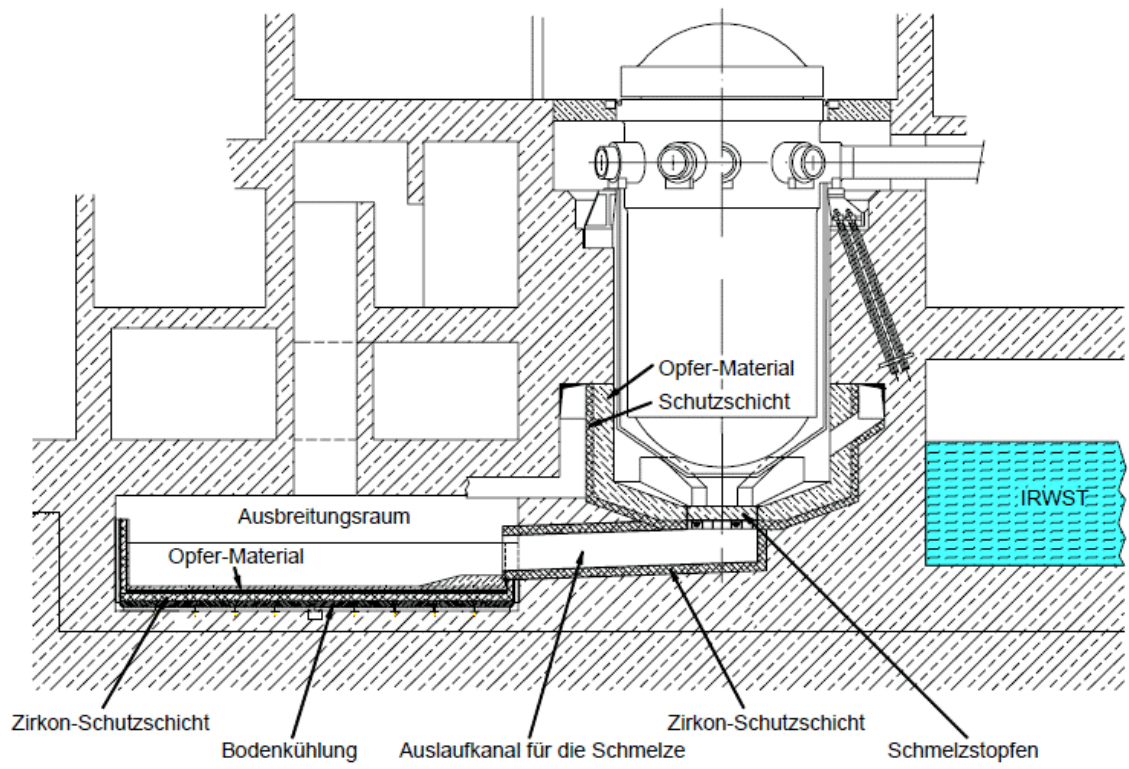


Abb. 2.96 Ausbreitungskonzept des EPR™-Designs, via Wikimedia Commons

Die Reaktorgrube hat einen Innendurchmesser von 6,15 m und eine Höhe von 4,5 m. Die Seitenwände der Reaktorgrube sind mit einer 55 cm dicken Opferbetonschicht versehen. Am Boden der Reaktorgrube befindet sich ein Schmelzstopfen (Verschluss), der aus einer 50 cm dicken Opferbetonschicht mit darunterliegender Stahltragkonstruktion (Stahltor) besteht /LIN 21/, /NIE 05/. Nach RDB-Versagen soll die Schmelze zunächst in der Reaktorgrube für einen bestimmten Zeitbereich zurückgehalten werden, um sicherzustellen, dass die gesamte Schmelze gesammelt wird. Dabei kommt sie mit dem Opferbeton in Kontakt und die Beton-Schmelze-Wechselwirkung in der Reaktorgrube beginnt. Aufgrund der Vermischung der Schmelze mit dem zerstörten Opferbeton wird sich die Fließfähigkeit der Schmelze für die nachfolgende Schmelzeausbreitung erhöhen, d. h. die Schmelze wird konditioniert, bevor sie in den Kernfänger überführt wird. Der Opferbeton ist auf einer Platte, dem sogenannten „Stahltor“, aufgebracht, das durch eine Stahlkonstruktion befestigt ist. Nach Durchschmelzen der Opferbetonschicht und des darunterliegenden Stahltors fließt die Schmelze über einen leicht abfallenden Kanal in den Ausbreitungsraum des Kernfängers.

Ein wichtiger Aspekt des Kernfänger-Konzeptes ist die Ausbreitung der Schmelze auf einer großen Fläche, um eine effektive und ausreichende Schmelzekühlung zu gewährleisten. Der Kernfänger besteht aus einem Ausbreitungsraum, der eine Ausbreitungsfläche von 170 m² besitzt (Abb. 2.97).

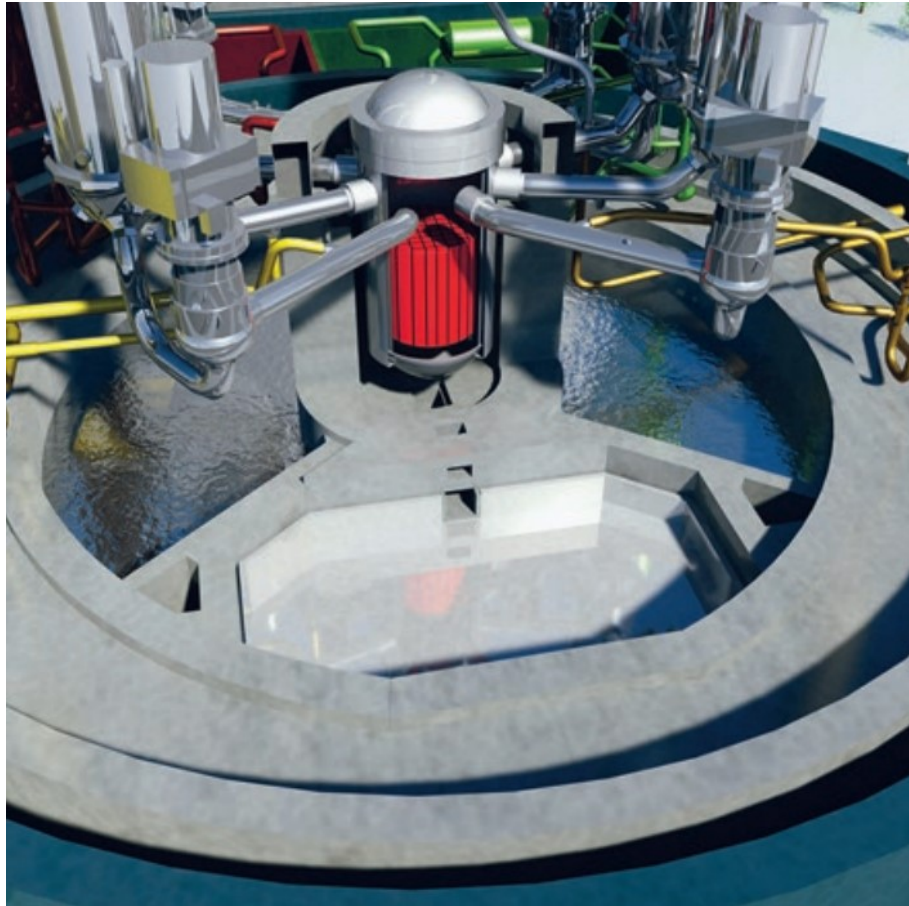


Abb. 2.97 Kernfänger des EPR™-Designs (Blick auf den Ausbreitungsraum)
/AHN 15/

Die Boden- und die Seitenplatten der Ausbreitungsfläche bestehen aus gusseisernen Elementen, die mit einer 10 cm dicken Opferbetonschicht versehen sind. Unter den Elementen der Bodenplatte sind Kühlrippen angebracht, die eine gewisse Flexibilität gegenüber thermischen Ausdehnungen aufweisen. Der Opferbeton soll gewährleisten, dass die gusseisernen Elemente vollkommen mit Kühlwasser umgeben sind, bevor die Schmelze in direkten Kontakt mit den Boden- und Seitenplatten kommt. Nach der Ausbreitung im Kernfänger muss die Schmelze gekühlt werden. Dazu wird Wasser aus dem Flutbecken (IRWST) von unten in die Kanäle der Kühlrippen eingespeist. Das Kühlsystem mit Boden- und Seitenplatten sowie der Schichtenaufbau des EPR™-Kernfängers sind in Abb. 2.98 dargestellt.

Eintritt der Schmelze wird dieses Material aufgeschmolzen und es wird ein Signal zum Öffnen des Federventils ausgelöst. Bei dem anfänglichen Massenstrom von 100 kg/s dauert der Flutvorgang etwa 5 Minuten /IRSN 04/. Dieser Massenstrom gewährleistet, dass sich die Schmelze auf der gesamten Ausbreitungsfläche verteilen kann, bevor die Kühlkanäle mit Wasser geflutet werden.

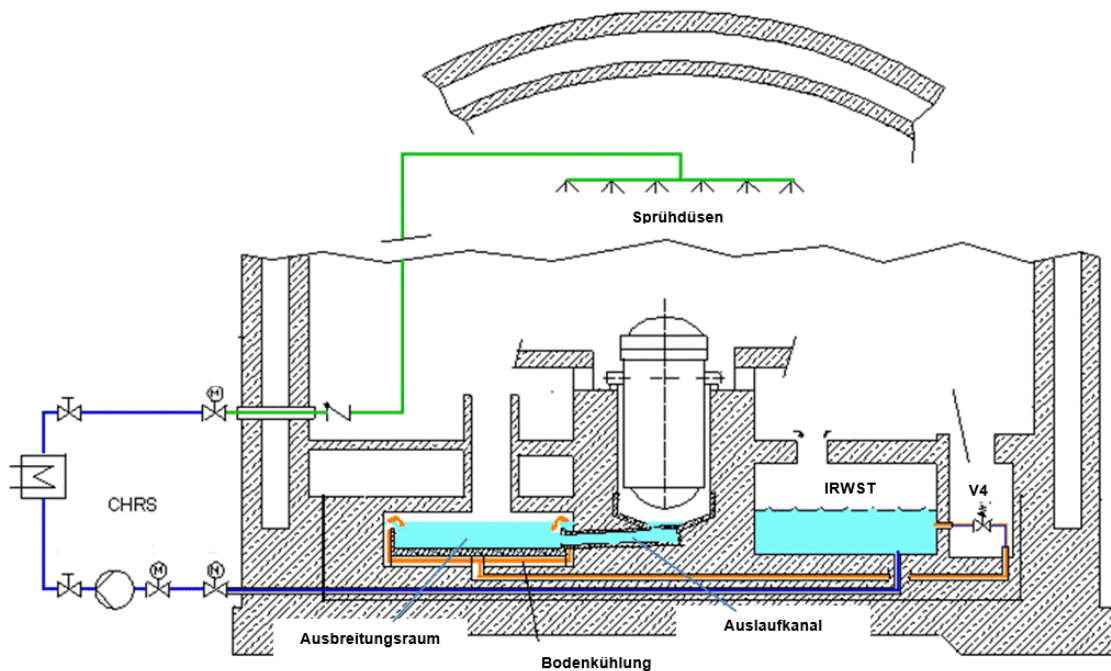


Abb. 2.99 EPR™ Kernfänger, passive Schmelzekühlung durch Wasserüberflutung der Kernschmelze, Areva NP (CC0), via Wikimedia Commons

Die aktive Schmelzekühlung erfolgt durch das aktive Containment Heat Removal System (CHRS) des EPR™. Dieses System verfügt über zwei Stränge, die sich jeweils in Haupt- und Zwischenstrang aufteilen. Der Hauptstrang besteht aus einer Ansaugleitung aus dem Flutbecken (IRWST) (blaue Rohrleitung in Abb. 2.99), zwei motorbetriebenen Ventilen, einer Pumpe, einem Wärmetauscher, der die Wärme an den Zwischenstrang abgibt. Durch Öffnen der motorbetriebenen Ventile kann über die Pumpe Wasser aus dem Flutbecken (IRWST) angesaugt werden und die Wärme über den Wärmetauscher an einen separaten Zwischenkühlstrang abgegeben werden. Das gekühlte Wasser kann entweder zum Druckabbau im Containment mittels Sprühens (grüner Strang in Abb. 2.99) oder zur Langzeitkühlung der Schmelze im Ausbreitungsraum des Kernfängers (orangener Strang in Abb. 2.99) verwendet werden. Bei der Langzeitkühlung der Schmelze steigt der Wasserspiegel im Auslasskamin des Ausbreitungsraums. Nach einer gewissen Zeit ist der Kamin vollgelaufen und das überlaufende Wasser gelangt von dort aus über einen Raum zurück in das Flutbecken (IRWST), so dass ein geschlossener

Kühlkreislauf ermöglicht wird. Die Schmelzekühlung findet in dieser Betriebsweise einphasig mittels des unterkühlten Kühlmittels statt. Zusätzlich zum Auslasskamin des Ausbreitungsraums steigt auch der Wasserspiegel in der Reaktorgrube, so dass der RDB vollständig mit Kühlwasser geflutet wird. Somit wird eine langfristige Kühlung verbliebener Partikelschüttungen entweder im RDB oder im Auslaufkanal gewährleistet.

2.3.2.2 COCOSYS-Datensatz

Zur Untersuchung der Prozesse im Kernfänger einer EPR™-Anlage wurde zunächst ein vereinfachtes COCOSYS-Modell entwickelt. Der COCOSYS-Datensatz umfasst insgesamt 5 Modellzonen für den Sicherheitsbehälter (s. Abb. 2.100) und 2 Modellzonen für die Kühlkanäle des Kernfängers (s. Abb. 2.101).

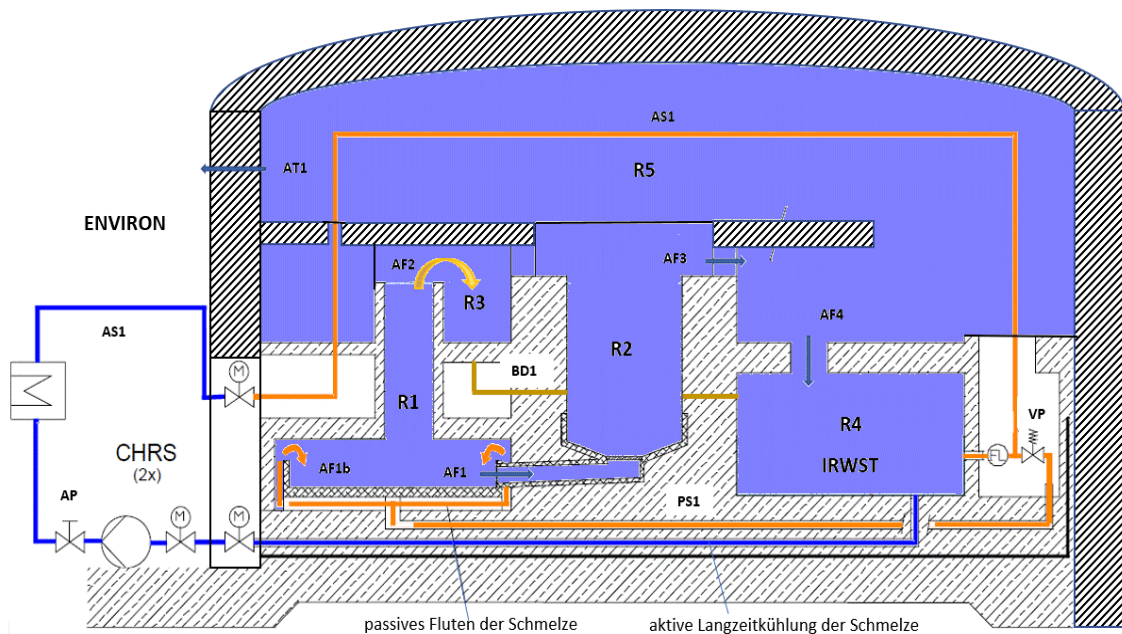


Abb. 2.100 COCOSYS-Nodalisierung des Sicherheitsbehälter einer EPR™-Anlage

Zone R1 modelliert den Ausbreitungsraum des Kernfängers, inklusive der Kernfängerkammer mit dem Auslasskamin. Hierzu breitet sich die Schmelze auf einer Ausbreitungsfläche aus und kommt mit einer Opferbetonschicht in Kontakt. Zusätzlich wird eine Modellzone (R1a) für die Kühlkanäle der Kühlrippen unter der Bodenplatte und eine Modellzone (R1b) für die Spalte hinter der Seitenplatte (Seitenstruktur) des Kernfängers eingeführt (s. Abb. 2.101). Zone R2 modelliert die Reaktorgrube, in der sich die ausgetretene Schmelze sammelt und die Wechselwirkung zwischen Schmelze und Opferbeton bis zu einer axialen Erosionstiefe von 50 cm stattfindet. Zone R3 ist der Raum, in den das aus dem Auslasskamin überlaufende Wasser zugeführt wird. Zone R4 modelliert

das im Sicherheitsbehälter befindliche Flutbecken (IRWST), durch das eine passive Flutung sowie eine aktive Langzeitkühlung der Kernschmelze gewährleistet wird (s. Abb. 2.100). Der Dom oberhalb der Dampfzeugertürme bzw. die Kuppel des Sicherheitsbehälters ist mit einer Zone R5 modelliert. Die Umgebung wird ebenfalls als eine Modellzone (ENVIRON) abgebildet.

Die Raumzonen sind durch insgesamt 9 Verbindungen, wie z. B. freie Öffnungen und Drainageverbindungen, miteinander verknüpft. Die meisten Zonen sind mit dem neuen ATM_FULL-Verbindungstyp verknüpft, der zum einen den Ausgleich des Wasserspiegels, zum anderen aber auch den Energieaustausch zwischen den Wasserbereichen der Zonen ermöglicht. Beispielsweise ist hier die ATM_FULL-Verbindung (AF1b) zu nennen, die zur Modellierung des Wasserüberlaufs aus der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b) in den Ausbreitungsraum (Zone R1) verwendet wird (s. Abb. 2.101). Ein anderes Beispiel ist die ATM_FULL-Verbindung (AF1), die den Auslaufkanal zwischen der Reaktorgrube (Zone R2) und dem Ausbreitungsraum (Zone R1) repräsentiert. Für die Modellierung passiver bzw. aktiver Wassereinspeisung aus dem Flutbecken (Zone R4) in den Kühlkanal unterhalb der Bodenplatte des Kernfängers werden zwei Verbindungen vom PUMP_SYS-Type (AP1 und AS1) unter Berücksichtigung generischer Parameter eingesetzt (s. Abb. 2.101).

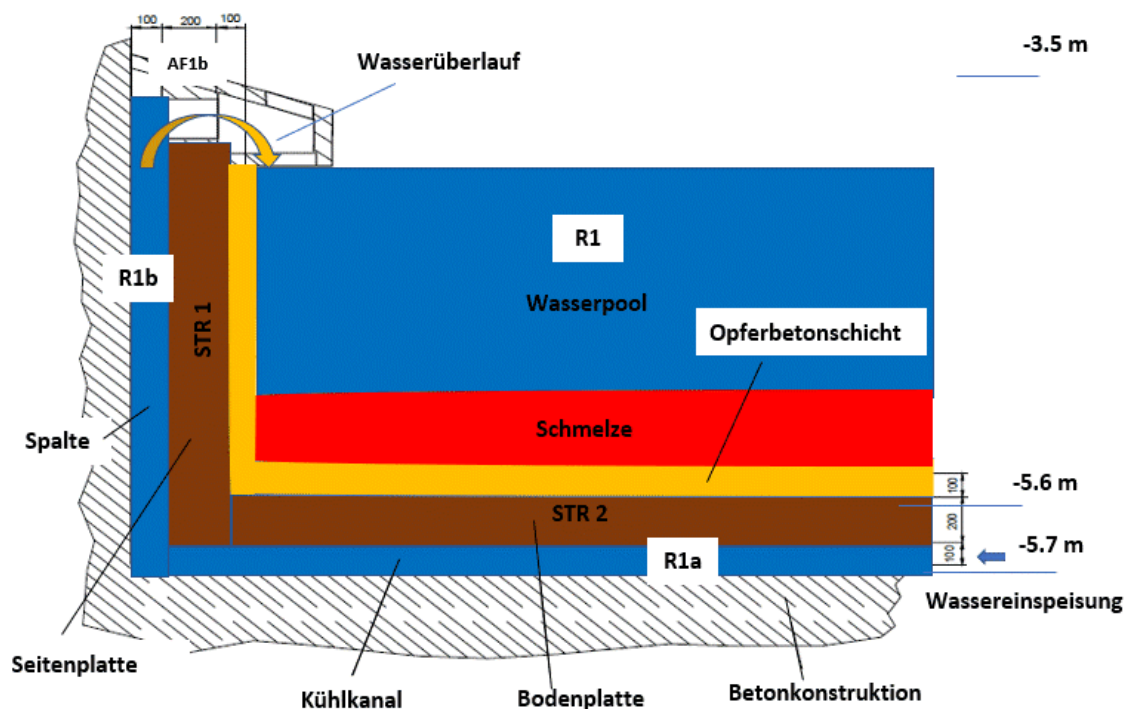


Abb. 2.101 Modellierung des Ausbreitungsraums im Kernfänger einer EPR™-Anlage

Die Leckage aus dem Sicherheitsbehälter ist mit 0,25 Vol.-%/d angegeben und wird im Datensatz durch eine atmosphärische Verbindung AT1 mit einer Querschnittsfläche von 0,084 cm² simuliert.

Das vereinfachte COCOSYS-Modell berücksichtigt die vorhandenen Wärmeleitstrukturen wie Decken, Böden und Wände aus Beton sowie die Kernfängerplatten aus Stahl. Den Raumzonen werden insgesamt 8 Wärmeleitstrukturen zugeordnet. Die Kernfängerplatten werden mit einer vertikalen (STR1) und einer horizontalen (STR2) COCOSYS-Wärmeleitstruktur abgebildet (s. Abb. 2.101).

Zur Berechnung des Wärmeübergangs zwischen der Kernschmelze und den Kernfängerplatten, wird auf der Seite der Wärmeleitstrukturen STR1 und STR2 zur Schmelze das neu entwickelte CCV-Wärmeübergangsmodell aktiviert. Für alle anderen Wärmeleitstrukturen wird das kombinierte CO1-Wärmeübertragungsmodell angewendet.

Im Falle einer passiven Schmelzekühlung kommt es zu einer Zweiphasenströmung in den Kühlkanälen entlang der Boden- und Seitenwände des Kernfängers. In diesem Rechenfall wird für den Wärmeübergang auf der gekühlten Seite der Wärmeleitstrukturen STR1 und STR2 zum Wasser die neue in COCOSYS implementierte Rohsenow-Korrektur (Kap. 3.1.2.2, S. 193) zusätzlich zum CO1-Wärmeübergangsmodell aktiviert.

2.3.2.3 Anfangs- und Randbedingungen

Zusammensetzung des Schmelzeaustrags in die Reaktorgrube

Mit RDB-Versagen beginnt der Schmelzeaustrag in die Reaktorgrube. Es wird nur ein Schmelzeaustrag aus dem RDB in die Reaktorgrube unterstellt. Insgesamt werden nach RDB-Versagen etwa 184 t Oxidschmelze und 120 t Metallschmelze in die Reaktorgrube ausgetragen. Es wird angenommen, dass der Oxidationsgrad des Zirkoniums in der Kernschmelze bei 40 % liegt (Rechenfall Standard-40-L in /NIE 05/). Aufgrund der guten Löslichkeit von Zr in den (U,Zr)O₂-Schmelzen ist der größte Teil des Zr in der oxidischen Schmelze vorhanden.

Zusammensetzung des Opferbetons in der Reaktorgrube

Laut Hersteller des EPR™ soll die Zusammensetzung des in der Reaktorgrube verwendeten Opferbetons speziell ausgewählt werden, um die Anforderungen der vorübergehenden Rückhaltung und Kühlung der Kernschmelze zu erfüllen.

Das CCI-Modul in COCOSYS verwendet einen empirischen Ansatz zur Simulation der Betonzerstörung. Bei diesem Ansatz spielen die Zerstörungstemperatur und -enthalpie eine wichtige Rolle für die Berechnung der Betonerosionskinetik. Basierend auf Experimenten der MOCKA-Serie (KIT, Karlsruhe) wird für die hier relevanten CCI-Testrechnungen eine Betonzerstörungstemperatur von 1.800 K angenommen, unabhängig davon, ob der Beton eine Armierung enthält oder nicht /FOI 14/. Für die Zerstörungsenthalpie wird ein Wert von $2,64 \cdot 10^6$ J/kg unter Berücksichtigung der spezifischen Wärme zum Aufheizen des Betons bei der angenommenen Zerstörungstemperatur von 1.800 K verwendet.

Der Opferbeton ist auf einer Platte, dem sogenannten „Stahltor“, aufgebracht, die durch eine Stahlkonstruktion befestigt ist. Diese ist in dem vorliegenden COCOSYS-Modell nicht berücksichtigt.

Schmelzekonfiguration in den Schmelzepools

In der COCOSYS-Testrechnung wird eine homogenisierte Anfangskonfiguration der Kernschmelze sowohl in der Reaktorgrube (Schmelzepool 1) als auch im Ausbreitungsraum (Schmelzepool 2) ohne Berücksichtigung einer möglichen Abfolge von Schichtungsvorgängen in der Schmelze, d. h. ohne Übergang von homogener zu geschichteter Schmelzekonfiguration angenommen.

Anfängliche Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial

Im CCI-Modul wird für die anfängliche Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial eine Schar von Punkten mit r, z-Koordinaten unter der Annahme axialer Symmetrie vorgegeben (s. Abb. 2.102).

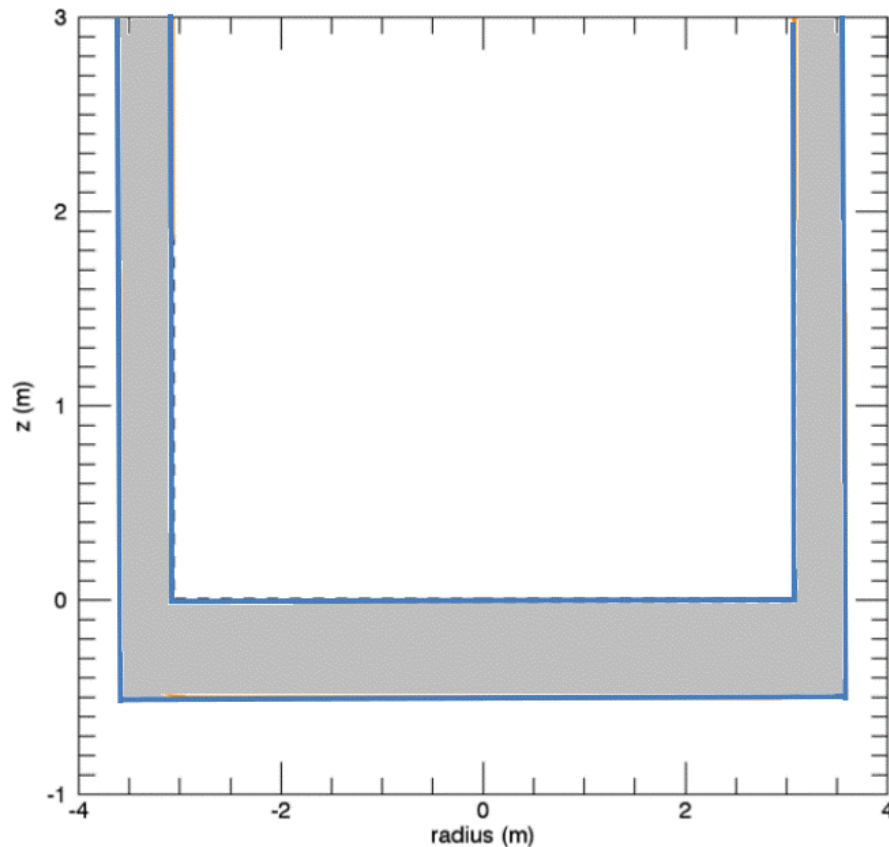


Abb. 2.102 COCOSYS, Definition der inneren Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial in Form einer 2D-Punkteschar (r , z -Koordinaten)

Bei der Darstellung der inneren Kontur durch Definition der r , z -Koordinaten ist die leichte Neigung des Bodens der Reaktorgrube vernachlässigt.

Nachzerfallsleistung des Schmelzeaustrags in die Reaktorgrube

Die Nachzerfallsleistung des Kerninventars wurde gemäß der für eine thermische Reaktorleistung von 4.250 MWth angegebenen Nachzerfallswärme definiert /NIE 05/.

Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und Opfermaterial

Unter Berücksichtigung einer erhöhten Zerstörungstemperatur des Opfermaterials von 1.800 K liegen typische Wärmeübergangskoeffizienten zur Kernschmelze im Bereich von $300 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Wärmeübergang am Boden und $1.600 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für den Wärmeübergang an der Seitenwand bei Oxidschmelzen in einer Reaktorgrube aus silikatischem Beton (62 – 70 Gew.% SiO_2) und vorausgesetzt, dass sich am Boden eine stabile Schicht erstarrten Materials gebildet hat. Diese Werte wurden im Rahmen einer

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für das CCI-Modul in COCOSYS ermittelt /SPE 18/. Da der Opferbeton für EPR™ überwiegend aus SiO₂, versetzt mit großem Anteil aus Fe₂O₃, besteht, wird ein Wärmeübergangskoeffizient von 300 W/(m²*K) für den Wärmeübergang am Boden angenommen.

Wenn sich das Opfermaterial (Opferbeton) von einem bislang untersuchten Beton deutlich unterscheidet, können nicht unbedingt die gleichen Wärmeübergangskoeffizienten wie mit silikatischem Beton angenommen werden. Es ist noch anzumerken, dass hier eine beträchtliche Unsicherheit vorliegt.

Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und Boden- /Seitenplatten des Kernfängers

Entsprechend Abb. 2.101 handelt es sich hierbei um den Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und den Strukturen STR1 und/oder STR2, nachdem ein direkter Kontakt zwischen Kernschmelze und STR1 bzw. STR2 hergestellt ist. Dieser direkte Kontakt wird vom CCI-Modul berechnet, sobald die Schmelzfront zwischen Kernschmelze und Opfermaterial an die Begrenzung durch die Core-Catcher-Platte vorgedrungen ist. Vorher wird in einer vereinfachenden Annahme kein Wärmeeintrag in die Core-Catcher-Platte berechnet. Da die Phänomene beim Wärmeübergang zwischen Kernschmelze und Core-Catcher-Platte im Vergleich zu denen während der MCCI-Phase mit Opfermaterial unterschiedlich sind, muss der Nutzer hier separat einen Wärmeübergangskoeffizienten vorgeben. Speziell bei der unteren Begrenzung (Bodenplatte) erfolgt die Kühlung der Schmelze in stabiler Stratifikation und in Abwesenheit einer Gasdurchsetzung. Daher muss von einem beträchtlichen Einfluss von Wärmeleitung ausgegangen werden. Diese kann nur vereinfacht durch die Wahl eines niedrigen Wärmeübergangskoeffizienten angenähert werden. Experimentelle Daten sind nur begrenzt vorhanden. Der Versuch WCB-1 aus dem OECD-MCCI-2-Projekt /FAR 10a/, /FAR 10b/ bietet dazu einige Messdaten, die im Rahmen der Weiterentwicklung von COCOSYS zur Überprüfung des Modells genutzt wurden /SPE 22/.

2.3.2.4 Simulationsergebnisse für die passive Schmelzekühlung

Wie bereits aufgeführt, kommt nach RDB-Versagen die Schmelze in der Reaktorgrube mit der Opferbetonschicht des Schmelzstopfens in Kontakt und die Beton-Schmelze-Wechselwirkung in der Reaktorgrube beginnt. Nach etwa 7.700 s ist der

Schmelzstopfen, der aus einer 50 cm dicken Opferbetonschicht besteht, vollständig durchgeschmolzen. Abb. 2.103 zeigt die Erosion der Opferbetonschicht in radialer und axialer Richtung.

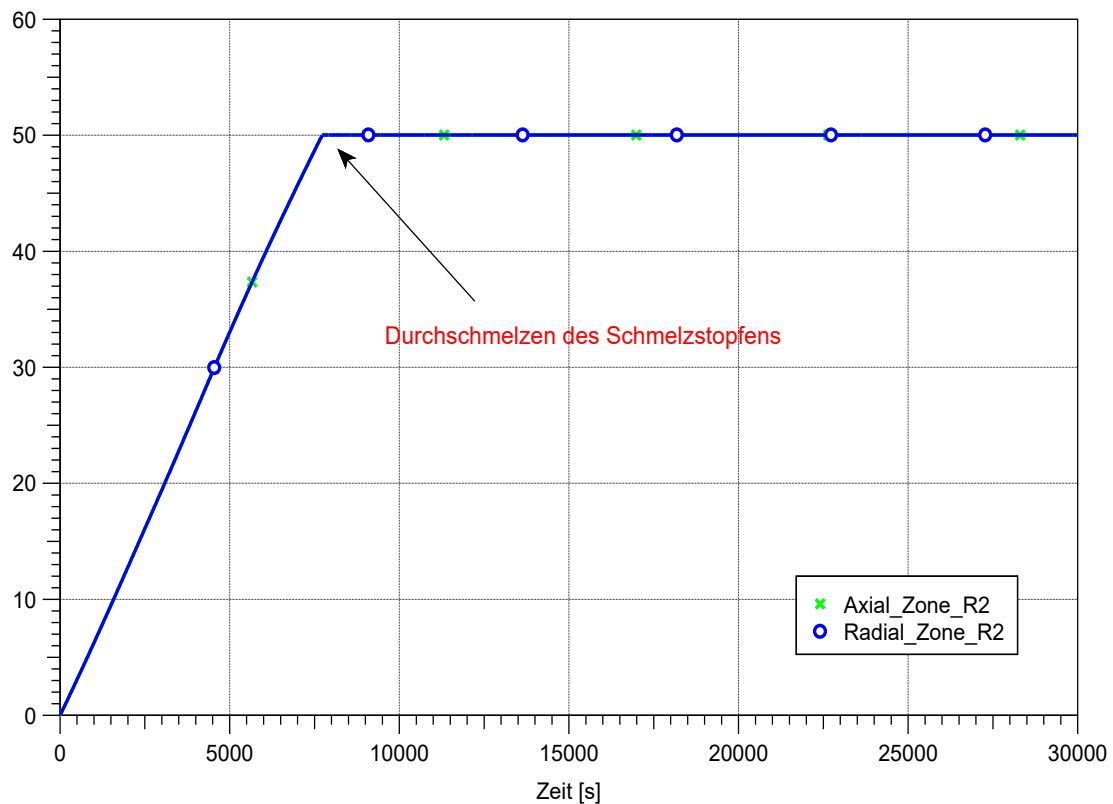


Abb. 2.103 COCOSYS, radiale und axiale Erosionstiefe in der Reaktorgrube (Zone R2)

Nach Durchschmelzen des Schmelzstopfens fließt die Schmelze über einen leicht geneigten Kanal in den Ausbreitungsraum des Kernfängers (Zone R1, vgl. Abb. 2.101). Der Ausbreitungsraum hat eine Ausbreitungsfläche von ca. 170 m². Insgesamt werden ca. 343.000 kg Schmelze aus der Reaktorgrube in den Ausbreitungsraum des Kernfängers ausgetragen.

Der Schmelzeaustrag in den Ausbreitungsraum löst ein Signal zum Start der passiven Schmelzekühlung aus. Die passive Schmelzekühlung erfolgt durch das Öffnen eines federbetätigten Ventils, was eine schwerkraftbedingte Wassereinspeisung aus dem Flutbecken (IRWST, Zone R4) ermöglicht. So wird die Wassereinspeisung in den Kühlkanal unterhalb der Bodenplatte des Kernfängers bei 7.700 s eingeleitet. Zunächst fließt das Wasser durch die Kanäle der Kühlrippen unter der Bodenplatte (Zone R1a, vgl. Abb. 2.101). Danach steigt der Wasserstand in der Spalte (Zone R1b) hinter der Seitenplatte (Seitenstruktur) des Kernfängers rasch an. Nachdem der Wasserstand in

der Spalte die untere Kante des Überlaufs (1,9 m) erreicht hat (bei ca. 8.000 s), fließt das Wasser durch die kombinierte Gas-Wasser-Verbindung (AF1a) in den Ausbreitungsraum des Kernfängers (Zone R1). Abb. 2.104 zeigt den zeitlichen Verlauf der Wasserspiegel in den Kanälen der Kühlrippen (Zone R1b) und in der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b) sowie im Ausbreitungsraum (Zone R1).

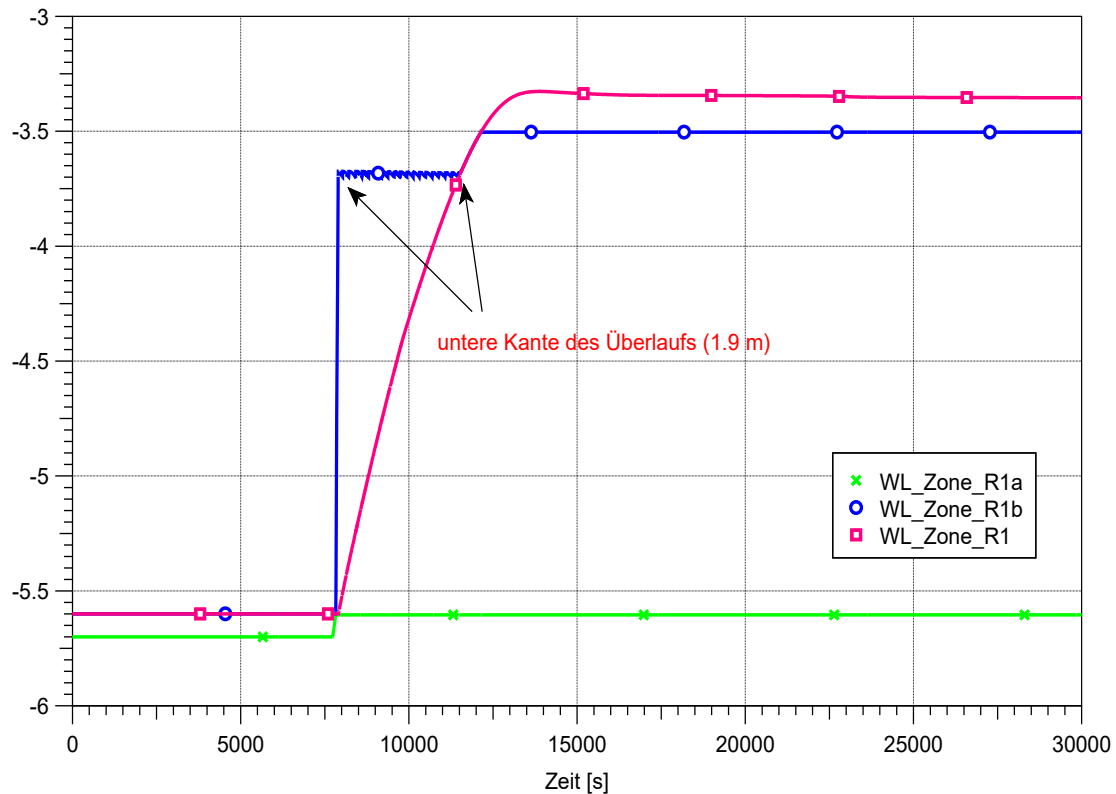


Abb. 2.104 COCOSYS, Wasserspiegel in den Kanälen der Kühlrippen (Zone R1b) und in der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b) sowie im Ausbreitungsraum (Zone R1)

Wie aus der Abbildung zu sehen ist, wird die Spalte hinter der Seitenplatte innerhalb von 265 s (~ 4.4 Min.) bis zum Überlauf mit Wasser gefüllt. Dies steht in Übereinstimmung mit der vom Hersteller vorgegebenen Zeit (5 Min. bei postuliertem Massenstrom von ca. 100 kg/s) zum vollständigen Füllen des Kühlkanals. Danach steigt der Wasserstand im Ausbreitungsraum (Zone R1) an (s. Abb. 2.104) und die Schmelze wird vollständig mit Wasser überflutet und von oben gekühlt, was schließlich zur Erstarrung der Schmelze führen soll. Im Zeitbereich zwischen 8.000 s und 12.600 s werden einzelne Schwingungen in dem Massenstrom durch die Verbindung berechnet. Der Grund für diese Schwingungen ist derzeit unbekannt.

Sobald der Wasserstand im Ausbreitungsraum die untere Kante des Überlaufs erreicht (ca. 11.900 s), wird das Gasvolumen im oberen Bereich des Kühlkanals (Zone R1b) oberhalb des Überlaufs durch die Rückströmung in den Kühlkanal weitgehend mit Wasser gefüllt (R1a).

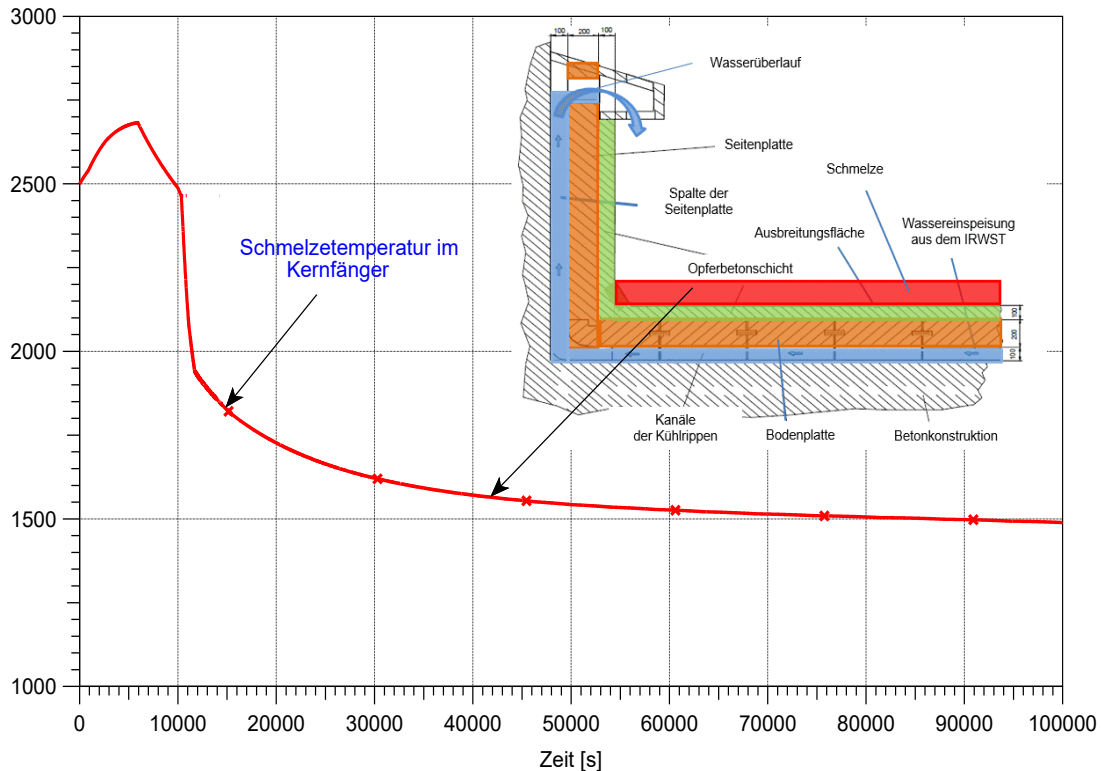


Abb. 2.105 COCOSYS, zeitlicher Verlauf der Schmelzetemperatur im Kernfänger

Zum Zeitpunkt der Einleitung der Wassereinspeisung in den Kühlkanal (7.700 s) kommt die Schmelze mit der 10 cm dicken Opferbetonschicht, mit der die Stahlstrukturen (Boden- und Seitenplatten) des Kernfängers (Zone R1) ausgekleidet sind, in Kontakt. Die Wechselwirkung der Schmelze mit der Opferbetonschicht im Kernfänger dauert ca. 1.860 s (ca. 31 Minuten), bevor die Kernschmelze in den ersten Kontakt mit den gekühlten Strukturen tritt. Die radiale und axiale Erosion der Opferbetonschicht im Ausbreitungsraum des Kernfängers ist in Abb. 2.106 dargestellt.

Zu Beginn steigt die Oxidtemperatur aufgrund der stark exothermen Zr-Oxidation durch Fe_2O_3 an, die zur Energiezufuhr des Coriums beiträgt. Nach der vollständigen Zr-Oxidation wird wegen der immer noch hohen Nachzerfallswärme und der exothermen Oxidation der Cr- und Ni-Metallbestandteile eine relativ langsame Abnahme der Schmelzetemperatur beobachtet. Bei ca. 9.600 s kommt die Schmelze direkt mit den Kühlplatten in Kontakt. Zu diesem Zeitpunkt sind die gesamten Kühlkanäle bereits geflutet, um die

Kühlplatten vor hohen thermischen Belastungen und möglichen Spannungen zu schützen. Letztere sind in den durchgeführten Analysen aber nicht betrachtet worden. Danach beginnt die Schmelztemperatur aufgrund der Wärmeabfuhr über die gekühlten Boden- und Seitenplatten kontinuierlich abzusinken. Dies führt zu ansteigendem Feststoffanteil im Volumen der flüssigen Schmelze. Bei 78.000 s sinkt die Schmelztemperatur unter die Erstarrungstemperatur von 1.170 °C (1.443 K), was eine vollständige Verfestigung der Schmelze zur Folge hat.

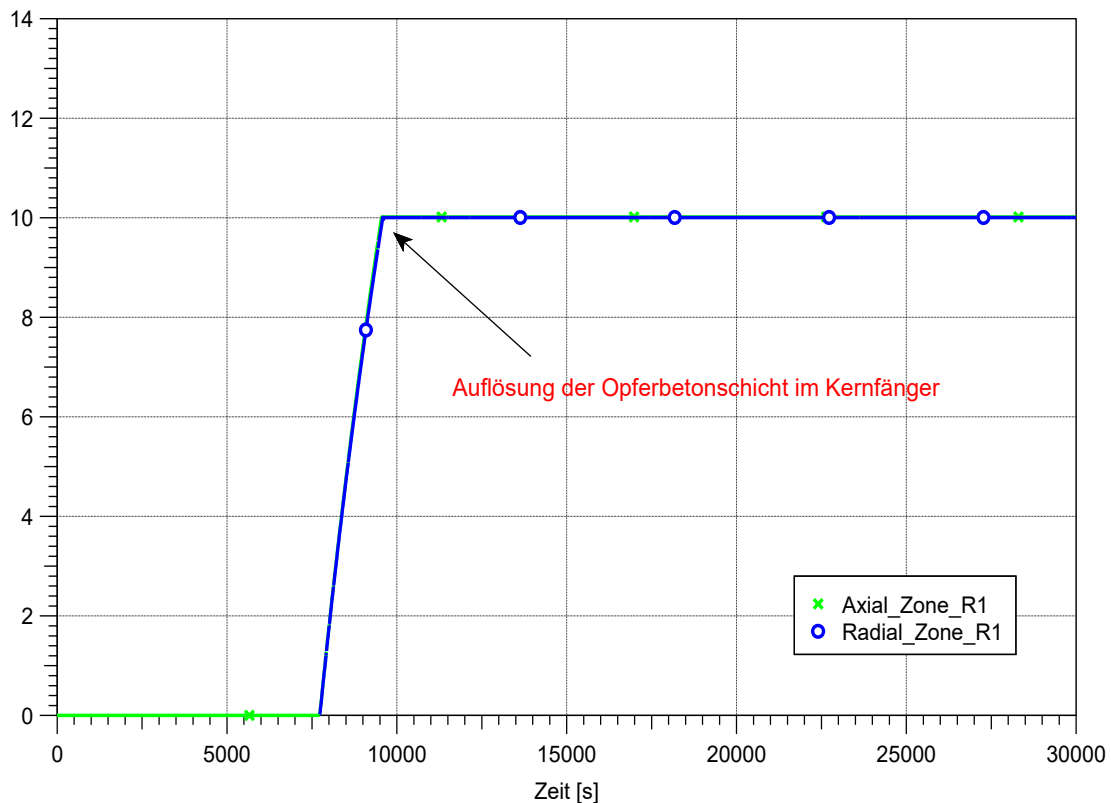


Abb. 2.106 COCOSYS, radiale und axiale Erosionstiefe im Ausbreitungsraum des Kernfängers

Mit Aufschmelzen des Opfermaterials nimmt die Kontaktfläche zwischen Kernschmelze und Boden- und Seitenstrukturen dann zu. Abb. 2.107 zeigt den zeitlichen Verlauf der Kontaktflächen zwischen Schmelze und Boden- und Seitenstrukturen. Bei ca. 12.100 s ist die Opferbetonschicht komplett aufgelöst und die Schmelze steht in vollständigem Kontakt mit den Kühlstrukturen des Kernfängers. Die berechnete Kontaktfläche zwischen Schmelze und Boden- und Seitenstrukturen beträgt zu diesem Zeitpunkt ca. 185 m² (s. Abb. 2.107). Danach steigen die Oberflächentemperaturen der Boden- und Seitenstrukturen des Kernfängers, da ein großer Teil der Wärme aus der Schmelze über die Boden- und Seitenplatte (Seitenstruktur) des Kernfängers ins Wasser im

Kühlkanal übertragen wird. Dies hat einen schnellen Anstieg des an das Wasser im Kühlkanal abgegebenen Wärmestroms zur Folge.

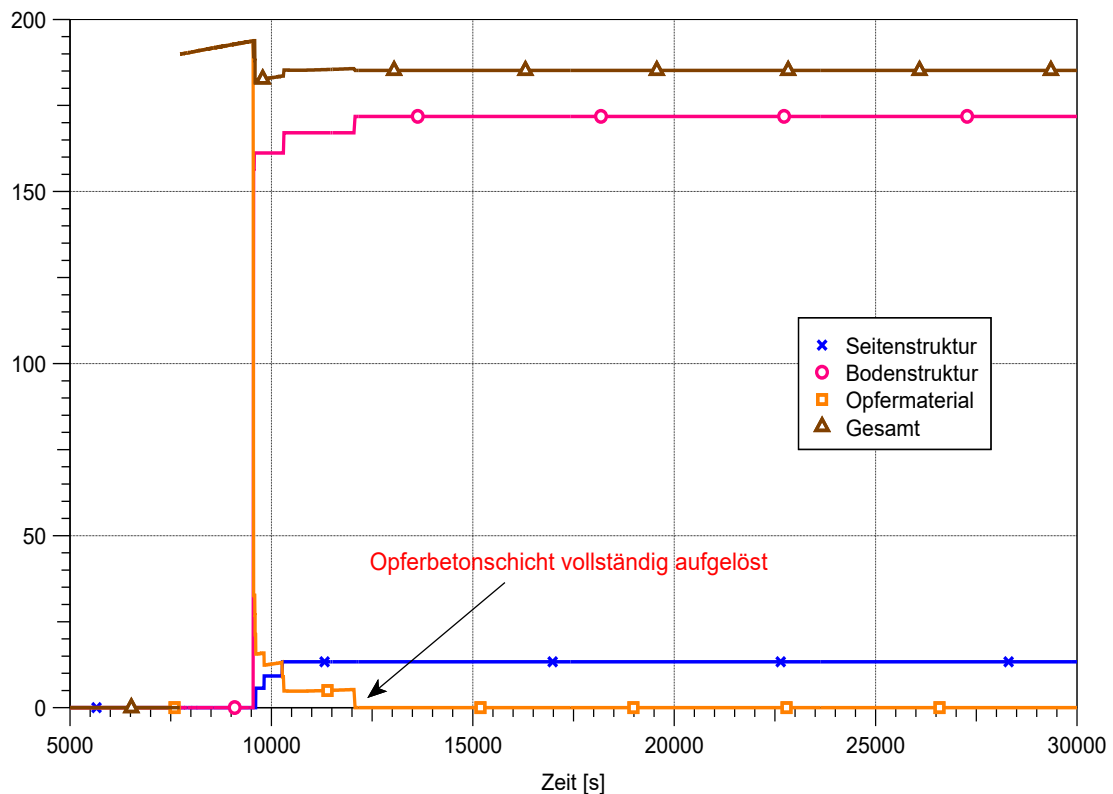


Abb. 2.107 COCOSYS, zeitlicher Verlauf der Kontaktflächen zwischen Schmelze und Boden- und Seitenstrukturen

Der Wärmeübergang entlang der Boden- und Seitenwände des Kernfängers erfolgt unter Siedebedingungen und es kommt folglich zu einer Zweiphasenströmung im Kühlkanal. Da im Kühlkanal Blasensieden auftreten kann, wird in diesem Rechenfall die neue in COCOSYS implementierte Rohsenow-Korrelation (vgl. 3.1.2.2, S. 193) angewendet. Das neue Wärmeübergangsmodell unter Anwendung der Rohsenow-Korrelation wird an den Außenflächen der Kühlstrukturen zusätzlich zum CO1-Wärmeübergangsmodell aktiviert.

Kurze Zeit, nachdem die Schmelze die Kühlstrukturen erreicht hat, steigt die Wassertemperatur im Kühlkanal des Kernfängers an (s. Abb. 2.108). Durch die Anwendung der ROH-Korrelation kommt es zu einem hohen anhaltenden Energieeintrag in das Wasser und damit zu einer entsprechenden Freisetzung von Dampf an der Wasseroberfläche in der Spalte der Seitenwand. Dadurch sammelt sich Wasserdampf im oberen Bereich des Kühlkanals oberhalb des Überlaufs an. Abb. 2.108 zeigt bei ca. 11.800 s einen etwas stärkeren Anstieg der Wassertemperatur im Kühlkanal, was auf die beginnende

„thermische Konvektion“ mit dem Ausbreitungsraum über den Wärmeaustausch durch den Überlauf zurückzuführen ist. In diesem Rechenfall erreicht die Wassertemperatur in der Spalte (Zone R1b) die Sättigungstemperatur bei 12.300 s.

Danach steigt aufgrund des anhaltenden Energieeintrags über die Kühlstrukturen und der fehlenden Verdampfung an der Wasseroberfläche die Wassertemperatur im Kühlkanal weiter an. Somit wird in diesem Rechenfall eine unrealistisch hohe Wassertemperatur berechnet, was schließlich zu überhitzten Zuständen in der Spalte der Seitenplatte führt (Abb. 2.108). Aus diesem Grund besteht hier noch Verbesserungsbedarf zur Berücksichtigung einer direkten Verdampfung an der Oberfläche heißer Strukturen in Wasser.

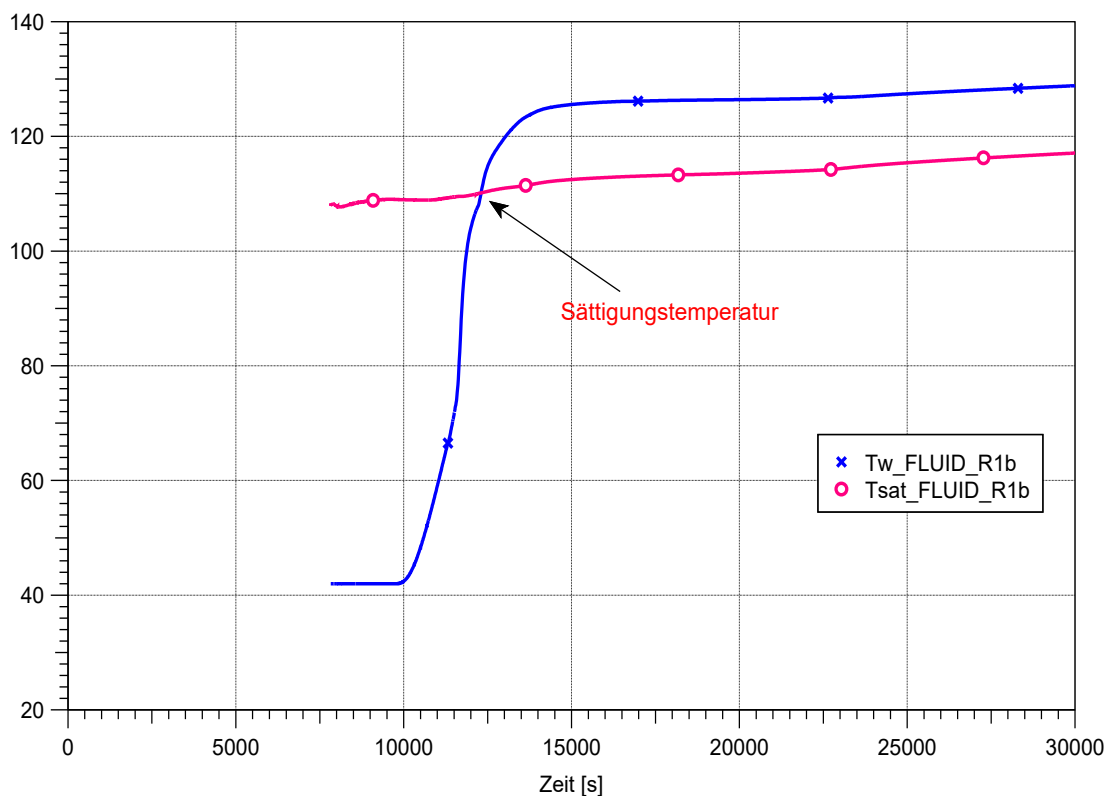


Abb. 2.108 COCOSYS, Wassertemperatur in der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b)

Wie bereits erwähnt, erreicht der Wasserstand im Ausbreitungsraum (R1) bei 11.500 s die untere Kante des Überlaufs, was eine Rückströmung in die Spalte der Seitenstruktur zur Folge hat. Der Wasserstand in der Spalte steigt dann entsprechend über die Höhe der unteren Kante des Überlaufs und die Gasphase wird aus dem oberen Bereich des Kühlkanals oberhalb des Überlaufs entfernt. So wird die Spalte bei ca. 12.800 s vollständig mit Wasser gefüllt (Abb. 2.109). Dadurch wird hier nur ein einphasiges Ausströmen

von Wasser durch die kombinierte Gas-Wasser-Verbindung (AF1a) berechnet. Mit dem Entfernen der Gasphase im Kühlkanal steht keine freie Wasseroberfläche mehr zur Verfügung und die Berechnung der Wechselwirkung zwischen Dampf und Wasser an der Oberfläche ist abgeschaltet. Dieser Rechenfall ist ohne Programmabbruch durchgelaufen. Wird der Ausbreitungsraum mit Wasser gefüllt, steigt auch der Wasserspiegel in der Reaktorgrube (Zone R2) an (s. Abb. 2.109, rote Kurve). Gleichzeitig sinkt der Füllstand im Flutbecken (Zone R4) allmählich ab (s. Abb. 2.109, dunkelgrüne Kurve). Nach einer gewissen Zeit gleichen sich die Wasserspiegel im Ausbreitungsraum sowie im Flutbecken (IRWST) an, da die beiden unten mit einer Rohrleitung verbunden sind.

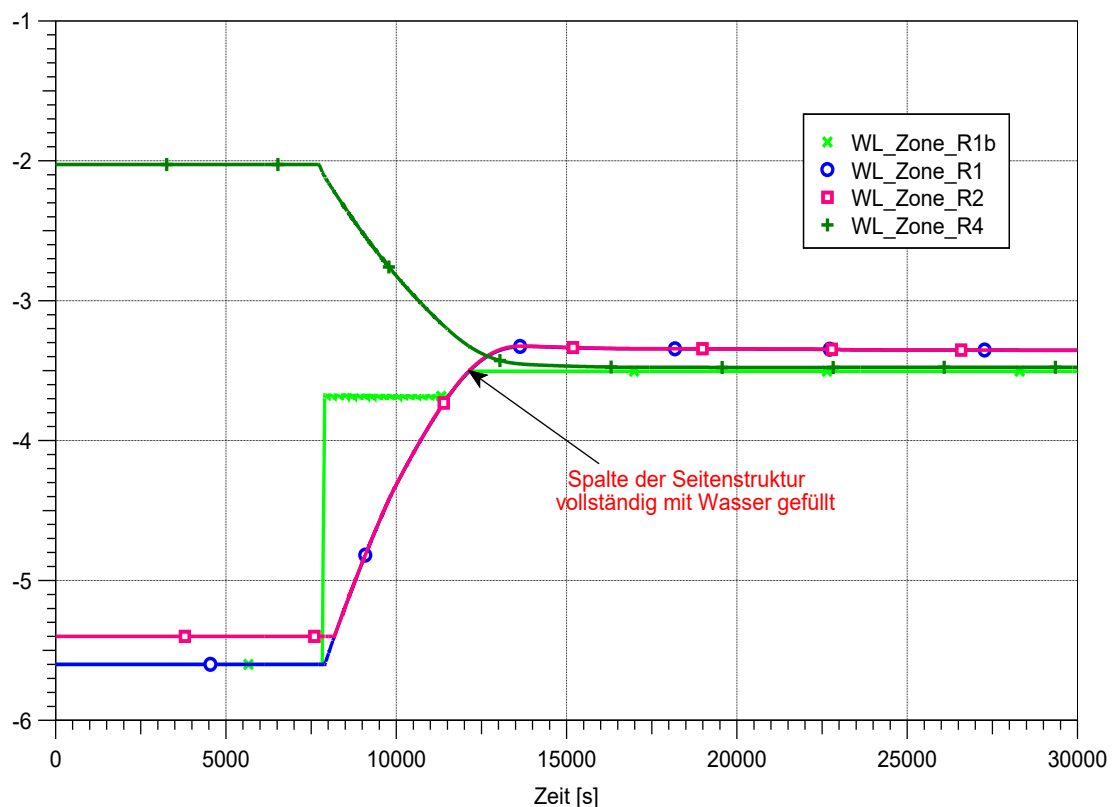


Abb. 2.109 COCOSYS, Wasserspiegel im Kühlkanal (R1b), Ausbreitungsraum (R1), in der Reaktorgrube (R2) und im Flutbecken (R4)

Sobald der Wasserstand im Ausbreitungsraum des Kernfängers (Zone R1) den Überlauf erreicht hat, nimmt der Massenstrom durch die Überlauföffnung ab, bis der hydrostatische Druck zwischen dem Ausbreitungsraum und dem IRWST ausgeglichen ist. Danach bleibt der Massenstrom bis zum Ende der Rechnung konstant (ca. 10 kg/s), Abb. 2.110.

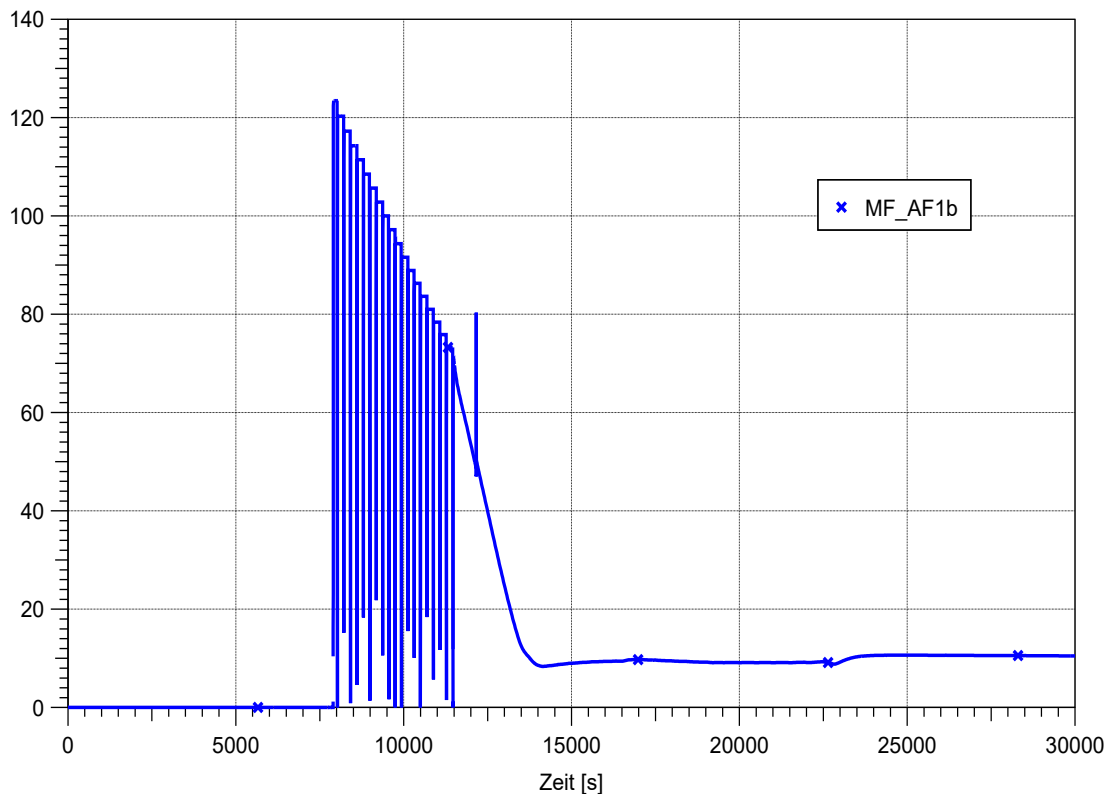


Abb. 2.110 COCOSYS, Massenstrom durch die Überlauföffnung (AF1a)

Nachdem die Schmelze mit Wasser in Kontakt kommt (bei ca. 8.000 s), beginnt das Wasser zu verdampfen. Damit steigt die Dampfkonzentration im Ausbreitungsraum (Zone R1), Abb. 2.111. Der Dampf strömt ins Containment (Zone R5), kondensiert dort und läuft über die Drainagen zurück in das Flutbecken (IRWST). In dem Fall wird die Nachzerfallswärme durch die Wasserverdampfung aus der Schmelze abgeführt. Das Wasser für die Kühlung des Kernfängers wird durch Naturumlauf umgewälzt.

Aufgrund der Wärmeabfuhr durch Verdampfung steigt der Druck im Containment. In diesem Fall muss das Sprühen des CHRS innerhalb von 12 h manuell auf der Warte aktiviert werden, um den Druckanstieg zu begrenzen.

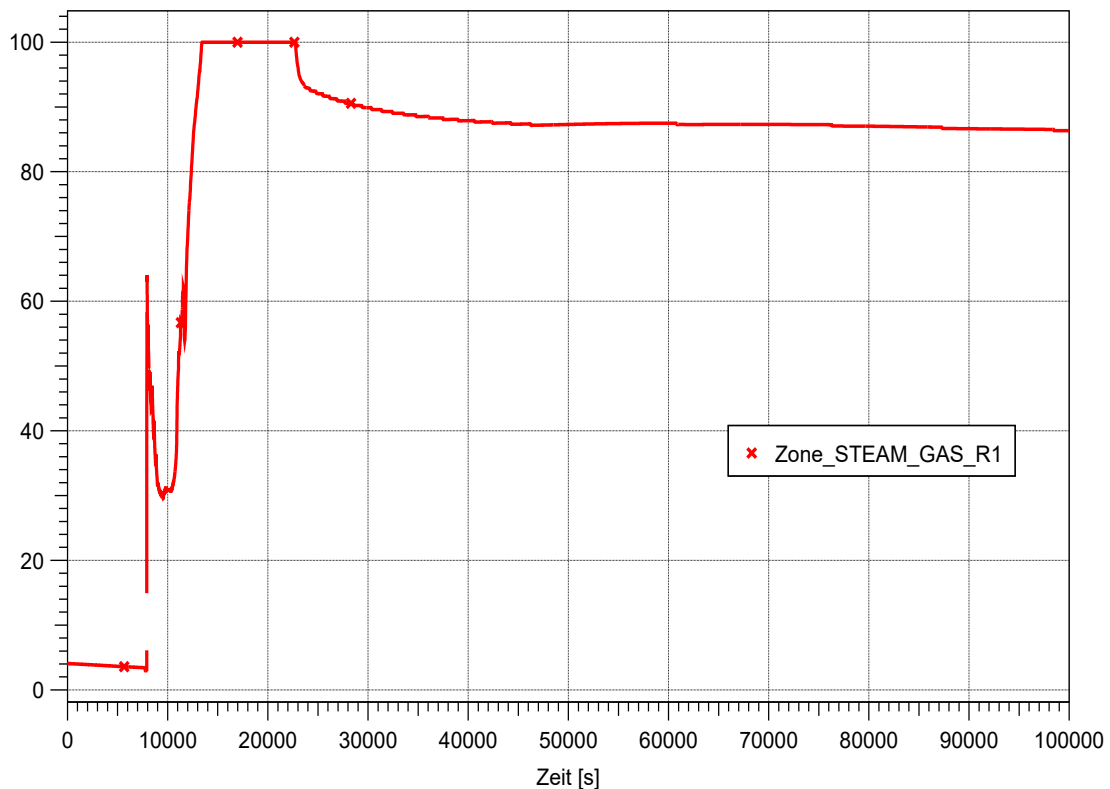


Abb. 2.111 COCOSYS, Dampfkonzentration im Ausbreitungsraum (Zone R1)

2.4 OECD/NEA PRISME zu Kabelbrandexperimenten

Brandsimulationsrechnungen und rechnerische Nachweisverfahren haben vor allem im Zusammenhang mit der Überprüfung der Brandsicherheit in Betrieb befindlicher Kernkraftwerke eine zunehmende Bedeutung erlangt. Damit Brandsimulationen und rechnerische Nachweisverfahren einen zusätzlichen Nutzen für Gutachter und Behörden darstellen, müssen deren Leistungsfähigkeit sowie die Anwendungsgrenzen der verwendeten Simulationscodes bekannt sein.

2.4.1 Durchführung einer blinden COCOSYS-Vorausrechnung für ein Kabelbrandexperiment (FIRE/PRISME-Benchmark Step#2)

COCOSYS Brandmodell

Das in COCOSYS enthaltene sogenannte ‚einfache‘ Kabelbrandmodell wurde anhand mehrerer Experimente aus dem PRISME-Projekt validiert. Eine der Zielsetzungen des internationalen Projekts PRISME (französisch: **P**ropagation d’un incendie pour des **s**cenarios **m**ulti-locaux **é**lémentaires) der OECD Nuclear Energy Agency (NEA) besteht in

der Untersuchung der Auswirkungen unterventilierter Randbedingungen auf einen Kabelbrand sowie der Ausbreitung von Wärme und Rauch in einer Mehrraumanordnung. Dazu wurden vorab entsprechende Kabelbrandexperimente unter offenen Randbedingungen in der Versuchsanlage SATURNE von IRSN (Institut de Radioprotection et de **Sûreté Nucléaire**) in Cadarache (Frankreich) durchgeführt.

Um die bisher festgestellten generellen Defizite des in COCOSYS enthaltenen Kabelbrandmodells zu überwinden, wurde in einem ersten Schritt das Modell auf Basis des FLASH-CAT-Modells (**F**lame **S**pread over **H**orizontal **C**able **T**rays, /MCG 12/) erweitert. Das Modell verwendet semiempirische Ansätze der seitlichen und vertikalen Flammenausbreitung sowie Messwerte der brennbaren Masse, der Verbrennungswärme, der Wärmefreisetzungsrate pro Flächeneinheit und der Verkohlungsrate. Diese Erweiterung wurde erfolgreich an mehreren Versuchen des OECD/NEA-Projektes PRISME überprüft. Diese Versuche verwenden verschiedene Kabelmaterialien und unterscheiden sich in den Ventilationsrandbedingungen. Ziel ist es, für die jeweiligen Versuche mit gleichem Kabelmaterial die gleichen Eingabedaten zu verwenden.

Im Gegensatz zu Experimenten unter kontrollierten Bedingungen findet ein echtes Brandereignis nicht unter Laborbedingungen statt, so dass aufgrund von unbekannten oder deutlich komplexeren Randbedingungen die vorhandenen Unsicherheiten von Brandsimulationsrechnungen deutlich höher sind als bei Nachrechnungen von Experimenten. Die Bewertung der Qualität solcher numerischer Ergebnisse ist daher eine große Herausforderung. In dem durchgeführten gemeinsamen Benchmark der OECD/NEA-Gruppen FIRE und PRISME wurde daher eine dreistufige Methodik umgesetzt. Im ersten Schritt des Benchmarks wurde eine offene Nachrechnung des Kabelbrandversuchs PRS2-CFS-2 durchgeführt („Kalibrierungsphase“). Der zweite Schritt des Benchmarks wurde im Projektverlauf in zwei Teile gespalten. Im Schritt 2.1 wurde eine blinde Rechnung zum Kabelbrandexperiment PRS3-CFP-D1 durchgeführt, um durch einen Vergleich der festgestellten Bandbreiten (Unsicherheiten) der erzielten Ergebnisse im Schritt 1 und 2.1 den Einfluss von blinden Rechnungen im Vergleich zu offenen Rechnungen festzustellen. Im Schritt 2.2 wurde das Experiment PRS3-BCM-S2 nachgerechnet. Dieses Experiment ist an den ausgewählten Realbrand aus der OECD/NEA-FIRE-Datenbank angelehnt. Im letzten dritten Schritt wurde ein Code-zu-Code-Vergleich anhand des Realbrandes durchgeführt. Die Schritte 2.1, 2.2 und 3 wurden im Rahmen dieses Vorhabens RS1579 bearbeitet.

Allgemein ist es schwierig, die Abbrandrate (engl. Mass Loss Rate, MLR) für komplexe Kabelbrandszenarien zu bestimmen oder gar zu berechnen. Daher wurde in COCOSYS das Konzept des sogenannten „einfachen“ Kabelbrandmodells implementiert, um zumindest teilweise eine Rückkopplung der Abbrandrate aufgrund der thermohydraulischen Randbedingungen zu berücksichtigen. Jede Kabeltrasse wird entsprechend der vorhandenen Nodalisierung segmentweise abgebildet. Um eine in den Experimenten beobachtete Zunahme der Wärmefreisetzungsrate (HRR, Heat Release Rate) simulieren zu können, verwendet das neue Modell zwei verschiedene Kabelmaterialien. Hierbei können auch unterschiedliche chemische Zusammensetzungen der Materialien berücksichtigt werden. Das erweiterte Modell auf Basis des FLASH-CAT-Ansatzes /MCG 12/ geht von einem spezifischen zeitabhängigen MLR-Profil $r_k(t)$ [1/s] für jedes Material k aus. /KLE 21a/.

Die Propagation der Flammen entlang der Trasse kann asymmetrisch sein und startet zwischen $(x_{l,0} ; x_{r,0})$. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit kann für unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen (horizontal, aufwärts, abwärts) unterschiedlich sein. Die resultierende Gleichung für die Abbrandrate $R_i(t)$ für die Trasse i lautet:

$$R_i(t) = b f(c_{O_2}) \sum_k D_k \int_0^l r_k(t' - t_{ign,i}(x)) dx \quad (2.7)$$

mit den vorgegebenen MLR-Profilen $r_k(t)$ [1/s]. Die Integrale der MLR-Profile sind auf eins normiert, so dass $\int r_k dt = 1$ gilt. Weitere Variablen sind die Breite b und Länge l der Kabeltrasse (bzw. Kabeltrassensegment), die Dichte des Kabelmaterials D_k [kg/m²] ohne die verbleibende Restmasse. Der Zündzeitpunkt an der Position x berücksichtigt die unterschiedlichen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten v_+ und v_- .

$$t_{ign,i} = t_{ign,i,0} + \begin{cases} \frac{x_{l,0} - x}{v_-} & x < x_{l,0} \\ 0 & x_{l,0} \leq x \leq x_{r,0} \\ \frac{x - x_{r,0}}{v_+} & x > x_{r,0} \end{cases} \quad (2.8)$$

Um die Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration c_{O_2} zu berücksichtigen, wird angenommen, dass die reduzierte Sauerstoffmenge den Brandablauf verlangsamt und zu einer verzögerten Zeit t' führt.

$$t' = \int_0^t f(c_{O_2}) dt \quad (2.9)$$

Diese Zeit t' wird als Argument für r_k in Gl. (2.9) verwendet.

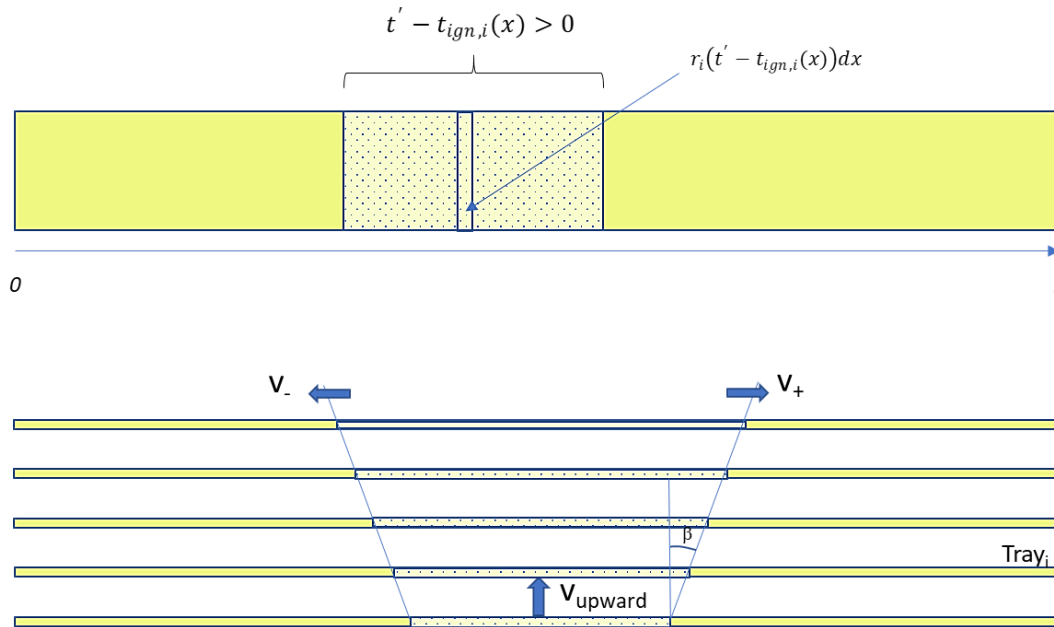


Abb. 2.112 Konzept des erweiterten vereinfachten Kabelbrandmodells in COCOSYS

Zusammengefasst muss der Anwender folgende Daten bereitstellen:

- Geometrie der Kabeltrasse (Breite b , Länge l).
- Dichte des brennbaren Kabelmaterials D_0 [kg/m^3], Anteil des verbleibenden Kabelmaterials f_{rest} .
- Zeitabhängige Abbrandprofile $r_k(t)$ für jedes Material k .
- Sauerstofffaktor $f(c_{O_2})$.
- Anfangsbedingungen $t_{\text{ign},i,0}$, $x_{l,0}$ und $x_{r,0}$.
- Horizontale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit $v_{\text{horizontal}}$.
- Vertikale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit v_{upward} , v_{down} und Winkel β .

Um das ergänzte Kabelbrandmodell zu qualifizieren, wurde das Modell an mehreren Experimenten der OECD/NEA-Reihe PRISME-2 und -3 mit unterschiedlichen Kabeltypen und -materialien validiert. Die Kabelmaterialien sind:

- FRNC (fire retardant non-corrosive) Kabel, welche von GDF-SUEZ (Belgien) zur Verfügung gestellt und in den Experimenten PRS2-CFSS-2 (Support Test), PRS2-CFS-3 und -4 sowie PRS3-CFP-D1 (Benchmark Schritt 2.1) verwendet wurden.
- PVC-Steuerkabel, welche von JNES (Japan) zur Verfügung gestellt und in den Experimenten PRS2-CFSS-4 (Support Test), PRS2-CFS-2 (Benchmark Schritt 1) verwendet wurden,⁵
- PE/PVC (Polyethylen/Polyvinylchlorid) Kabel, welche von U. S. NRC zur Verfügung gestellt und im PRF-BCM-S2 Experiment (Benchmark Schritt 2.2), als Vorbereitung für den Benchmark zum Realbrand, verwendet wurden.

Relevante COCOSYS-Eingabedaten zu den verwendeten Kabeln sind in Tab. 2.11 dargestellt.

Tab. 2.11 COCOSYS-Eingabedaten zu den verschiedenen Kabelmaterialien

Parameter	FRNC	PVC	PE/PVC
Experimente (Ventilationsrate)	CFSS-2 (offen) CFS-3 (4 h ⁻¹) CFS-4 (15 h ⁻¹) CFP-D1 (15 h ⁻¹)	CFSS-4 (offen) CFS-2 (15 h ⁻¹)	BCM-S2 (offen)
Anzahl der Trassen	5	5	2
Trassengröße	2,4 m x 0,45 m	2,4 m x 0,45 m	2,4 m x 0,9 m
N _{Kabel} / Trasse	32	44	112
Parameter	FRNC	PVC	PE/PVC
Materialdaten			
Material	FRNC (GDF SUEZ)	PVC (JNES)	PVC (U.S. NRC)
Name	NU-SHX(ST)HX	SHCVV	PE/PVC Kabel #900
Typ / Größe	12 x 1,5 mm ²	8 x 2 mm ²	7 Leiter, 15,9 mm Ø
Massendichte [kg/m ³]	28,33	16,90	20,43

⁵ Rechnungen zu PRS2-CFSS-4 und PRS2-CFS-2 wurden zusätzlich durchgeführt, um die Ergebnisse mit den PE/PVC-Kabeln einordnen zu können.

Parameter	FRNC	PVC	PE/PVC
Verbleibender Restanteil	CFSS-2: 0,43 CFS-3: 0,46 CFS-4: 0,36 CFP-D1: 0,277	CFSS-4: 0,19 CFS-2: 0,19	BCM-S2: 0,16
Zeitverzögerung der Entzündung [s]			500
Anteil 1			
Formel	PVAC ⁶	80 % PVC + 20 % PHTH ⁷	42 % PVC + 58 % PE
Massenanteil	0,62	0,90	0,74
C	4,000	2,592	2,000
H	6,000	3,518	3,754
O	2,000	0,296	0,000
Cl	0,000	0,926	0,246
HOC ⁸ (MJ/kg)	24	18	18
Anteil 2			
Formel	PVAC	30 % PVC + 70 % PHTH	PE
Massenanteil	0,38	0,10	0,26
C	4,000	5,417	2,000
H	6,000	5,990	4,000
O	2,000	1,709	0,000
Cl	0,000	0,573	0,000
HOC [MJ/kg]	38	25	45
Propagation			
Horizontale Propagationsgeschwindigkeit [m/s]	0,008	0,008	0,012
Vertikale Propagationsgeschwindigkeit [m/s]	0,003	0,011	0,020
Propagationswinkel [°]	35	35	20

Für die verschiedenen Kabelmaterialien wurden zusätzlich die MLR-Profile $r_k(t)$ auf Basis der offenen Experimente jeweils für die beiden Materialanteile erstellt. Die Profile der ersten Komponente sind in Abb. 2.113 in durchgezogenen Kurven dargestellt, die der

⁶ PVAC: Polyvinylacetat

⁷ PHTH: Phthalat

⁸ HOC: Verbrennungswärme

zweiten Komponente gestrichelt. Wie zu erwarten, liegen die Kurven von PE/PVC nahe an denen für PVC, allerdings ist der Peak für die erste Komponente nicht so hoch.

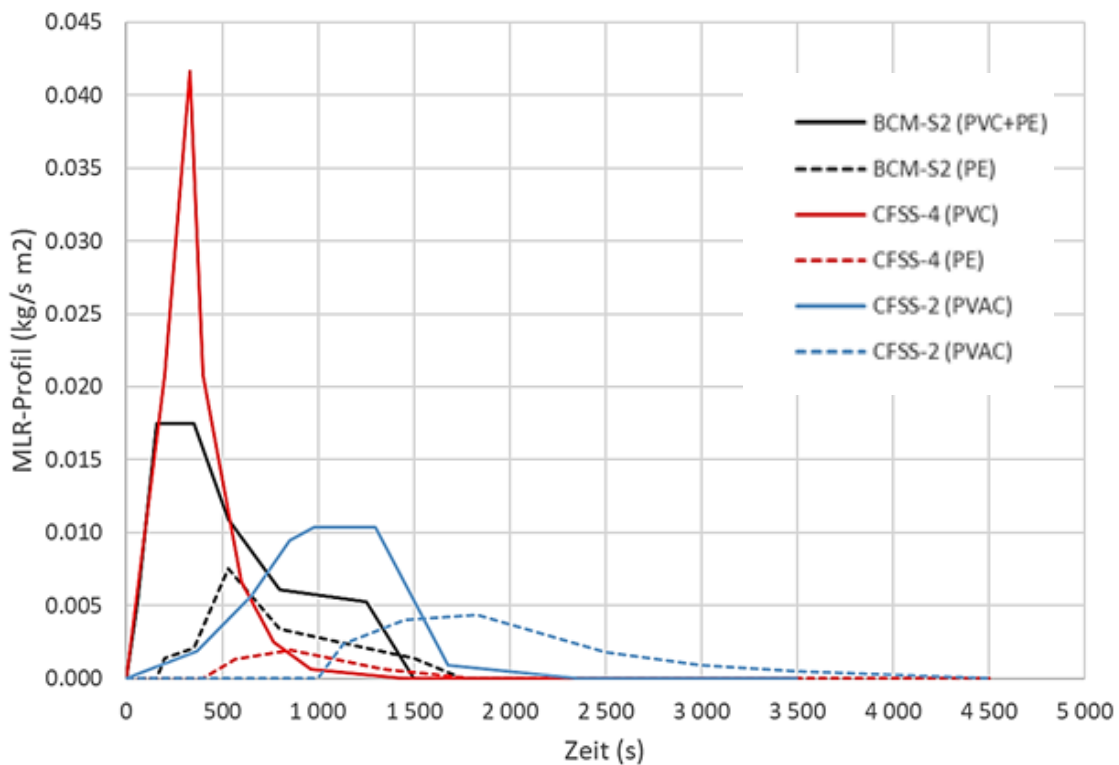


Abb. 2.113 Vergleich der MLR-Profile (PVC: rot, PE/PVC: schwarz, FRNC: blau)

Die Sauerstoffabhängigkeit $f(\text{CO}_2)$ muss durch eine Tabelle beschrieben werden. Die verwendeten Werte sind in Abb. 2.114 dargestellt. Der COCOSYS-Anwender sollte allerdings berücksichtigen, dass dieser Wert schwierig zu bestimmen ist. So sind die MLRs im Experiment PRS2-CFS-3 und -4 sehr verschieden, obwohl die Sauerstoffkonzentration im Brandraum relativ gleich ist. Zusätzlich hat der gewählte „Messpunkt“ zur Bestimmung von CO_2 einen Einfluss auf die Ergebnisse.

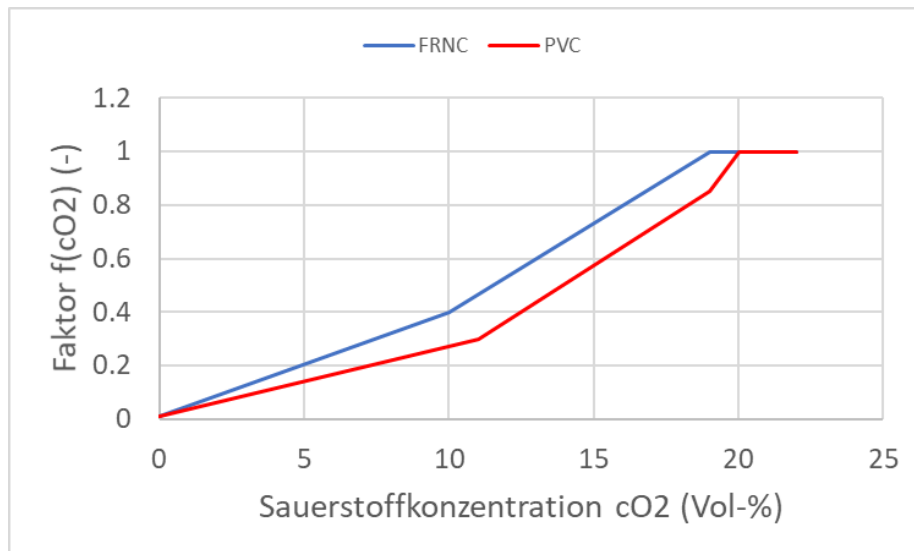


Abb. 2.114 Sauerstoffabhängigkeit $f(c_{O_2})$ für FRNC und PVC-Kabel

2.4.1.1 Experimente PRS2-CFSS-2, PRS2-CFSS-4 und PRF-BCM-S2 in der SATURNE-Anlage

Um den Einfluss der Sauerstoffkonzentration in einem Raumbrand zu untersuchen, wurden entsprechende Experimente in der SATURNE-Anlage unter offenen Randbedingungen durchgeführt. Die SATURNE-Anlage hat ein Volumen von 2.000 m³ und enthält einen großskaligen Sauerstoffverbrauchskalorimeter (Abb. 2.115). Abb. 2.116 zeigt die verwendete COCOSYS-Nodalisierung. Die Kabeltrassen sind grau dargestellt. Sogenannte Plumezonen befinden sich vor den Trassen. In den Rechnungen wird jeweils die gemessene Volumenstromrate verwendet. In Abb. 2.117 ist beispielhaft die des Experiments PRS2-CFSS-4 dargestellt. In den CFSS-Experimenten werden 5 Trassen mit einer Länge von 2,4 m und einer Breite von jeweils 0,45 m verwendet. Im PRF-BCM-S2 Experiment werden 2 Trassen mit einer Breite von jeweils 0,9 m verwendet. Dieser Versuch orientiert sich an dem Realbrand und verwendet zwei Bunsenbrenner zum Entzünden der Kabel. Dies führte zu einem verzögerten Beginn des Kabelbrandes. Dieser Effekt kann nicht mit dem COCOSYS-Modell betrachtet werden. Hier wurde die Zeitverzögerung von 500 s direkt per Eingabe vorgegeben.

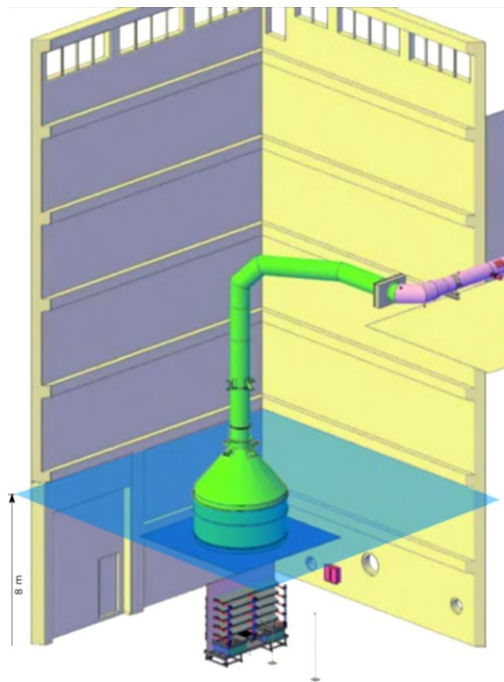


Abb. 2.115 Aufbau der SATURNE-Anlage. Die eingezeichnete Ebene bei 8 m ist die obere Grenze der COCOSYS-Nodalisierung /ZAV 13/

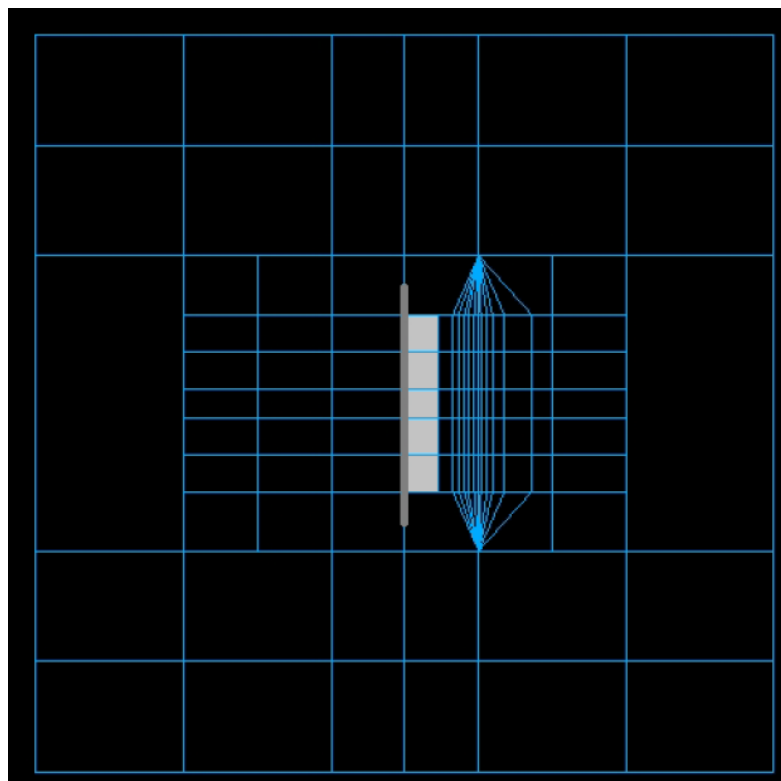


Abb. 2.116 Nodalisierung des Brandraums der SATURNE-Anlage (Aufsicht)

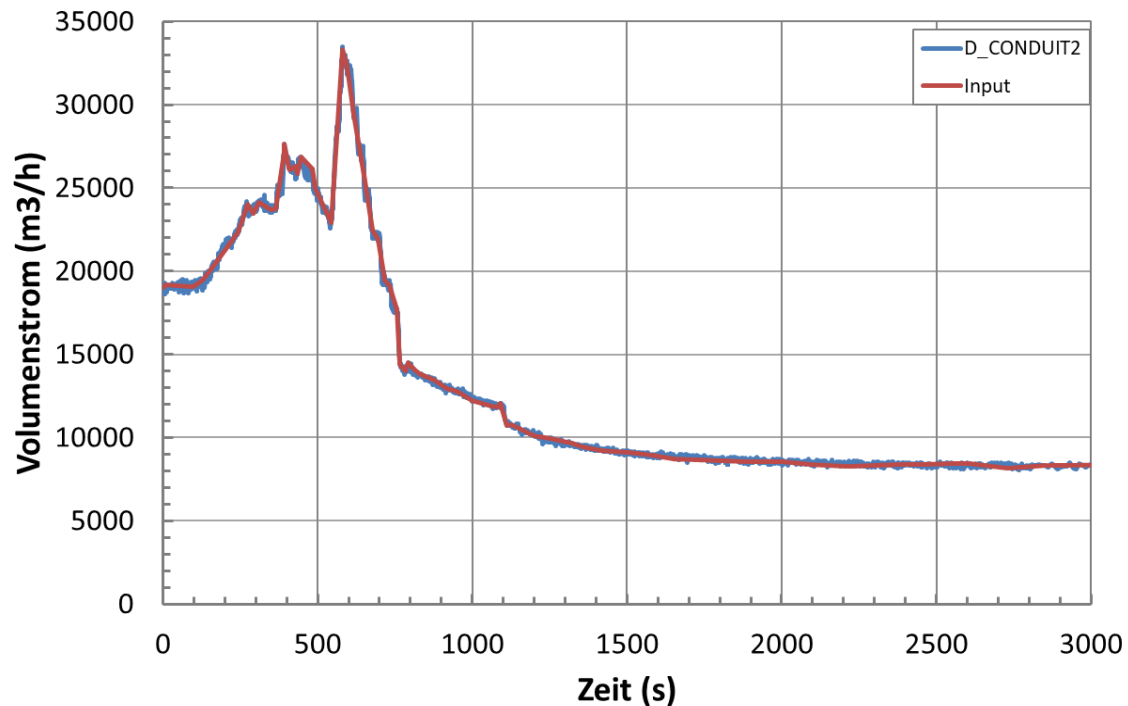


Abb. 2.117 Gemessene Volumenstromrate im Experiment PRS2-CFSS-4

Im Folgenden werden die Ergebnisse zur Abbrandrate und Wärmefreisetzungsrate dargestellt. Weitere Ergebnisse sind in /KLE 21a/ und /KLE 21b/ dargestellt.

Die Abb. 2.118 stellt den Vergleich der gesamten MLR und HRR für die drei Experimente dar. Für alle drei Kabeltypen werden gute Ergebnisse erzielt. Dies ist nicht überraschend, da die MLR-Profile an diesen Experimenten justiert wurden. Wie in /KLE 21a/ dargestellt, sind allerdings die Ergebnisse in der späteren Phase aufgrund des erweiterten Modells deutlich besser. Die gemessene Flammenpropagation im Versuch PRF-BCM-S2 ist für die beiden Trassen sehr unterschiedlich. Dieses kann in dem Modell nicht berücksichtigt werden.

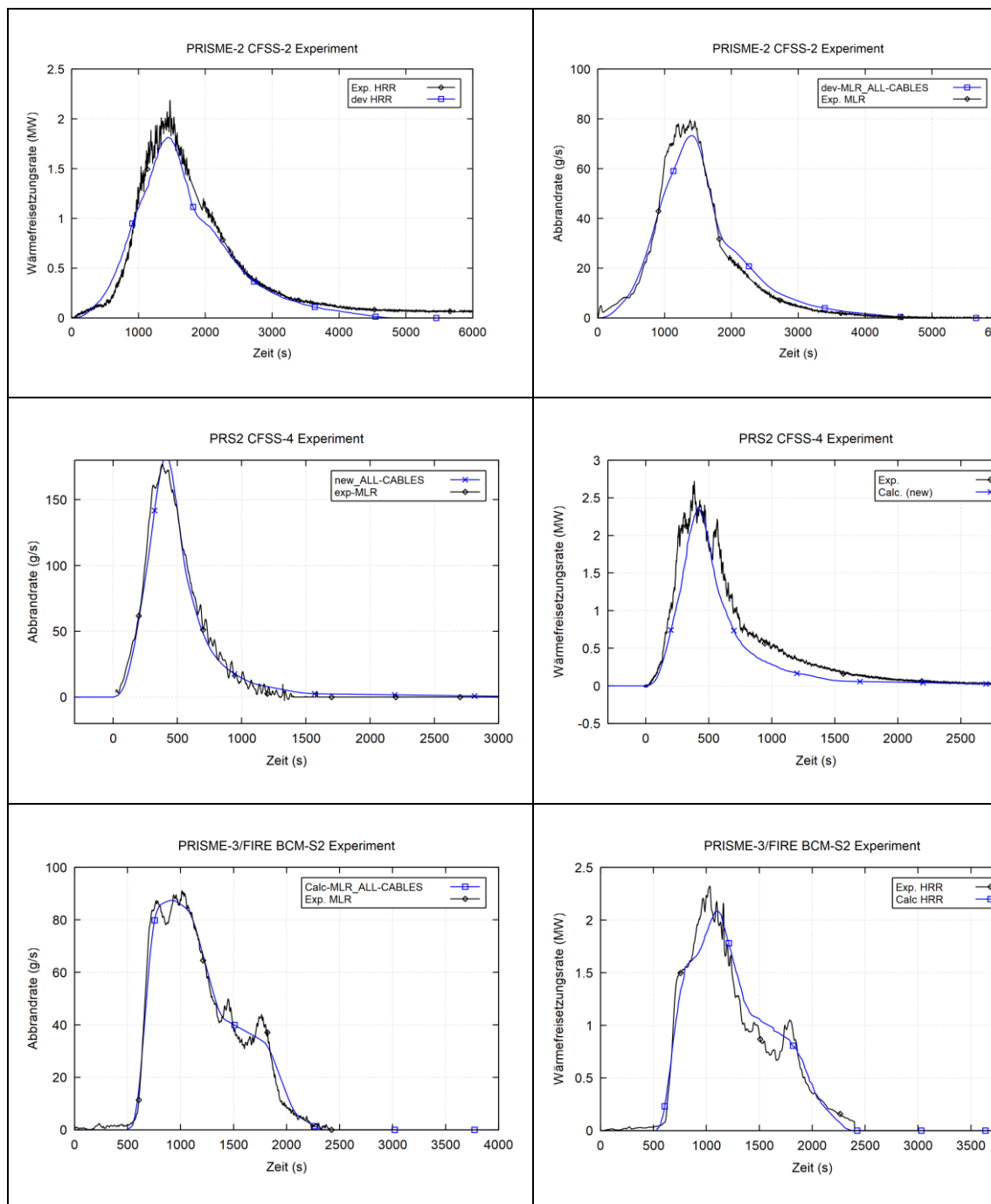


Abb. 2.118 Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für den PRS2-CFSS-2, -4 und PRF-BCM-S2 Test

2.4.1.2 Experimente PRS2-CFS-4, PRS3-CFD-D1 und PRS2-CFS-2 in der DIVA-Anlage

Die Projekte PRISME-2 und -3 konzentrierten sich auf Brandszenarien, die in KKW's von Interesse sind, insbesondere im Hinblick auf möglichst realistische Brandquellen wie Kabelbrände. Das Hauptziel der PRS2-CFS-Tests war es, die Brandausbreitung über fünf

horizontale Kabeltrassen in einem geschlossenen Raumbereich zu untersuchen. Die Brandversuche PRS2-CFS-2 und PRS2-CFS-4 wurden in der DIVA-Anlage des IRSN in Cadarache durchgeführt. Die beiden genutzten Räume L1 und L2 waren durch einen offenen Türdurchgang verbunden und wurden über ein Lüftungssystem belüftet (Abb. 2.119). Der Einlass des Ventilatorsystems befand sich im Brandraum L1 und der Auslass im angrenzenden Raum L2 (jeweils in grün eingezeichnet). Die Luftwechselzahl betrug bei diesen Tests 15 h^{-1} ($3600 \text{ m}^3/\text{h}$). Im Vergleich zu PRS2-CFS-4 wurde beim PRS3-CFP-D1-Test nur die Lüftungsrichtung geändert.

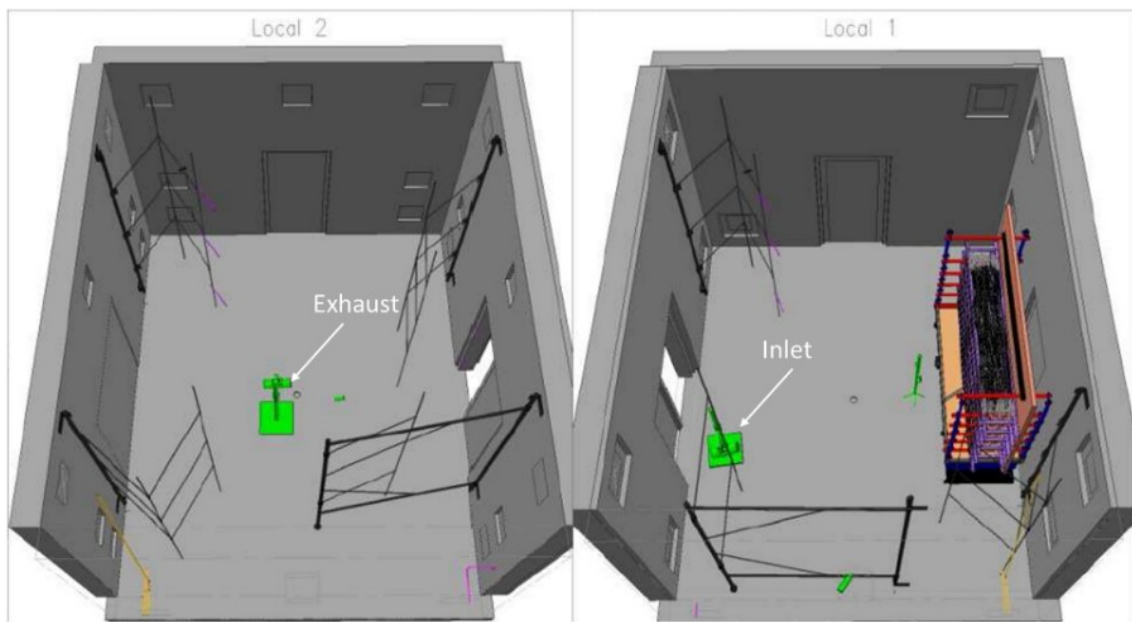


Abb. 2.119 Draufsicht auf die verwendeten Räume in der DIVA-Anlage für die PRS2-CFS-Tests /ZAV 15/

In Abb. 2.120 ist die Nodalisierung der für die PRS2-CFS-Versuche verwendeten Räume in der DIVA-Anlage dargestellt. Die Kabeltrassen sind grau dargestellt. An der Vorderseite der Kabeltrassen wurden sogenannte Plumezonen verwendet, um eine realistische Aufwärtsströmung der heißen Gase zu simulieren. Die dünne Wand, welche im Experiment auf der Rückseite der Trassen angebracht ist, wird berücksichtigt. Über der Tür in Richtung L2 werden ebenfalls Plumezonen verwendet. Das Lüftungssystem wird durch Zonen und Abzweigungen dargestellt. Die Verlustkoeffizienten wurden an die vorgegebenen Anfangsbedingungen angepasst.

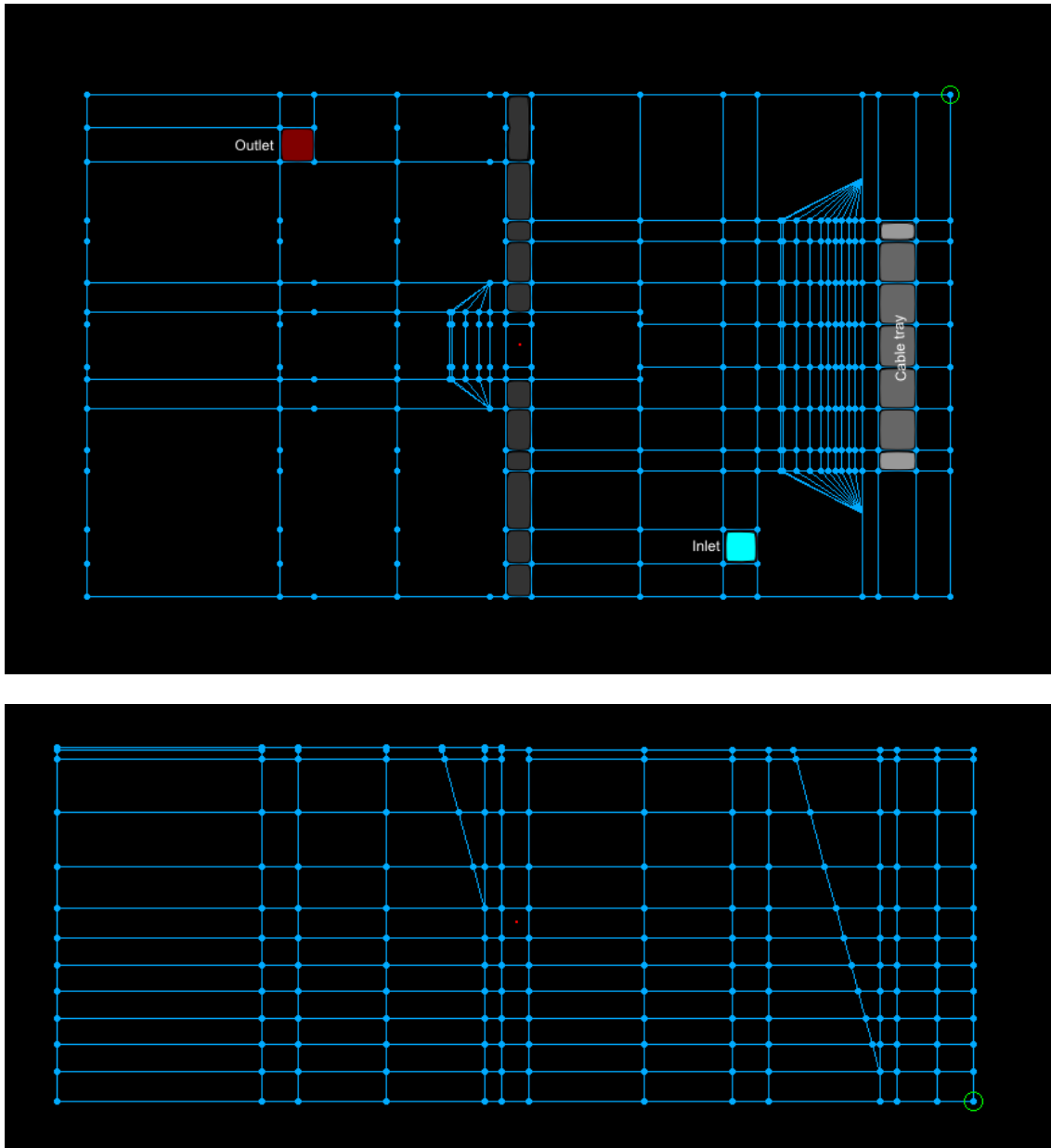


Abb. 2.120 Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Aufsicht: oben, Seitenansicht: unten)

Der Vergleich zwischen der berechneten und der gemessenen MLR für diese Versuche ist auf der linken Seite von Abb. 2.121 dargestellt. Zusätzlich ist die gemessene MLR der entsprechenden Versuche unter offenen Randbedingungen hinzugefügt (graue Kurve), um die Auswirkungen der eingeschränkten Sauerstoffzufuhr zu sehen. Mit Ausnahme des Restmassenanteils wurden alle Eingabedaten aus der Simulation unter offenen Bedingungen übernommen.

Die berechneten Wärmefreisetzungsraten sind auf der rechten Seite von Abb. 2.121 dargestellt. Die Qualität der Ergebnisse ist gut. Die spätere Phase wird im Vergleich zum vorherigen Modell viel besser vorhergesagt, was auf die Verwendung von zwei separaten Werten für die Verbrennungswärme zurückzuführen ist /KLE 21a/. Allerdings wird die maximale HRR im PRS2-CFS-4-Test etwas unterschätzt. Die Deflagrationen, die in PRS2-CFS-2 (Abbildung unten rechts) auftreten, werden in der COCOSYS-Rechnung nicht simuliert.

Die entgegengesetzte Lüftungsrichtung in PRS3-CFP-D1 führt im Vergleich zum entsprechenden PR2-CFS-4-Test zu höheren Abbrandraten. Für diesen Test (mittlere Reihe der Abbildungen) sind die blinden⁹ COCOSYS-Ergebnisse als rote Kurven dargestellt. Nach Auswahl einer anderen Zone als „Messpunkt“ für die Sauerstoffkonzentration, die in $f(\text{CO}_2)$ des Kabelbrandmodells verwendet wird, liefert die offene COCOSYS-Berechnung deutlich bessere MLR- und HRR-Ergebnisse im Vergleich zur blinden Rechnung ohne Änderung anderer Eingabeparameter /KLE 21a/. Die MLR in diesem Test kommt derjenigen des entsprechenden offenen Brandes recht nahe. Der Frischluftstrom durch den offenen Türdurchgang sorgt für eine erhebliche Frischluftzufuhr im unteren Teil des Brandraumes. Bei dem entsprechenden PRS2-CFS-4-Test (obere Reihe) muss die Frischluft durch die heiße Rauchschrift strömen.

Weitere Ergebnisse sind in /KLE 21a/ und /KLE 21b/ ausführlich dokumentiert.

⁹ Die blinden Rechnungen zu PRS3-CFP-D1 wurden in diesem Vorhaben RS1579 durchgeführt, die offenen Rechnungen im Vorhaben 4717R01550.

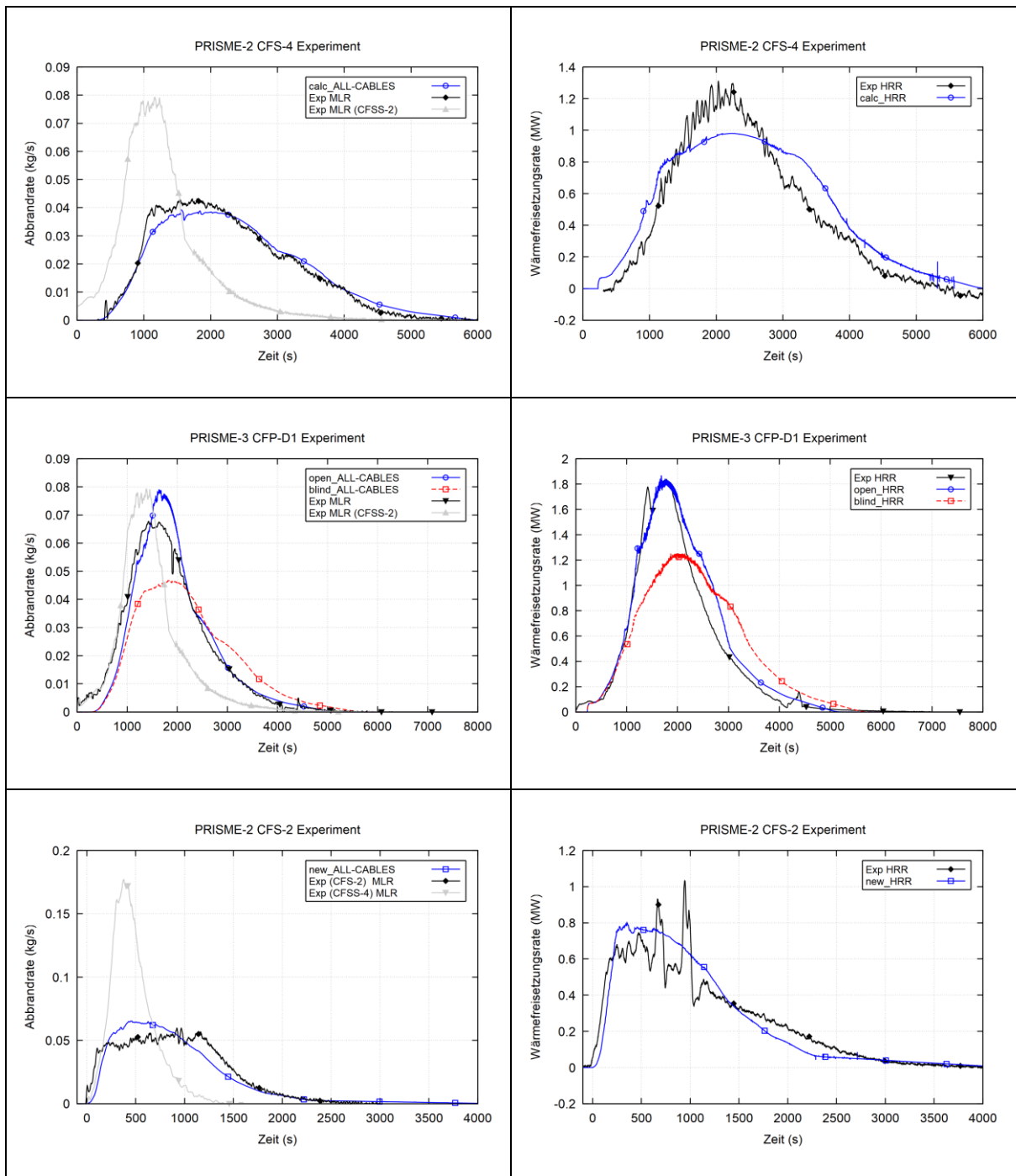


Abb. 2.121 Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für die Tests PRS2-CFS-4, PRS3-CFP-D1 und PRS2-CFS-2

COCOSYS-Ergebnisse für das Experiment PRS2-CFS-3

Das Experiment PRS2-CFS-3 entspricht dem Experiment PRS2-CFS-4, hat aber eine geringere Luftwechselrate von 4 h^{-1} (PRS2-CFS-4: 15 h^{-1}). Abb. 2.122 zeigt den Vergleich der gesamten Abbrandrate. Die Ergebnisse des neuen Modells zeigen zwar einen zu langsamen Anstieg, aber ein viel besseres Verhalten in der späten Phase /KLE 21a/. Die im Versuch beobachteten Schwingungen konnten durch dieses Kabelbrandmodell nicht reproduziert werden. Im linken Teil der Abb. 2.122 wurde die MLR des Brandversuchs PRS2-CFSS-2 unter offenen Atmosphärenbedingungen hinzugefügt (graue Kurve), um die Wirkung des Einschlusses zu untersuchen. In dem Versuch sind die äußeren Abschnitte der beiden untersten Trassen nicht verbrannt. Daher werden in der COCOSYS-Eingabe diese Segmente nicht berücksichtigt, weil im einfachen Kabelbrandmodell Kabeltrassen über die gesamte Länge abbrennen.

Die berechneten Wärmestromraten werden auf der rechten Seite der Abbildung verglichen. In der Simulation tritt der Anstieg der Wärmestromrate etwas zu früh ein. Wie bei den MLR werden die starken Schwingungen nicht simuliert. Die berechneten Wärmestromraten sind etwas höher als die gemessenen Werte. Aufgrund der höheren durchschnittlichen Wärmestromrate werden höhere Gastemperaturen erwartet. Weitere Ergebnisse werden in /KLE 21a/ dargestellt.

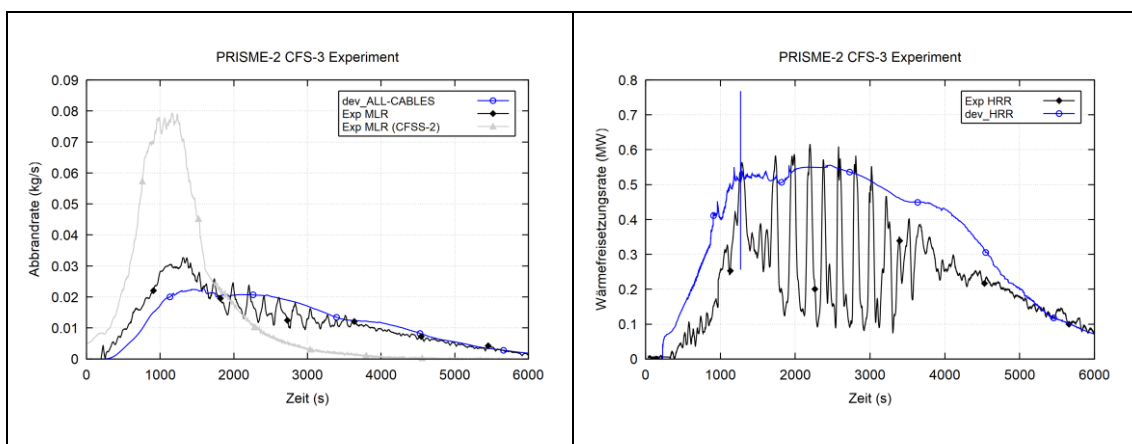


Abb. 2.122 Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für den PRS2-CFS-3 Test

2.4.1.3 Fazit

Mit der Implementierung eines erweiterten FLASH-CAT-Modells in COCOSYS wurden verschiedene Defizite erfolgreich behoben. Die wichtigsten Aspekte sind (siehe auch /KLE 21a/):

- Die ursprüngliche MLR (Mass Loss Rate, Abbrandrate) hat aufgrund der konstanten spezifischen MLR ein etwas stufenförmiges Verhalten gezeigt. Außerdem ist der Abfall der MLR zu stark und tritt zu früh auf. Durch die Verwendung von MLR-Profilen in dem erweiterten FLASH-CAT-Ansatz sind die MLRs in der neuen Version glatt und zeigen das richtige Verhalten, insbesondere in der späteren Phase des Brandes.
- Die Aufteilung der Kabelmasse in mehrere Fraktionen (hier zwei) ermöglicht die Verwendung unterschiedlicher Werte für die Verbrennungswärme. So ist das neue Modell in der Lage, den in den Experimenten beobachteten Anstieg der Verbrennungswärme zu simulieren.

Das verbesserte Modell wurde anhand mehrerer PRISME-Experimente mit verschiedenen Kabeltypen und Lüftungsbedingungen validiert und lieferte gute Ergebnisse. In allen Simulationen werden beim gleichen Kabeltyp gleiche Eingabedaten in COCOSYS verwendet. Lediglich der Anteil der Restmasse muss durch Eingabe vorgegeben werden, da dieser Effekt nicht modelliert wird.

Die Verzögerung, die durch die spezifische Zündung mit Bunsenbrennern der in PRS3-CFP-D1 verwendeten Kabel verursacht wird, kann mit einem FLASH-CAT-Ansatz nicht simuliert werden. Darüber hinaus werden lokale Deflagrationen, wie sie im Test PRS2-CFS-2 auftraten, und die in PRS2-CFS-3 beobachteten Oszillationen in COCOSYS nicht modelliert. Obwohl der Transport von unverbrannten Stoffen in COCOSYS simuliert wird, müssen die Kriterien für die Zündung von Gasgemischen und das Löschen noch weiter verbessert werden.

2.4.2 Durchführung einer offenen COCOSYS-Rechnung anhand des realen Brandszenarios aus der Datenbank OECD/NEA FIRE (FIRE/PRISME-Benchmark Step#3)

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der COCOSYS-Rechnungen zu einem Realbrand in einer sogenannten Heater Bay dargestellt /PLU 21/. Dieses Brandszenario wurde in der Datenbank FIRE der OECD/NEA erfasst. Die Rechnungen sind Bestandteil des gemeinsam im internationalen Experimentalprojekt OECD/NEA PRISME und im Datenbankprojekt OECD/NEA FIRE (Fire Incidentes Records Exchange) durchgeführten Benchmark für Kabelbrände. Es wurden zwei COCOSYS-Rechnungen durchgeführt /KLE 21c/. Die Eingabedaten der ersten COCOSYS-Rechnung basieren weitgehend auf Ergebnissen des dafür speziell durchgeführten Versuchs PRS3-BCM-S2. In die zweite

Rechnung sind Ergebnisse einer von der GRS durchgeführten Rechnung mit dem CFD-Code FDS /FOR 22/ eingeflossen.

Der Brand findet in der Heater Bay innerhalb des Turbinengebäudes statt, die offen mit dem Rest des Gebäudes verbunden ist (Abb. 2.123). Wie in der Benchmark-Spezifikation /PLU 21/ vorgeschlagen, wird der Bereich der Heater Bay mit einer Länge von 40 m, einer Breite von 15 m und einer Höhe von 6,1 m angenommen. Die Abmessungen des angeschlossenen Turbinengebäudes betragen 40 m Länge, 32 m Breite und 12 m Höhe. Das Turbinengebäude stellt im Vergleich zum Sauerstoffverbrauch und zur Rauchentwicklung ein großes Gasvolumen dar, daher werden alle anderen Verbindungen und Lüftungssysteme vernachlässigt.

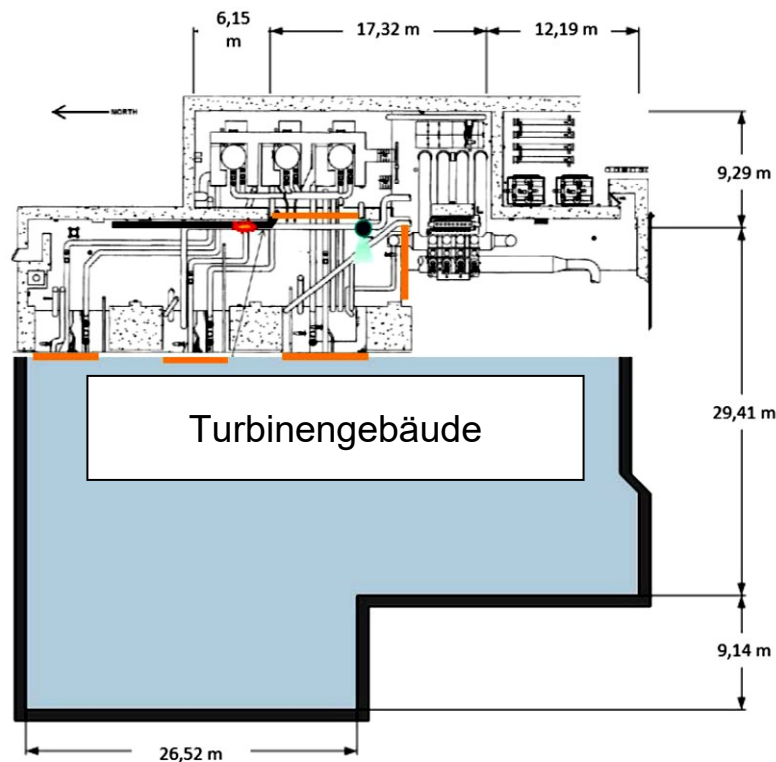


Abb. 2.123 Schema des Kabelbrandortes im Heater-Bay-Raum als Teil des Turbinengebäudes

Für die COCOSYS-Nodalisierung wurde ein strukturiertes Gitter verwendet, mit kleineren Gitterzellen um die Kabeltrassen und recht großen Volumina für die Turbinenhalle. Wie bei der PRF-BCM-S2-Rechnung werden vor und über der Kabeltrasse Plumezonen verwendet. Der Einfluss lokaler Effekte um die Kabeltrasse und den Sprinkler wurde mit FDS-Simulationen untersucht /FOR 22/.

Im Unterschied zur Spezifikation, wird die Kabeltrasse mit einer Länge von 6,3 m angenommen. Diese wird in 9 Segmente mit einer Länge von jeweils 0,7 m unterteilt (Abb. 2.124). Die langsame Anfangsphase des Kabelbrandes kann in COCOSYS mit dem FLASH-CAT-Ansatz nicht modelliert werden. Daher wird wie im Experiment PRF-BCM-S2 eine Zeitverzögerung von 500 s angenommen. Die Sprinkler und der Löschvorgang wurden nicht modelliert.

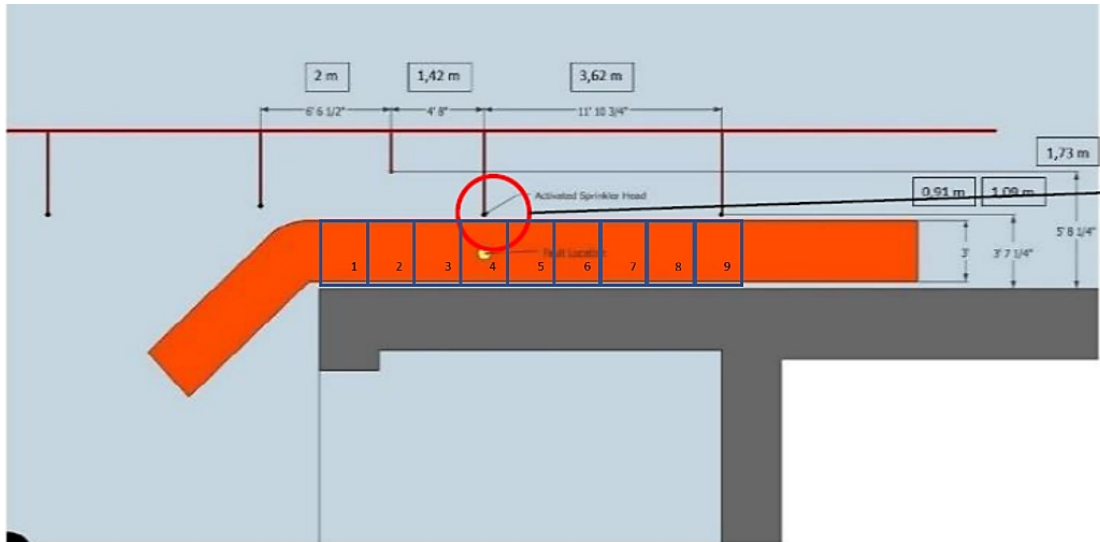


Abb. 2.124 Einteilung der Kabeltrassen

Die im Folgenden dargestellten COCOSYS-Ergebnisse zeigen ein Brandverhalten, das im Vergleich zum Realbrand viel heftiger ist. Daher wurde eine zweite COCOSYS-Rechnung mit einer geringeren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit durchgeführt. Außerdem wurde eine FDS-Berechnung durchgeführt, um die Qualität der COCOSYS-Ergebnisse zu analysieren. Folgende Eingabeparameter wurden in dieser Rechnung geändert:

- Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wurde von 12 mm/s (was in etwa der im entsprechenden PRISME-Experiment PRF-BCM-S2 /PRÉ 20/ beobachteten Obergrenze entspricht) auf 2,3 mm/s reduziert, was in etwa dem beobachteten Anfangswert der Feuerausbreitungsgeschwindigkeit entspricht.
- Zusätzlich wurde die Breite der Kabeltrasse entsprechend der beobachteten Beschädigung reduziert. Andernfalls würde die volle Breite der Rinne von 0,9 m berücksichtigt werden. Die Breite der unteren Rinne wurde auf 0,66 m und die der oberen Rinne auf 0,51 m reduziert.

Obwohl die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit stark reduziert wurde, beträgt die erwartete beschädigte Gesamtlänge der Trasse bis zum Einsetzen des Sprinklers etwa 2,8 m, also viel mehr als im realen Brandfall beobachtet wurde. Dies unterstreicht bereits größere Unterschiede zwischen dem PRISME-Experiment und diesem Brandereignis.

Abb. 2.125 zeigt einen Vergleich der COCOSYS- und FDS-Ergebnisse. Die FDS-Ergebnisse sind rot, die der COCOSYS Ergebnisse blau („default“) und grün („slow“) dargestellt. Wie bereits erwähnt, wird in der FDS-Rechnung und in der zweiten COCOSYS-Rechnung die gleiche Flammenausbreitungsgeschwindigkeit verwendet. Dies führt zu einem ähnlichen Verlauf der MLR. Ebenso sind die Temperaturen in der Nähe des Sprinklers ähnlich. Zu erkennen ist der in FDS verwendete, zu Beginn quadratische Verlauf der Abbrandrate. Auf der rechten Seite der Abbildung sind zusätzlich die Zeiten der Sprinklerauslösung dargestellt. Da COCOSYS hierzu kein Modell hat, wurden diese nachträglich im Postprocessing ermittelt. Der berechnete Wert ist ca. 200 s später als in der FDS-Rechnung. Die hohen MLR und Temperaturen der COCOSYS „default“-Rechnung zeigen, dass eine direkte Übertragung des PRF-BCM-S2 auf den Realbrand nicht sinnvoll ist. Weitere Ergebnisse sind in /KLE 21c/ dokumentiert.

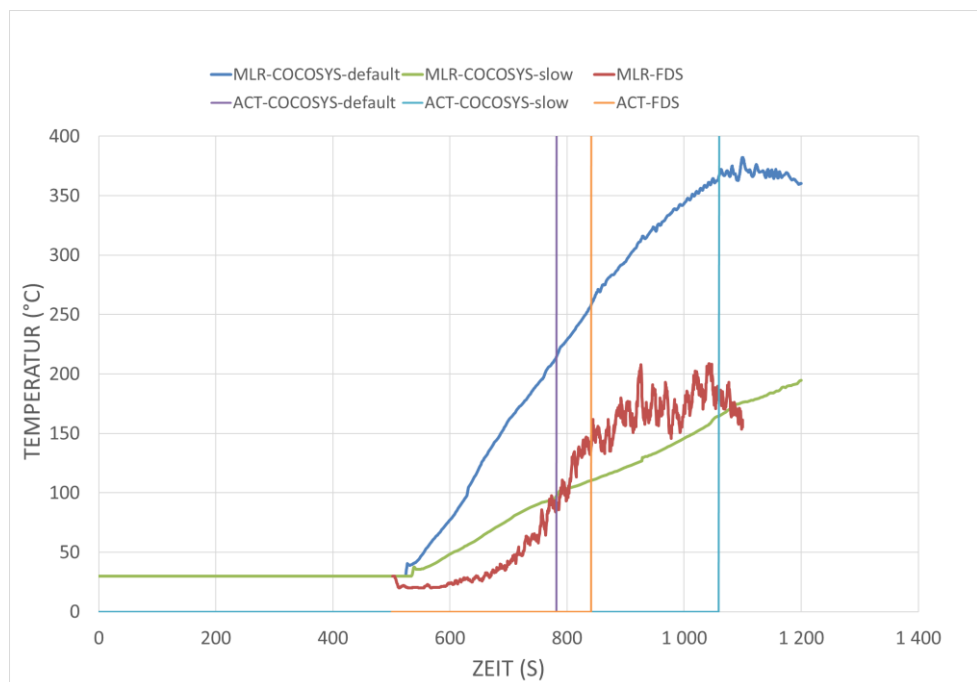
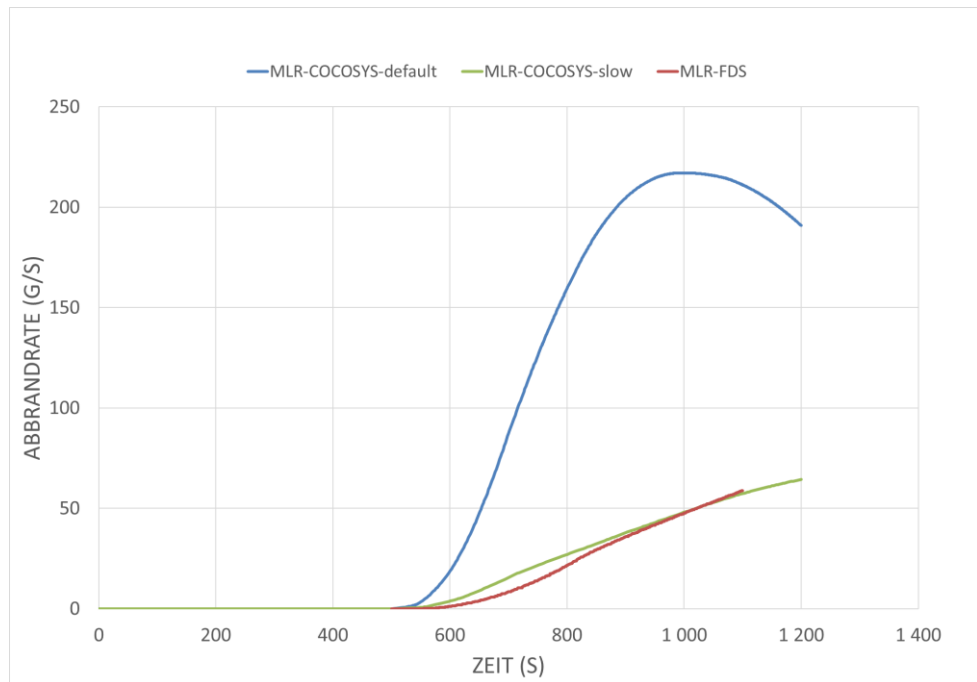


Abb. 2.125 Vergleich der Abbrandrate (oben) und Temperatur in der Nähe des Sprinklers (unten) der COCOSYS- und FDS-Rechnungen

3 Erprobung von AC²/COCOSYS auf fortschrittliche und innovative Anlagekonzepte/passive Systeme

In verschiedenen fortschrittlichen Reaktorkonzepten ist die passive Wärmeabfuhr über die Außenwand des Containments als ultimative Wärmesenke bei Stör- und Unfällen vorgesehen. Bei anderen Designkonzepten kommen darüber hinaus verstärkt auch passive Systeme zur Nachwärmeabfuhr aus dem Reaktorkühlkreislauf und zum Druckabbau im Containment zur Anwendung, wobei an den Reaktorkühlkreislauf angeschlossene Wärmetauscher große Wasserpools im oder außerhalb des Containments als Wärmesenke nutzen. Des Weiteren werden z. B. bei fortschrittlichen Reaktoren russischer Bauart vom Typ WWER passiv arbeitende Systeme zur Wärmeabfuhr im Containment eingesetzt.

Nachfolgend werden in Kap. 3.1 die Arbeiten zur Modellierung der passiven Containmentwärmeabfuhr über eine außen benetzte Containmentschale bzw. ein außen geflutetes Containment dokumentiert. Daran schließen sich in Kap. 3.2 Arbeiten zur Validierung von Systemen für die Wärmeabfuhr aus dem Containment mittels Gebäudekondensatoren an.

3.1 Passive Containmentwärmeabfuhr für fortschrittliche Anlagekonzepte

Beim Reaktordesign des AP1000 von Westinghouse oder den auf dieser Technik basierenden chinesischen Anlagen CAP1400 mit größerer Leistung wird beim passiv ausgelegten Containment-Kühlsystem (PCCS) die Außenseite der Stahlschale des Containments durch einen herablaufenden Wasserfilm im Gegenstrom zu einem Luftstrom gekühlt und so die Restwärme sicher abgeführt. Zur Berechnung der Kontaktfläche wurde am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) ein Rivulet-Modell für COCOSYS entwickelt /HUA 15/ und implementiert, das einen ablaufenden Wasserfilm und dessen Auflösung in Rivulets (Wasserstrahlen) auf Strukturen simuliert. Das folgende Kapitel dokumentiert die fortgesetzte Validierung anhand von Experimenten, die z. B. in der chinesischen WAFT-Anlage (Water Film Test Facility) /DU 20/ durchgeführt worden sind.

3.1.1 WAFT-Experimente zur Nachrechnung und Bewertung des Rivulet Modells

Das passive Containment-Kühlsystem (PCCS) ist eine Schlüsselkomponente des passiven Sicherheitssystems im Reaktortyp AP1000. Ein entlang der Außenschale der

Containmentwand ablaufender Wasserfilm trägt dazu bei, die Temperatur und den Druck im Inneren unter den Sicherheitsgrenzen zu halten. Dazu wurde ein Versuchsstand zur Untersuchung der Wärmeübertragung zwischen Wasserfilm und Luft im Gegenstrom auf einer vertikalen Platte mit Gegenheizung durchgeführt.

Aufbauend auf den Arbeiten im Vorläufervorhaben (RS1544) /REI 19a/ wurde die Nachrechnung von Versuchen an der chinesischen WAFT-Anlage (Shanghai Jiao Tong University – SJTU) fortgeführt. Dabei standen Versuche zur Verdampfung eines Wasserfilms auf der Containment-Außenwand von AP1000/CAP1400-Anlagen im Vordergrund /DU 20/, /REI 19a/. Dazu wurden von der SJTU Daten zu zwei älteren Experimenten bereitgestellt: Das Experiment 3-S mit typischer Verdampfung und der Versuch 4-BO mit einem siedenden Wasserfilm. Da die Daten nicht frei zugänglich sind, wurden Ergebnisse zu den Nachrechnungen und der Rivulet-Austestung in einer Technischen Notiz dokumentiert /ARN 21b/. Nachfolgend erfolgt eine kurze Zusammenfassung der durchgeführten Arbeiten.

Im ersten Schritt wurde der COCOSYS-Datensatz auf die zu diesem Zeitpunkt aktuelle Programmversion COCOSYS aktualisiert und partiell modifiziert. Im nächsten Schritt wurden die SJTU-Daten analysiert und für COCOSYS aufbereitet – einerseits als versuchsspezifische Anfangs- und Randbedingungen und andererseits als (stationäre) Messergebnisse für den Vergleich mit COCOSYS nach Erreichen stationärer Bedingungen. Leider sind einige Randbedingungen nicht direkt bekannt (z. B. Heizleistung im Ölkreislauf im Versuch 3-S) und mehrere Messgeber waren defekt. Weiterhin liegen keine Informationen zur ausgebildeten Wasserfilmdicke vor. In beiden Versuchen bedeckt der Wasserfilm die Platte über die gesamte Höhe (kein Austrocknen), was von COCOSYS reproduziert wird. Wesentliche Ergebnisse des Experimentes 3-S werden von COCOSYS gut nachgerechnet (mittlerer spezifischer Wärmestrom an der Plattenoberfläche, Atmosphärentemperatur und -geschwindigkeit, Massenstrom des verdampften und des ablaufenden PCCS-Wassers). Die lokalen Wärmeströme liegen innerhalb der gemessenen, allerdings stark streuenden Daten. Die lokalen Plattenoberflächentemperaturen werden überschätzt und zeigen größere Abweichungen im unteren Plattenbereich.

Im Experiment 4-BO wurde die Heizleistung in 3 Stufen erhöht, Messdaten liegen nur für Stufe 3 vor. Aufgrund der höheren Heizleistung sind die Messdaten im Vergleich zu 3-S zu höheren Temperaturen verschoben. Die Analysen zu 4-BO sollen dann in einem zukünftigen Vorhaben durchgeführt werden. Prinzipiell werden aber zu 3-S vergleichbare

Ergebnisse bzgl. Übereinstimmung und Abweichungen von COCOSYS erzielt. Allerdings werden die Atmosphärentemperaturen stärker überschätzt – um bis zu 30 K.

Parallel zu den Versuchsnachrechnungen zur COCOSYS-Validierung wurde mit der Testung des von KIT (Karlsruhe) entwickelten Rivulet-Modells für die Verdampfung des Wasserfilms auf der beheizten Platte der WAFT-Anlage begonnen. Da auch in 4-BO die Platte von einem geschlossenen Wasserfilm benetzt war, wurde zu akademischem Zwecke (in Abweichung zum Versuch) der Wassermassenstrom nach Erreichen stationärer Zustände linear auf null reduziert, um in der Simulation ein Austrocknen der Plattenoberfläche von unten beginnend zu erzwingen. Während die bisherige Simulation ohne Rivulet-Modell erwartete Ergebnisse liefert, bricht die Rechnung unter Verwendung des Rivulet-Modells in der Anfangsphase mit vollem PCCS-Massenstrom anormal ab. Bereits nach 100 s wird im Widerspruch zum Experiment ein Aufbrechen des Wasserfilms berechnet. Zudem wird von Beginn an ein ca. zehnmal so dicker Wasserfilm wie in der Ausgangsrechnung berechnet, d. h., es verbleibt wesentlich mehr Wasser im Film. Dies kann wegen fehlender Messdaten nicht verifiziert werden. Die bisherigen Ergebnisse zu den Nachrechnungen und der Rivulet-Austestung sind in einer englischen Technischen Notiz dokumentiert /ARN 21b/.

Aus den bisherigen Arbeiten lässt sich folgendes, vorläufiges Fazit zum Status des Rivulet-Modells ziehen:

In COCOSYS gibt es derzeit zwei noch völlig getrennte Modelle für Rivulets:

1. „Außenwand“
Verdampfung eines Wasserfilms – für das PCCS-System in AP1000/CAP1400 zur Außenkühlung der Containment-Stahlschale mit Wasser.
2. „Innenwand“
Bildung eines Kondensat-Films mit Abwaschen von Aerosolen (für AULA-Modell in NewAFP) zum Abwaschen von abgelagerten Aerosolen.

Im Folgenden sind identifizierte Defizite sowie Verbesserungsvorschläge zum aktuellen Rivulet-Modell „*Außenwand*“ aufgelistet. Diese wurden an KIT weitergeleitet und diskutiert, um sie im Zusammenhang mit der im VEKOCO-Projekt geplanten Modellentwicklung zu berücksichtigen.

- Das Rivulet-Modell setzt gegenwärtig eine bestimmte Definition in der COCOSYS-Eingabe (als sogenannte ‚rechte‘ Seite einer Struktur – *RIGHT*) voraus. Dies

entspricht nicht dem allgemeinen Konzept in COCOSYS für die generische Verwendung von Modellen zur Abbildung von Anlagen und ist daher fehleranfällig. Nach dem Tauschen von *LEFT* und *RIGHT* (der beheizten Strukturen) im WAFT-Datensatz endet die Rechnung z. B. abnormal mit Problemen in der iterativen Lösung der Wasserschichtdicke im Gegenstrom zur Luft.

- In einem von KIT konstruierten Testfall treten bei Annahme des Rinnsals (Rivulet) auf der linken (*LEFT*) oder rechten (*RIGHT*) Seite der Wärmeleitstruktur wesentliche Unterschiede im berechneten Kontaktwinkel sowie im Bedeckungsgrad auf, was sich dann in der abgeführten Wärme widerspiegelt.
Es wurde daraufhin der Quelltext des Modells im Programmcode untersucht. Dort wurden Abhängigkeiten von der Strukturseite identifiziert, auf welche die beobachtete Seitenabhängigkeit zurückgeführt werden kann. Diese Abhängigkeit steht im Widerspruch zum Modellkonzept in COCOSYS, welches einen flexiblen Einsatz von Strukturen und deren Seitendefinition in COCOSYS ermöglichen soll.
- Neben der Tatsache, dass beide Rivulet-Modelle unabhängig voneinander programmiert sind (getrennte Unterprogramme, getrennte Variablen), ist auch die Kopplung beider Modelle auf der Innen- und Außenseite einer Struktur (hier die Containment-Schale) nicht möglich.
- Ab der Version COCOSYS 3.0 gibt es die Option, segmentierte Strukturen zu definieren. Dabei wird in Abhängigkeit vom zeitlich veränderlichen Wasserstand in den Zonen auf beiden Seiten einer Struktur die Oberfläche automatisch in Anteile aufgeteilt, die unterschiedliche Randbedingungen bezüglich des Kontakts der Strukturseiten mit der Atmosphäre oder dem Wasser haben. Es gibt die Möglichkeiten Wasser/Wasser, Wasser/Atmosphäre bzw. Atmosphäre/Wasser und Gas/Gas als Verteilung der Kontaktfluide auf der linken/rechten Seite. Die Modelloption Rivulet mit kombinierter Verwendung segmentierter Strukturen funktioniert nicht. Die Rechnung läuft zwar ohne Fehler/Warnung durch, es werden aber für die rechte Seite keine Rivulet-spezifischen Ergebnisse wie Bedeckungsgrad oder Schichtdicke berechnet. Die Überlagerung von Rivulet und Segmenten ist im Quellcode bisher nicht vorgesehen.

Alle identifizierten Defizite sowie Verbesserungsvorschläge wurden mit dem Entwickler KIT diskutiert und sollen im geplanten Nachfolgeprojekt bei KIT berücksichtigt werden. Dabei sind ein enger Kontakt und Unterstützung durch die GRS vorgesehen.

3.1.2 Erstellung generischer Datensätze und Nachrechnungen von Szenarien für ein (von außen) geflutetes Containment mit SMR typischen Randbedingungen

In Konzepten für fortschrittliche und innovative kleine modulare Reaktoren (SMR – von Englisch Small Modular Reactor) wie NuScale™ /NUS 20/ und NUWARD™ /IAEA 20/ werden sehr große Wasserpools für die passive Wärmeabfuhr vom Containment verwendet.

Den neuen Anforderungen wurde in COCOSYS durch die Erweiterung der Modellbasis und durch die Ankopplung weiterer Rechenprogramme Rechnung getragen. Zu letzterem zählt der beim Fraunhofer Institut ITWM (Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik) entwickelte Rechencode CoPool /ILI 12/, /KLE 17/, /ZEM 19/ zur dreidimensionalen, einphasigen Simulation von Konvektionsvorgängen und der Temperaturverteilung in einer Wasservorlage. Die Simulationsprogramme CoPool und COCOSYS wurden bisher nur für kleinere Wasserpools erprobt, verifiziert und validiert /ILI 20/, /KLE 17/, /ZEM 19/. Daher ist es essenziell, die Anwendbarkeit von diesen Rechencodes für passive Wärmeabfuhrsysteme mit großen Wasserpools zu untersuchen.

Nachfolgend wurde COCOSYS separat als auch gekoppelt mit CoPool auf ausgewählten Beispielen angewendet, um die Rechenkette für zukünftige Anwendungen zu validieren und zu qualifizieren. Dazu wurden generische Datensätze für CoPool und COCOSYS mit Fokus auf dem Wärmeaustausch zwischen einer langen, senkrechten, SMR-typischen Containment-Wand und einem großen Wasserpool untersucht.

3.1.2.1 Untersuchung eines generischen CoPool Datensatzes für SMR-Wasserpools

Hintergrund

CoPool /ILI 12/, /FRA 21a/ ist eine CFD-Software zur Simulation von Wasserpools und wurde in der Abteilung Strömungs- und Materialsimulation bei Fraunhofer ITWM von 2009 bis 2019 entwickelt /FRA 21b/, /FRA 21c/. CoPool wurde als Erweiterung von COCOSYS /ARN 19/ strukturiert. Das primäre Entwicklungsziel von CoPool ist die detaillierte (im Vergleich zum integralen LP-Code COCOSYS) Simulation von lokalen Effekten wie Einspeisung von Wasser, Wasserdampf oder Energie sowie Temperaturschichtungen in Wasserpools. CoPool ermöglicht deutlich genauer als mit COCOSYS, Strukturen zu definieren und die Strömung und den Energiefluss in einphasigen

Wasserpools innerhalb der Geometrie zu simulieren. Der Wärmefluss innerhalb von Strukturen wird auch berücksichtigt.

Der Entwicklungsstand von CoPool wurde im Jahr 2019 an die GRS übergeben, mittels GitLab (Tool für die Versionsverwaltung von Softwareprodukten im Rahmen von Entwicklungsprojekten) in das Programmcodearchiv der GRS integriert und verifiziert. Dazu wurde der Quelltext vom bisher verwendeten Versionsverwaltungssystem Subversion (SVN) auf Git übertragen und die entsprechenden Microsoft-Visual-Studio-Projekte angepasst. Verfügbare Input-Datensätze für den CoPool Präprozessor, für CoPool-Stand-Alone-Anwendung sowie für gekoppelte CoPool-COCOSYS-Rechnungen wurden zu Testzwecken simuliert und visualisiert.

CoPool wurde bisher für Simulationen von Sumpfbereichen in DWR vom Typ KONVOI /SCH 17/, der Kondensationskammer in SWR-72 /REI 19a/, des Sumpfbereichs im Versuch THAI TH-27 und für Simulationen von Unfällen im RBMK-1000 /ARN 20/ verwendet. In all diesen Fällen wurde ein im Vergleich zum SMR-Konzept kleiner Wasserpool betrachtet, der nicht durch großräumige Wasserströmungen charakterisiert ist.

Geometrie

Mit dem Ziel, die Anwendbarkeit von CoPool für größere Wasserpools zu analysieren, wie sie aktuell für kleine Modulare Reaktorkonzepte (SMR) geplant werden, wurde eine dem SMR-Design entsprechende, jedoch vereinfachte Modellgeometrie definiert. Damit werden bekannte Beschränkungen von CoPool vermieden. Der Fokus dieser Studie lag auf der Analyse der freien Konvektion und Temperaturschichtung in großen Wasservorlagen.

Die ausgewählte Modellgeometrie besteht aus zwei Räumen, die durch eine dünne Stahlwand räumlich voneinander getrennt sind (vgl. Abb. 3.1). Ein größerer Raum mit den inneren Maßen $20\text{ m} \times 20\text{ m} \times 40\text{ m}$ (Breite $\times$ Tiefe $\times$ Höhe) modelliert den Wasserpool. Ein kleinerer Raum mit den Maßen $10\text{ m} \times 20\text{ m} \times 40\text{ m}$ wurde für die Wärmequelle definiert. Der große Raum ist bis zur Höhe von 24,5 m mit Wasser gefüllt. Das entspricht einer Abschätzung für die Tiefe des Wasserpools in SMR-Konzepten. Der kleinere Raum stellt in erster Näherung das SMR-Containment dar, das in einen umliegenden Wasserpool getaucht ist. Für den vorliegenden Testfall sollte aber nur der Wärmeaustausch zum Stahlblech untersucht werden. Der größere Raum ist an drei Seiten von Betonwänden mit einer Wandstärke von 1 m umschlossen. Die zwei Räume sind

mit einer dünnen Wand mit 0,1 m Wandstärke getrennt, die die Stahlschale des Containers darstellt. Die unteren 15 m dieser Zwischenwand sind aus Stahl, der obere Teil ist aus Isoliermaterial, so dass für letzteren kein Wärmetransport berechnet wird.

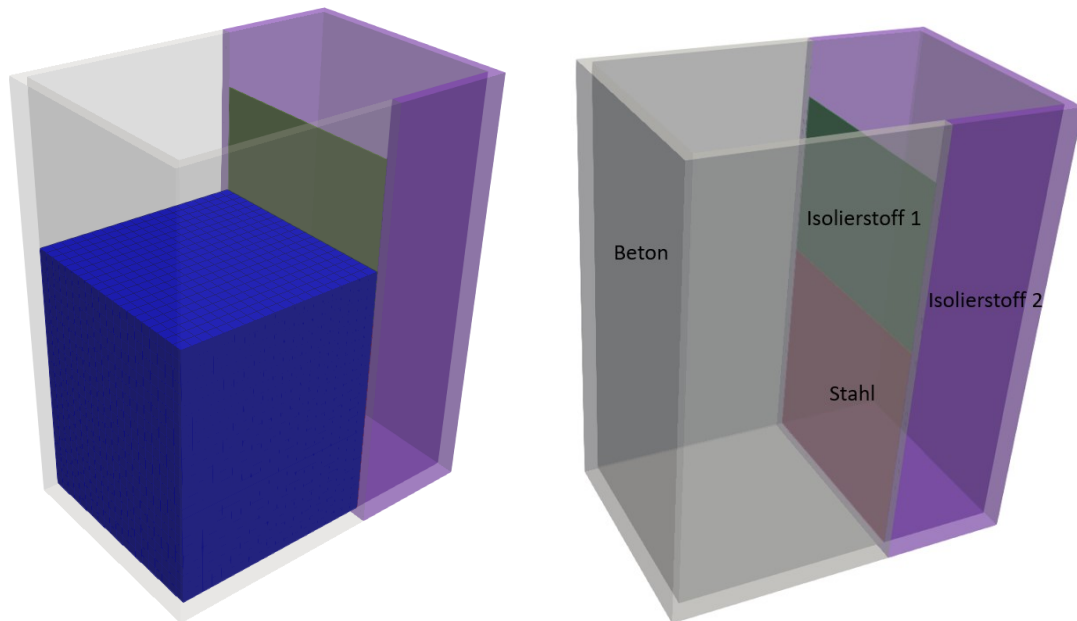


Abb. 3.1 CoPool Modellgeometrie für Idealisierten SMR

3.1.2.1.1 CoPool Gitter und COCOSYS Nodalisation

Für die ausgewählte Geometrie wurden zahlreiche numerische Studien durchgeführt, um die Effekte von Gittergröße, adiabatischen sowie nicht-adiabatischen Wänden (sprich Vernachlässigung oder Berücksichtigung von Wärmeverlusten an die umgebenden Betonwände), Zeitschrittsteuerung, numerisches Verhalten für Berechnungen auf mehreren Prozessoren und weiteren Eingabeparametern zu analysieren. In den meisten Fällen konnten die Rechnungen problemlos durchgeführt werden. Liegt der anfängliche Wasserspiegel jedoch genau auf der Grenze zwischen zwei Gitterreihen, zeigt sich, dass die obersten Gitterzellen direkt unter dem Wasserspiegel nicht realistisch aufgewärmt wurden. Deswegen wurde für ein Gitter mit $1\text{ m} \times 1\text{ m} \times 1\text{ m}$ Zellen im Flüssigkeitsbereich (Abb. 3.2) eine anfängliche Wassertiefe von 24,5 m ausgewählt.

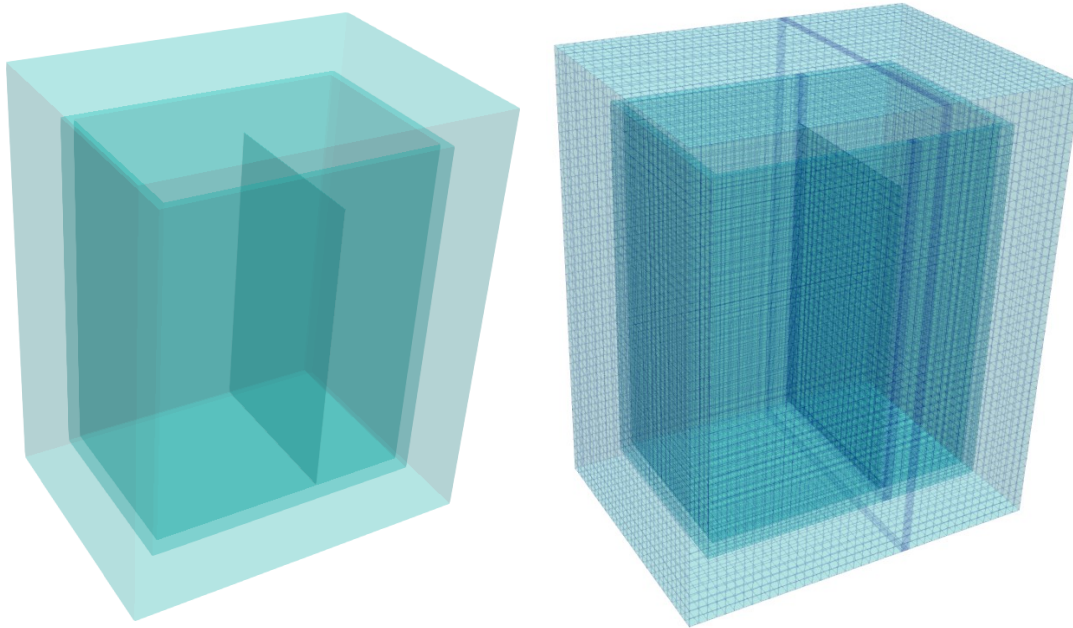


Abb. 3.2 Berechnungsgebiet (links) und Flüssigkeitsgitter (rechts)

Im nächsten Schritt wurde ein COCOSYS-Datensatz für eine gekoppelte COCOSYS-CoPool-Rechnung vorbereitet (vgl. Abb. 3.3). Im COCOSYS-Datensatz wird eine Wasserdampfeinspeisung und der damit einhergehende Energieeintrag in Zone A01.1 mit vorgegebenen Zeittabellen definiert. Der Energieeintrag führt zu einer schnellen Aufheizung der Stahlstruktur und modelliert ein LOCA-Szenario.

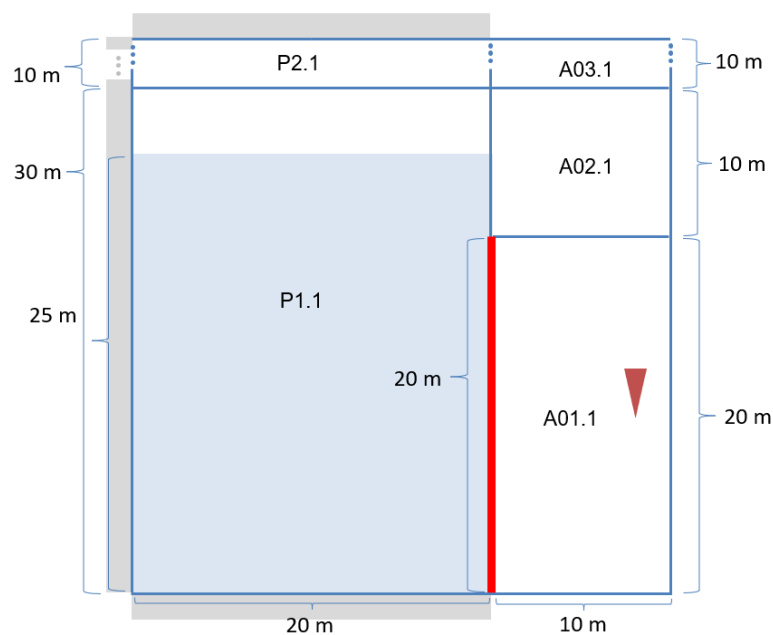


Abb. 3.3 COCOSYS-Schema der Nodalisation – Seitenansicht

3.1.2.1.2 Numerische Ergebnisse

Der Zeitverlauf der berechneten Temperaturverteilung im Wasserpool ist in den Abb. 3.4, Abb. 3.5, Abb. 3.6 und Abb. 3.7 farbcodiert dargestellt.

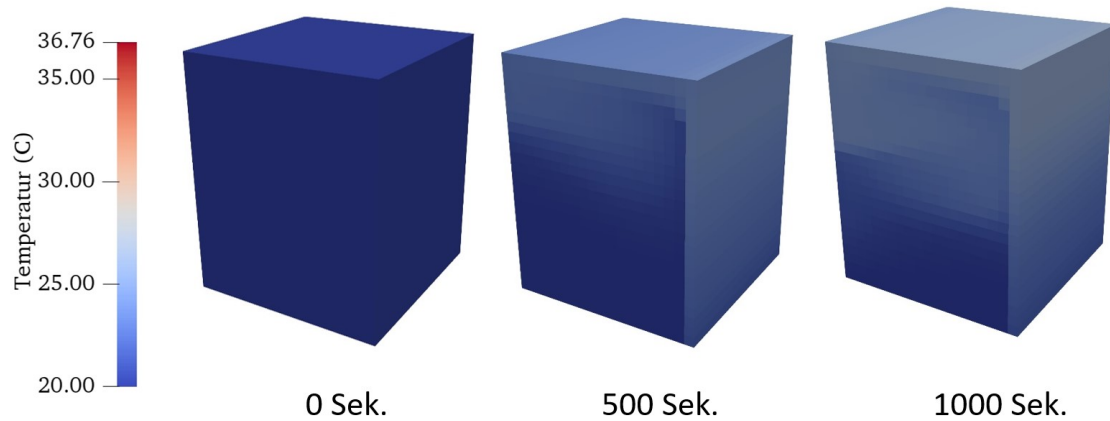


Abb. 3.4 Temperaturverteilung bei $T = 0$ Sek., $T = 500$ Sek. und $T = 1000$ Sek.

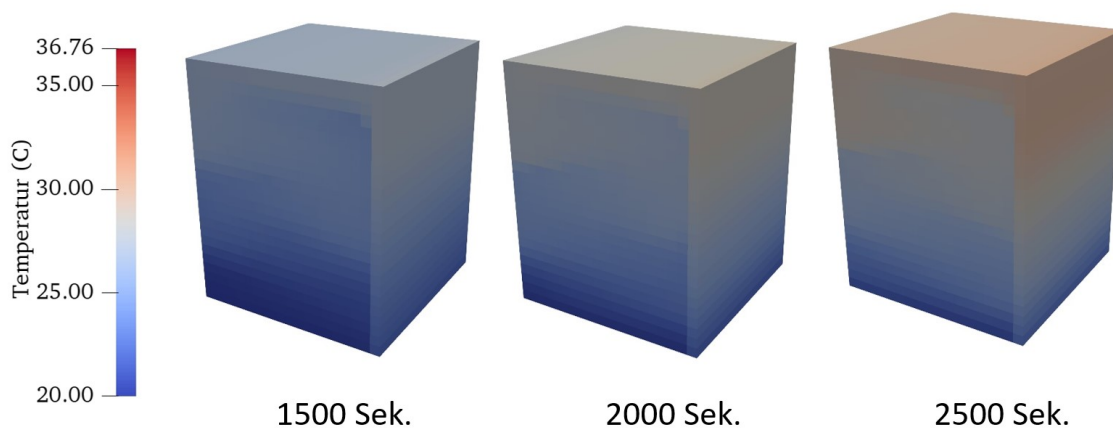


Abb. 3.5 Temperaturverteilung bei $T = 1500$ Sek., $T = 2000$ Sek. und $T = 2500$ Sek

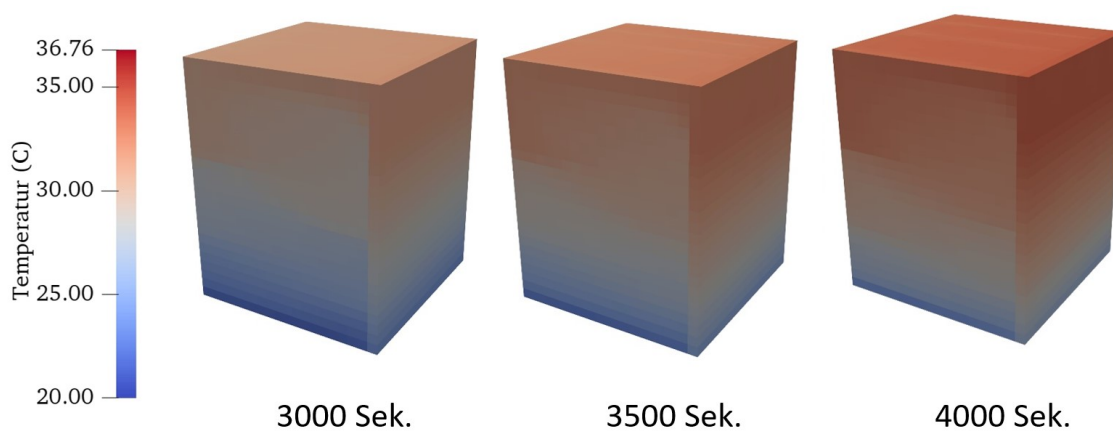


Abb. 3.6 Temperaturverteilung bei $T = 3000$ Sek., $T = 3500$ Sek. und $T = 4000$ Sek.

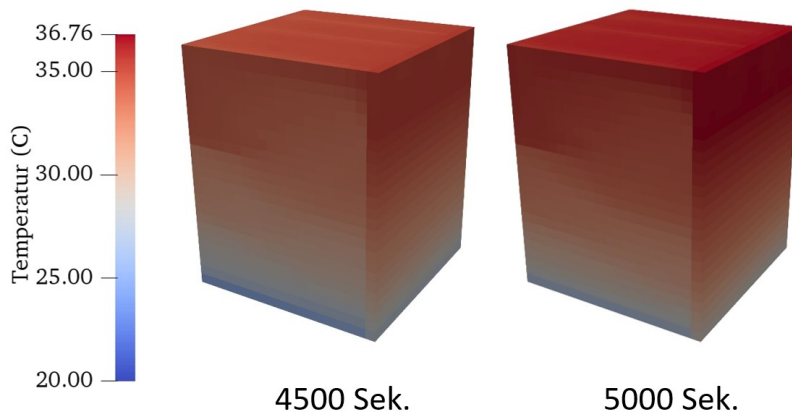


Abb. 3.7 Temperaturverteilung bei $T = 4500$ Sek. und $T = 5000$ Sek.

Unter den vorgegebenen Randbedingungen strömt an der beheizten, heißen Stahlstruktur (rechte Fläche in den Abbildungen) Wasser langsam nach oben. Bis zum Rechenende bei 5.000 s stellt sich eine Temperaturschichtung im Wasser ein, wobei die maximale Temperaturspreizung nur ca. 16 K beträgt. Die Temperatur an der Wasseroberfläche ist in dieser Untersuchung wenige Grad größer als die mittlere Wassertemperatur. Diese Wasserstratifikation kann zurzeit mit COCOSYS im Stand-alone-Modus nicht abgebildet werden.

Der Zeitverlauf des Geschwindigkeitsfeldes (in m/s) in der Mitte der Geometrie ($y = 10$ m) ist in Abb. 3.9, Abb. 3.10, Abb. 3.11 und Abb. 3.12 farbkodiert in einem Bereich von 0,0 m/s bis 0,3 m/s dargestellt. In den ersten 1.000 Sekunden ist die Strömung instabil und es können bis zu drei lokale, mäandernde Strömungsschleifen beobachtet werden, während sich an der beheizten Fläche eine eindeutige temperatur- bzw. dichtegetriebene Aufwärtsströmung ausbildet (siehe Einzeldarstellung Abb. 3.8). Bei ca. 1.500 s stabilisiert sich die Strömung und bis 5.000 s. bildet sich eine stationäre Konvektionsschleife mit fast unverändertem Strömungsprofil aus.

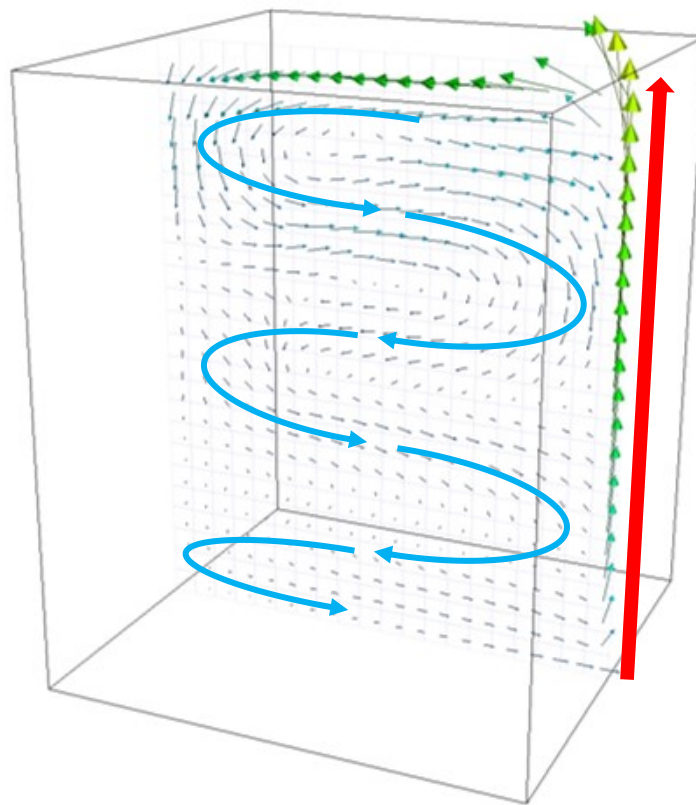


Abb. 3.8 Geschwindigkeitsfeld (qualitativ)

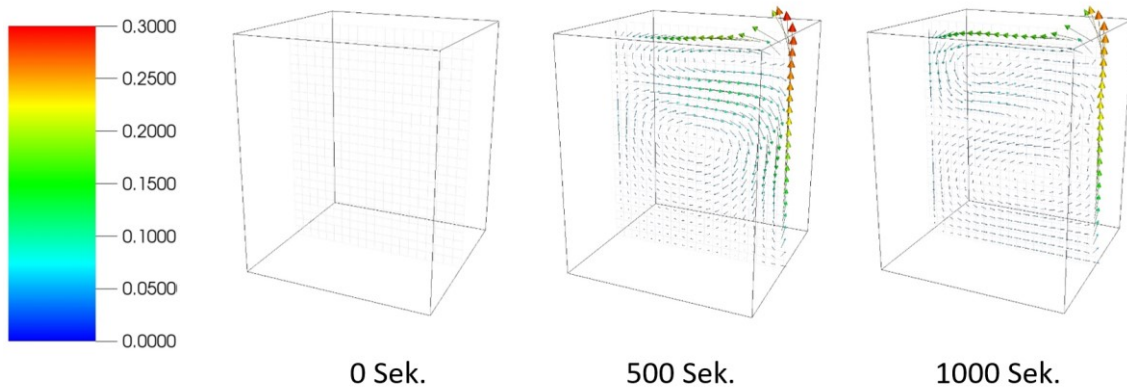


Abb. 3.9 Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für $y = 10$ m bei $T = 0$ Sek., $T = 500$ Sek. und $T = 1000$ Sek.

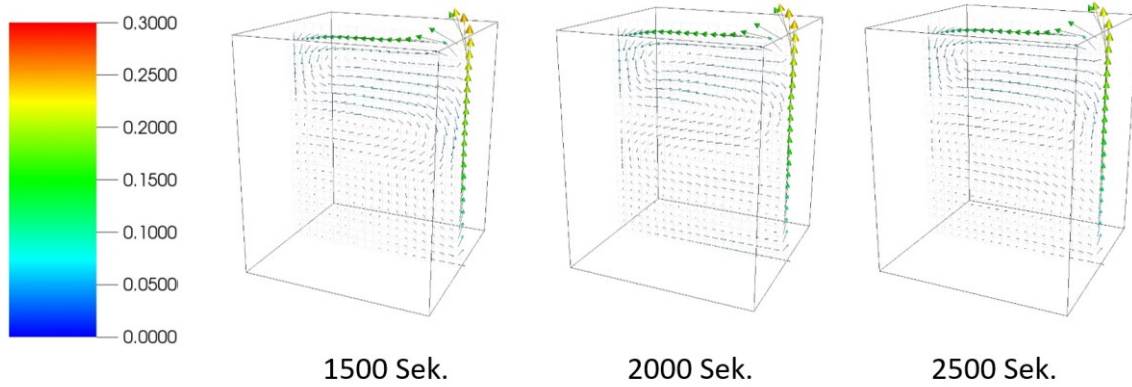


Abb. 3.10 Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für $y = 10$ m bei $T = 1500$ Sek.,
 $T = 2000$ Sek. und $T = 2500$ Sek.

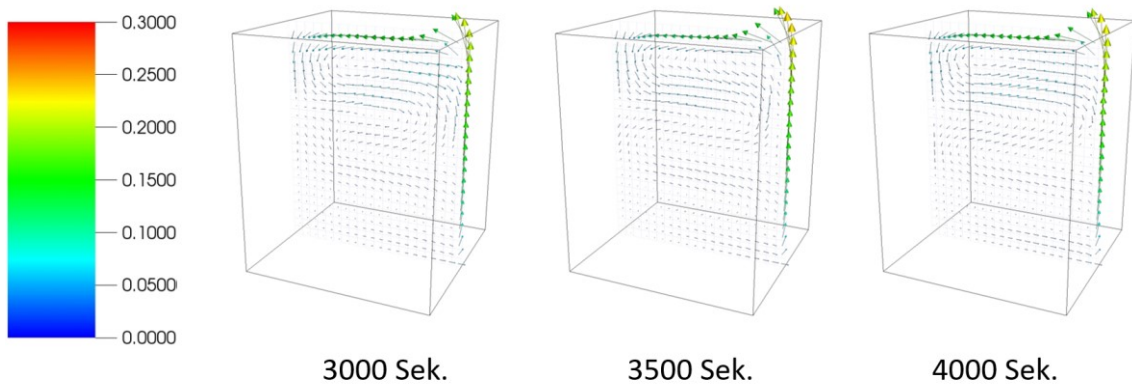


Abb. 3.11 Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für $y = 10$ m bei $T = 3000$ Sek.,
 $T = 3500$ Sek. und $T = 4000$ Sek.

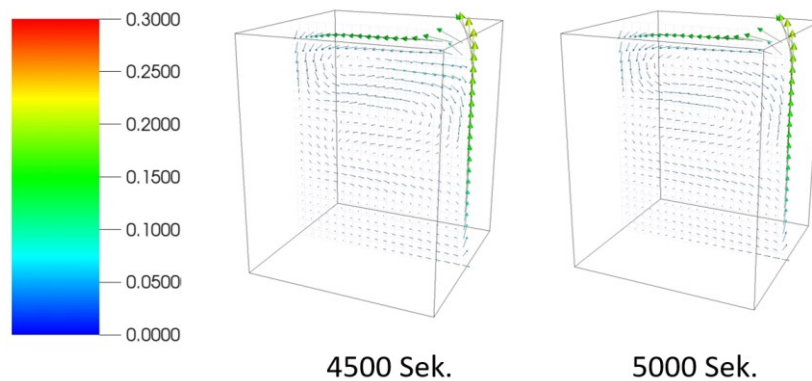


Abb. 3.12 Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für $y = 10$ m bei $T = 4500$ Sek. und
 $T = 5000$ Sek.

Als Berechnungszeit auf einem PC für 5.000 Sekunden Zeitverlauf mit dem groben Gitter (Abb. 3.2) benötigt die gekoppelte COCOSYS-CoPool-Simulation ca. 1,5 Stunden.

3.1.2.1.3 Fazit

Mit der Beendigung der Entwicklung von CoPool bei ITWM im Jahre 2019 ist CoPool an die GRS übergeben worden. Es wurden die erforderlichen technischen Anpassungen für ein Software-Management und die weitere Nutzung von CoPool in der GRS sowie intensive numerische Studien zur Anwendbarkeit von CoPool für SMR-Typische Wasserpools durchgeführt.

Die numerischen Ergebnisse von gekoppelten COCOSYS-CoPool-Berechnungen geben die Bildung von Konvektionsschleifen und eine erwartete Temperaturschichtung wieder. Eindeutige Beschränkungen von CoPool für die Simulationen von Stör- und Unfallabläufen bei SMR sind, dass CoPool nur für die einphasige Simulation von Wasser ausgelegt ist und dünne Strukturen nur in einzelnen Fällen möglich sind. Bei SMR-Konzepten bildet die vergleichsweise dünne Containment-Stahlschale die begrenzende Randstruktur zum Wasserpool. Für eine genaue Abbildung von lokalem sowie stark ausgeprägtem Wassersieden im Wasserpool, wären weitere umfangreiche Entwicklungen notwendig.

Mit den Erfahrungen aus dieser Studie wird die Verwendung von CoPool nur für einen begrenzten Anwendungsbereich empfohlen und dafür aber als recht anspruchsvoll eingestuft. CoPool ermöglicht eine im Vergleich zu COCOSYS detaillierte Berechnung von lokalen Effekten in großen Wasserpools, solange die Strömung einphasig bleibt.

3.1.2.2 Untersuchung eines generischen COCOSYS-Datensatz für SMR-Wasserpools

Im COCOSYS Entwicklungsvorhaben /SPE 21/ wurden Modellerweiterungen für die Simulation von Wasserpools realisiert. Die Rohsenow-Korrelation /PIO 04/ für nukleares Sieden wurde eingebaut, die numerische Stabilität des ATM_FULL-Verbindungstyps wurde verbessert und die Berechnung von Stoffwerten wurde optimiert. In diesem Unterkapitel werden Untersuchungen zur Anwendbarkeit von COCOSYS für Simulationen von Unfallszenarien im SMR-Konzept mit Fokus auf große Wasserpools dokumentiert.

Hintergrund

Passive Wärmeabfuhrsysteme sind sicherheitstechnisch relevante Systeme und Bestandteil vieler fortschrittlicher Anlagenkonzepte. In Notkondensatoren wie im KERENA-Konzept (Abb. 3.13 links), Gebäudekondensatoren wie im AP1000-Konzept (Abb. 3.13

rechts) sowie bei SMRs wie im NuScale™-Konzept (Abb. 3.14) sind große Wasserpools ein wichtiger Teil von passiven Wärmeabfuhrsystemen. Deswegen ist die genaue Abbildung von allen relevanten Phänomenen, wie Naturumlauf, freie- und erzwungene-Konvektion, Wassersieden und Wasserstratifikation, in Simulationsprogrammen sehr wichtig.

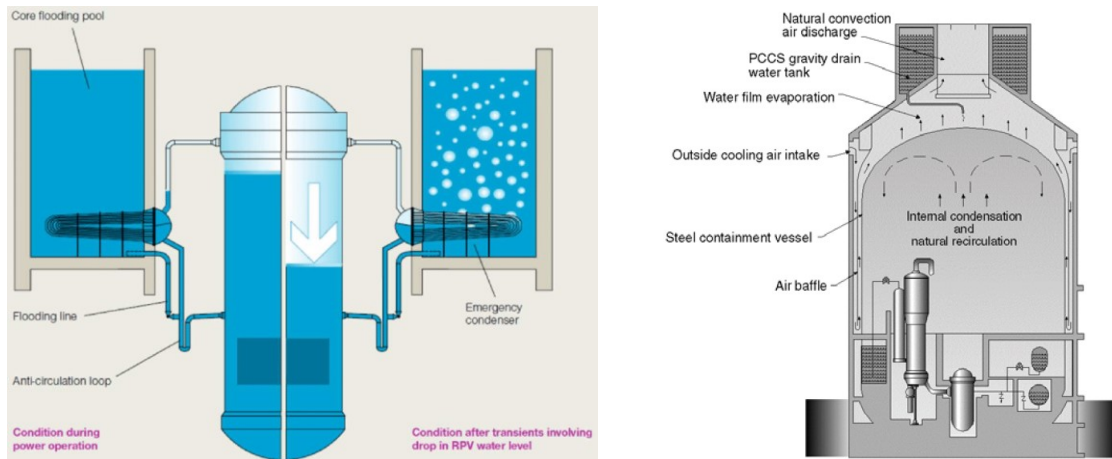


Abb. 3.13 Notkondensatorkonzept im KERENA /BRY 17/ (links) und Gebäudekondensatorkonzept in AP1000TM /SUT 11/ (rechts)

Mit der von der GRS entwickelten Software COCOSYS, wurde zuerst die Simulation von Sicherheitsbehältern (Containments) bei Störfällen und Unfällen mit dem primären Fokus auf Druckwasserreaktoren entwickelt /ARN 19/. In diesen Kernkraftwerken steht als primärer Simulationspunkt für Wasserpools der Wassersumpf, der sich bei einem Unfall bildet. Im Vergleich zum gesamten Volumen des Containments ist dieses Wasservolumen sehr klein. Für die Simulation von Unfall- und Störfallszenarien reicht es, diesen Sumpf als eine Zone mit gemittelter Temperatur zu betrachten. Insbesondere für Integralcodes wie COCOSYS ist der Einfluss von der Verteilung eines Sumpfes auf mehrere Unterzonen sehr gering.

In SMR-Konzepten wie NuScale™ /NUS 20/ und NUWARD™ ist das SMR-Containment in einem Wasserpool mit Volumen deutlich größer (oder mindestens vergleichbar groß) wie das Containment selbst. Für eine genaue Simulation von physikalischen Phänomenen, die in solchen Wasserpools auftreten und zeitlich wie örtlich veränderlich sind, reicht die bis dato typischerweise bei Lumped-Parameter-Programmen wie COCOSYS durchgeführte Modellierung eines Wasserpools mit nur einer Zone und gemittelter Temperatur nicht aus. Für komplexere Phänomene in großen Wasserpools, wie das Ausdampfen des Wasserpools im NuScale™-Design bei Stör- und Unfällen (Abb. 3.14), wurde in COCOSYS der sogenannte ATM_FULL-Verbindungstyp entwickelt. Diese Verbindung

erlaubt das komplette Auffüllen von Zonen in COCOSYS. Damit ist es möglich, einen Wasserpool mit einer feineren Nodalisierung abzubilden.

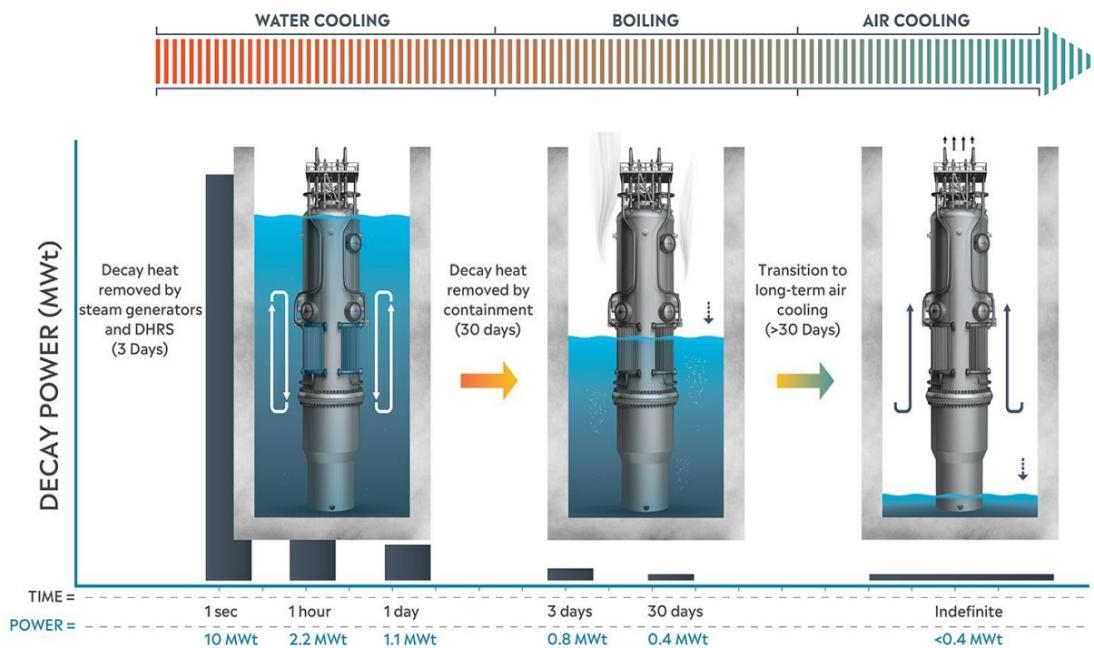


Abb. 3.14 Nachzerfallswärmeabfuhrsystem im NuScale™ SMR /NUS 20/

Diese Studie untersucht den Anwendungsbereich von ATM_FULL für eine akademische Modellgeometrie, die dem NuScale™-Konzept angenähert ist. Da beim Ausdampfen des Wasserpools über mehrere Tage neben dem Wärmetransport durch freie Konvektion insbesondere auch der Wärmetransport infolge Blasensieden von Relevanz sein kann, werden die Module CO1 für den konvektiven Wärmetransport und ROH für lokale Siedevorgänge untersucht.

3.1.2.2.1 COCOSYS-Nodalisierung

Für die Untersuchung des Anwendungsbereichs von ATM_FULL für große Wasserpools wurde ein akademisches Testbeispiel betrachtet. Ein Wasserpool mit Dimensionen 5 m × 5 m × 26 m (Abb. 3.15 links), an dessen einer Seitenfläche eine Stahlstruktur mit einer Fläche von 2,5 m × 12 m und einer Wandstärke von 10 cm angrenzt, wurde simuliert. Diese Geometrie ist angelehnt an den Wasserpool, der das Containment des NuScale™-Konzepts umgibt. In dieser Studie sind keine weiteren Betonstrukturen (Wände, Boden- und Decken-Strukturen) vorhanden. Diese Konfiguration erlaubt durch ihre einfachen Randbedingungen die gezielte Analyse des Anwendungsbereichs des ATM_FULL-Verbindungstyps.

Die Materialeigenschaften sowie Wandstärke der Struktur sind am NuScale-Konzept orientiert. Als Anfangsbedingung wurde ein stationärer Zustand definiert. Dazu wurden die Strukturtemperatur, Wassertemperatur und Lufttemperatur auf 50 °C initialisiert. Zu Beginn befindet sich die Atmosphäre auf 1 bar bei einer relativen Luftfeuchtigkeit von 100 %. 100 Sekunden nach Testbeginn wurde die linke Seite des Stahls nahezu instantan (über einen Zeitraum von 0,1 Sekunden) auf eine Temperatur von 300 °C gesetzt, die dann im weiteren Verlauf konstant bleibt.

Zwei Nodalisierungen mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad wurden analysiert – Abb. 3.15, links und rechts. Wenn der Wasserpool in vertikaler Richtung nicht auf mehrere Zonen verteilt wird (Abb. 3.15 links), wird nur eine Wassertemperatur je Zone gemäß dem Lumped-Parameter-Konzept in COCOSYS gemittelt berechnet.

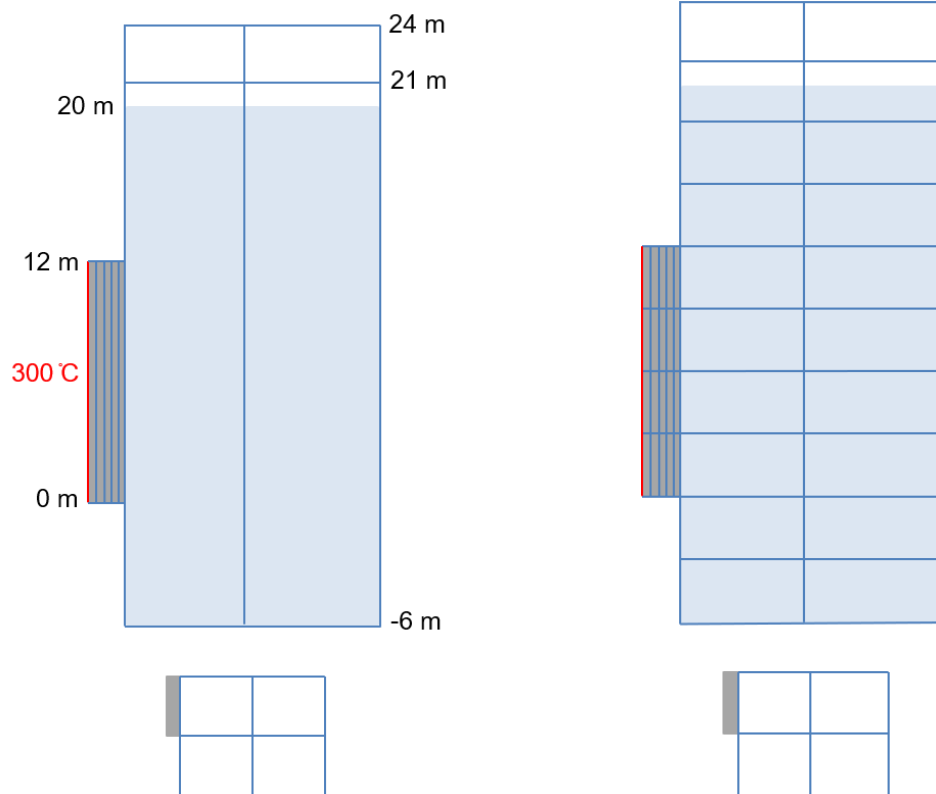


Abb. 3.15 1-Zonen-Nodalisierung (links) und 10-Zonen-Nodalisierung (rechts)

Um den Anwendungsbereich der ATM_FULL-Verbindung zu untersuchen, wurde eine zweite, detailliertere Nodalisierung mit vertikaler Verteilung auf 10 gleichgroße Zonen betrachtet – Abb. 3.15 rechts. In diesem Fall wird auch die Stahlstruktur auf 4 COCOSYS-Strukturen verteilt, die mit den entsprechenden Zonen auf diese Höhen verbunden sind.

In beiden Fällen wurde eine gleichmäßige Unterteilung (Nodalisierung) der Struktur/en in 6 Schichten verwendet. Die stufenweise konstante Temperatur auf der linken Seite der Stahlstruktur wurde mittels vordefinierter Randbedingung eingestellt.

Zwei Zonen, die entweder aufeinander liegen oder nebeneinander, sind mit zwei ATM_FULL-Verbindungen verbunden. Zwei senkrechte Verbindungen mit Mittelpunkten in verschiedenen Zonen stabilisieren das numerische Verfahren bei Anwendung von ATM_FULL-Verbindungen. Horizontale ATM_FULL-Verbindungen erfassen Änderungen im Wasserstand und berechnen dynamisch die Flächen für Transport von Wasser und Dampf oder Gasen. Leider haben frühere Studien gezeigt, dass Naturumlauf und freie Konvektion mit horizontalen Verbindungen nicht korrekt simuliert werden können. Deswegen wurden die Verbindungen für Zonen nebeneinander als nicht-horizontal definiert. Durch diese besondere Nodalisierung und Definition von Verbindungen lassen sich viele Probleme umgehen.

Aktuell ist der COCOSYS-Input nur auf Zonen, die zumindest einen geringen Gasanteil haben, begrenzt. Eine Eingabe mit komplett gefluteten Zonen beim Start der Rechnung ist derzeit noch nicht möglich. Typischerweise werden die Zonen am Anfang auf 95 % bis 99 % gefüllt definiert und zu Beginn der Rechnungen wird eine Vorphase durchlaufen, in der sich die Zonen auffüllen – Abb. 3.16. Obwohl diese Phase nur wenige Sekunden braucht, um den stationären, gefluteten Zustand zu erreichen, ist dieses Verfahren numerisch instabil. Nur mit großen Werten für die numerischen Fehlerobergrenzen in den Einstellungen von Nicht-Gleichgewichtszonen, ist eine Simulation innerhalb weniger Minuten Berechnungszeit möglich. Dazu müssen noch die Fehlerbegrenzungen im numerischen Löser für gewöhnliche Differenzialgleichungen (FEBE) auf höhere Werte gesetzt werden und spezielle Nodalisierungsstrategien für die senkrechten Verbindungen verwendet werden. Ein gleichzeitiger Transport von flüssigem Wasser und Gasen (nicht kondensierbare Gase und Wasserdampf) ist momentan in COCOSYS nur für horizontale ATM_FULL-Verbindungen möglich. Deswegen wird für jede zweite Zone, die aufeinander liegen, zwei Verbindungen verwendet – eine mit Mittelpunkt in der niedrigen Zone und eine mit Mittelpunkt in der oberen Zone. Die Strömungswiderstände (ZETA-Werte) müssen groß gestellt werden, um das Zonenfluten bei der ersten Simulationsphase numerisch zu stabilisieren.

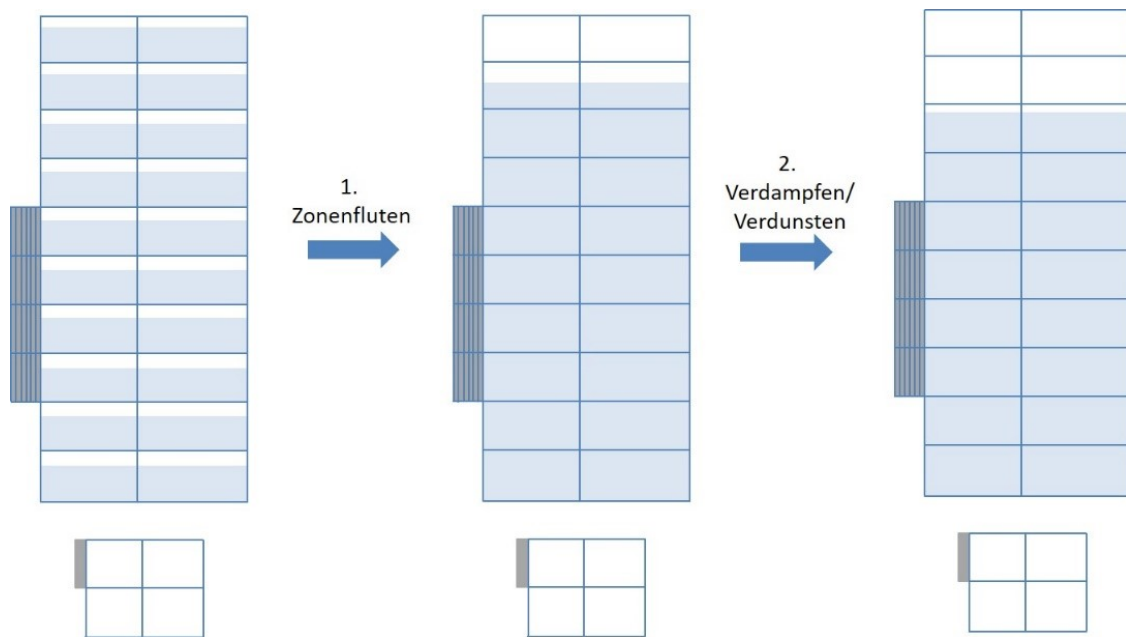


Abb. 3.16 Hauptphasen der Simulationsphasen

Separate Eingaben für die Strömungswiderstände bei Transport von Wasser und Gasen erlauben eine genaue Simulation von Gegenströmungen und eine numerisch-stabilere Simulation von Strömungsvorgängen in Wasserpoools. Die Weiterentwicklung von Eingabeparametern im ATM_FULLL wird empfohlen.

3.1.2.2.2 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt sind der Simulationsverlauf sowie die numerischen Ergebnisse dargestellt.

Nach 100 Sekunden wird die Struktur beheizt und die Wassertemperatur steigt. Da das Wasser am Anfang eine Temperatur von 50 °C hat, dauert es eine gewisse Zeit, bis die Siedetemperatur vom Wasser (100 °C bei 1 bar) erreicht wird. In diesem ersten Zeitraum sinkt die Wasserdichte und das Wasservolumen steigt so weit, dass das Verdunsten von Wasser nicht besonders groß ist. Damit wird zuerst eine Steigung des Wassersstands erwartet. Danach sinkt der Wasserstand mittels volumetrischen Siedens und Verdunstung am Wasserspiegel. Nach einem gewissen Zeitraum erreicht der Wasserspiegel die unterste Kante der Stahlstruktur. Danach wird die Wärme von der heißen Struktur nur auf die Atmosphäre übertragen und kein weiteres Sinken des Wasserspiegels ist zu erwarten.

Die Zeitverläufe des abnehmenden Wasserstandes für die Rechnungen mit grober (2 Zonen) und detaillierter Nodalisation (10 Zonen) sind in Abb. 3.17 visualisiert.

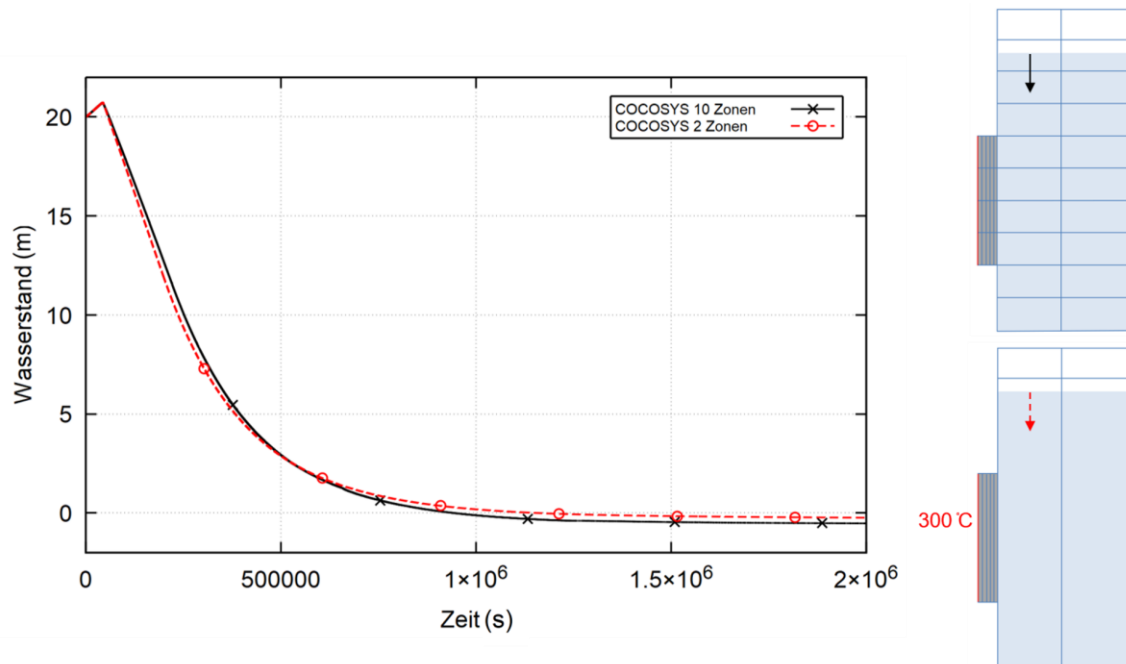


Abb. 3.17 Zeitverlauf des Wasserstands bei beheizter Struktur

Die zwei Nodalisationen führen zu sehr ähnlichen Verläufen des Wasserstands. Der Zeitverlauf der Wassertemperatur im Falle der feinen Nodalisation ist in Abb. 3.18 dargestellt (bei der groben Nodalisation kann natürlich keine Schichtung berechnet werden). Am Anfang ist die Temperatur bei der untersten COCOYS-Ebene etwas niedriger. Danach wurde eine sehr gute Durchmischung berechnet. Die Beheizung des Wassers ist in diesem Fall über mehrere Tage durchgeführt worden, so dass eine entsprechende Stratifikation zu erwarten war. Allerdings haben weitere Analysen gezeigt, dass die gute Durchmischung gegen Ende der Rechnung auf nicht-physikalische, sprich numerische Konvektionsschleifen zurückzuführen ist. Hier sind mit Weiterentwicklung des ATM_FULL-Ansatzes Verbesserungen zu erwarten.

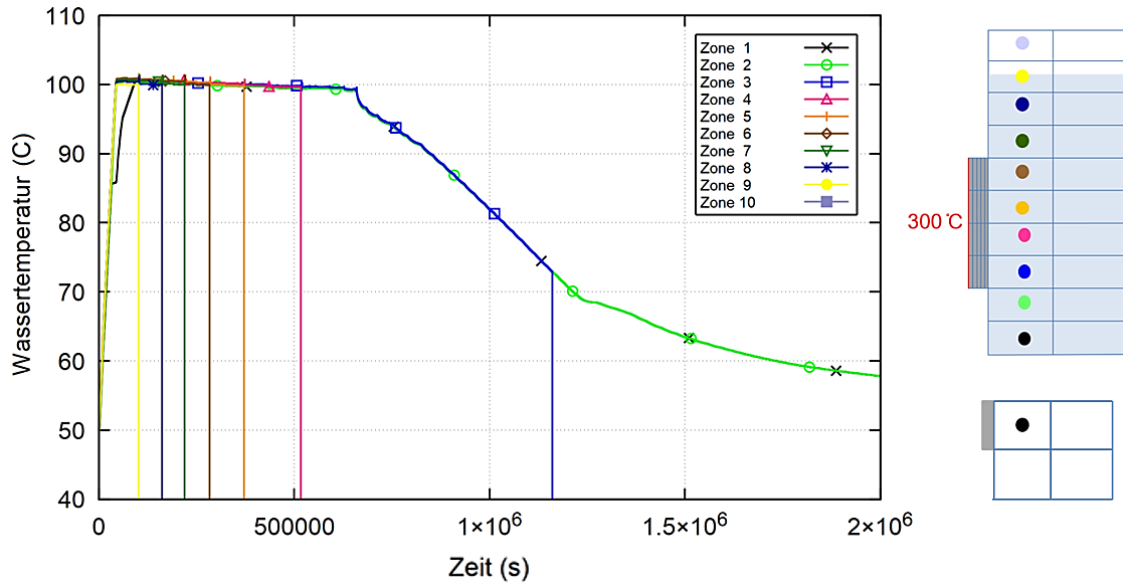


Abb. 3.18 Zeitverlauf der Zonentemperaturen bei feiner Nodalisierung im Fall der beheizten Struktur

Die Zeitverläufe der Wärmeübertragungskoeffizienten sind in Abb. 3.19, Abb. 3.20, Abb. 3.21, Abb. 3.22 und Abb. 3.23 visualisiert. Diese Abbildungen sind auf der Y-Achse logarithmisch skaliert. Die Werte für die zwei Wärmeübertragungskoeffizienten sind auf 0 gesetzt, wenn die entsprechende Struktur im Kontakt mit weniger als 5 cm Wasser ist.

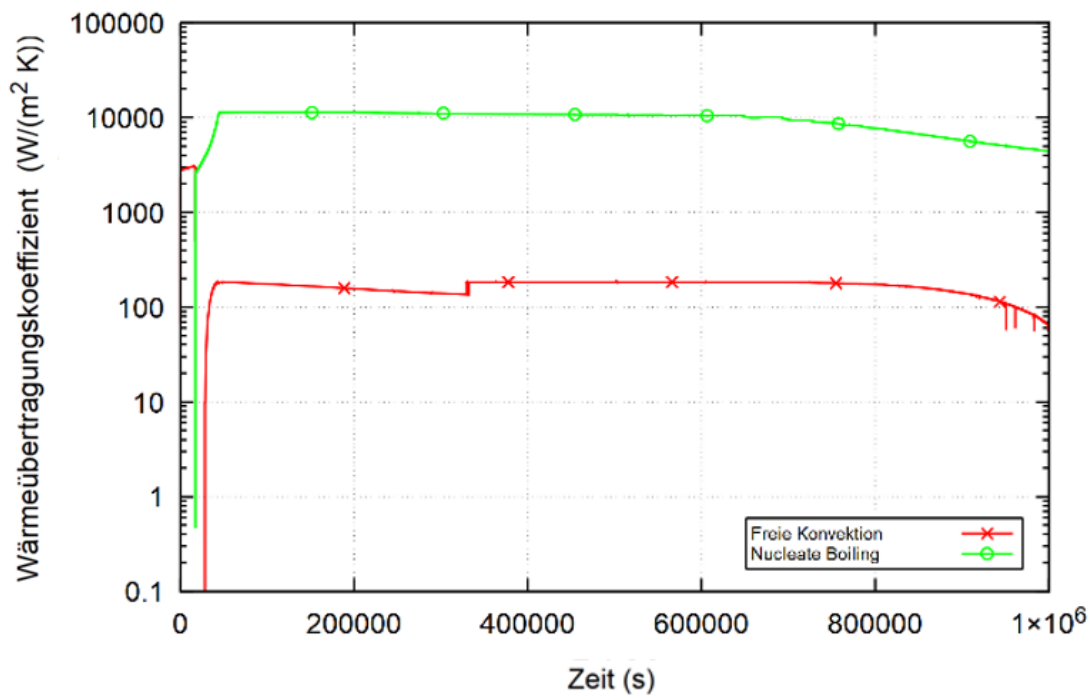


Abb. 3.19 Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei grober Nodalisierung

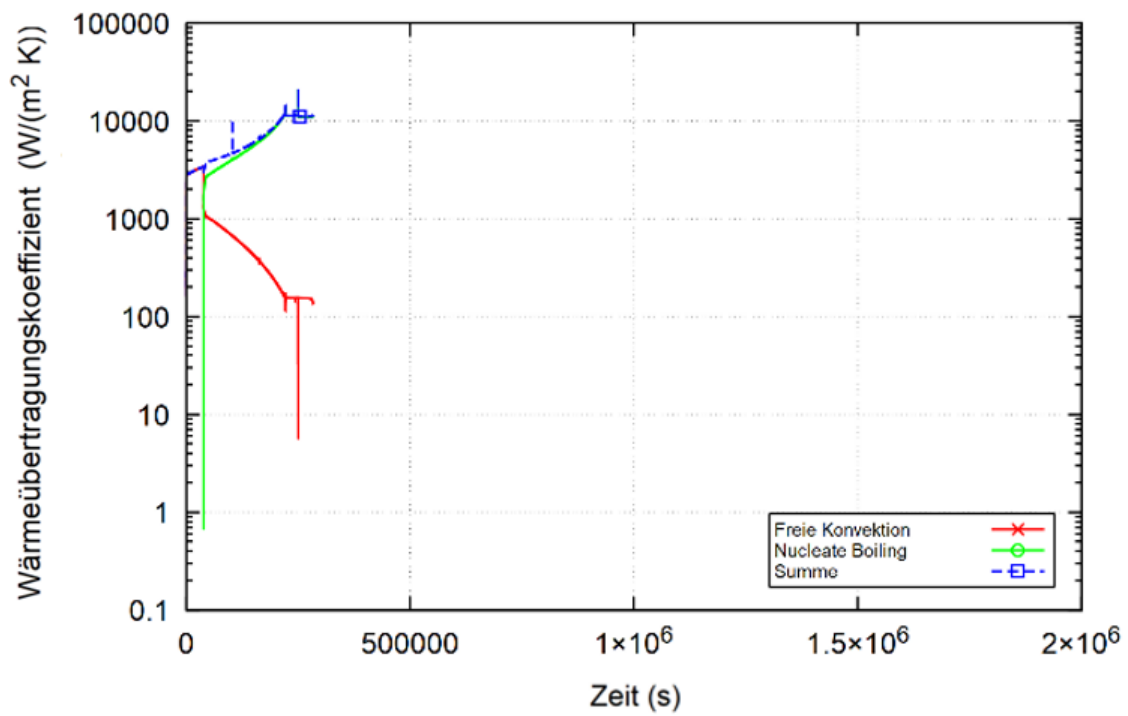


Abb. 3.20 Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (oberste Struktur)

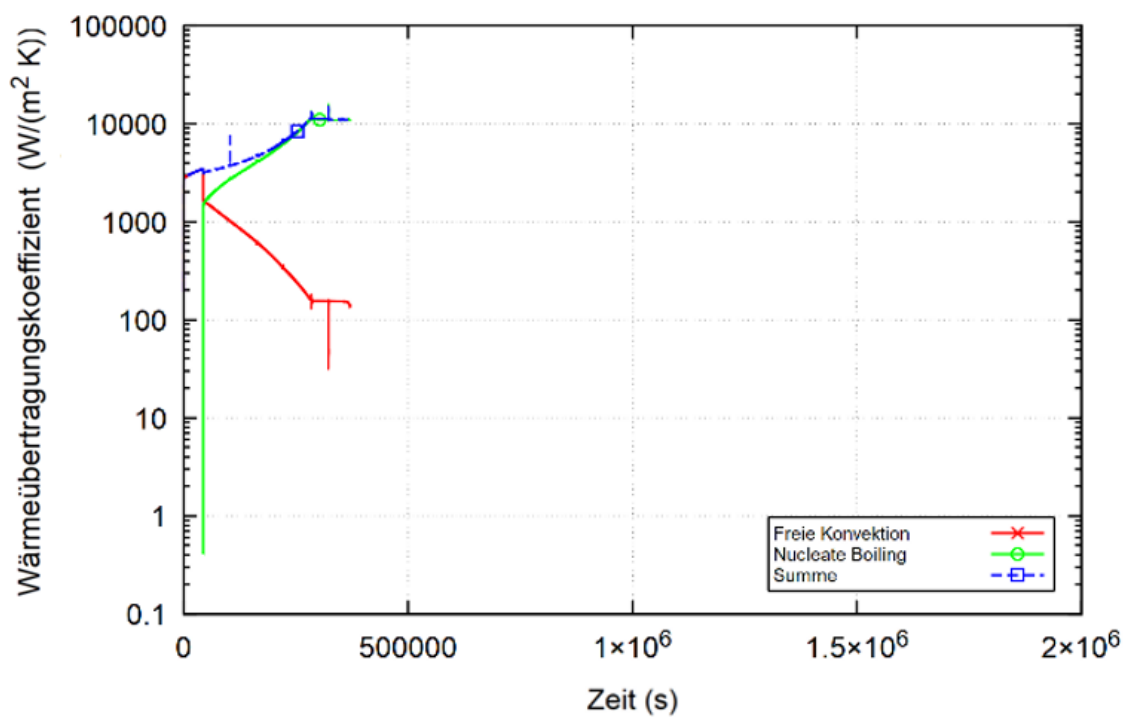


Abb. 3.21 Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (zweite Struktur von oben)

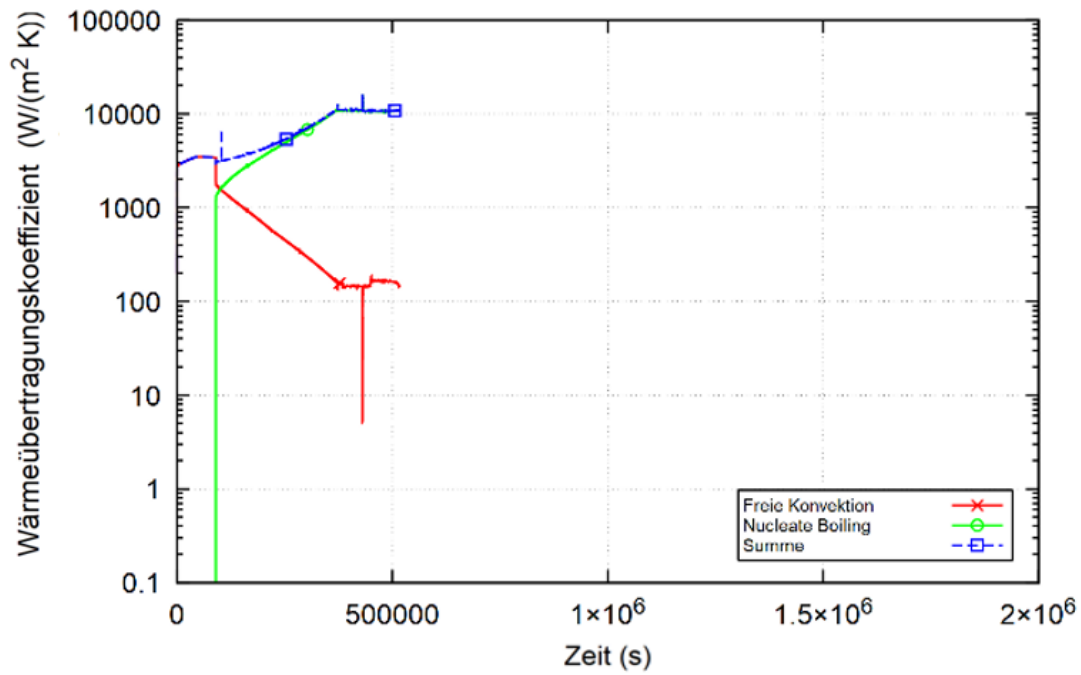


Abb. 3.22 Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feinere Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (dritte Struktur von oben)

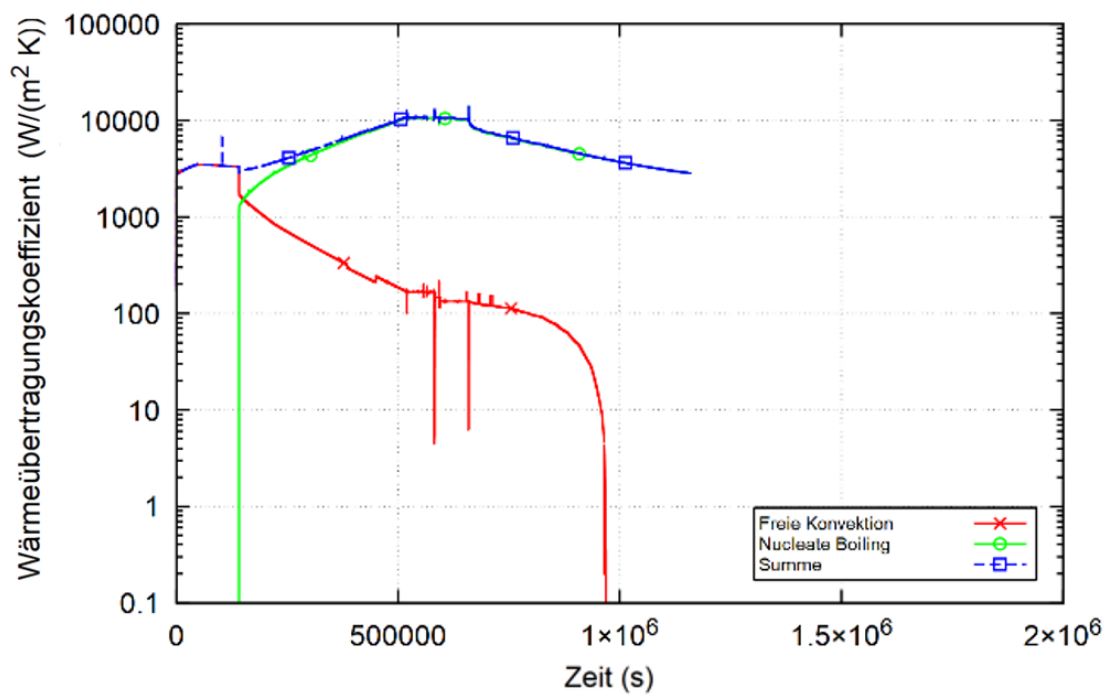


Abb. 3.23 Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten an der untersten Zone bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (unterste Struktur)

Im Fall der feinen Nodalisierung, werden die Zonen von oben nach unten eine nach dem anderen ausgetrocknet. Deswegen sind die Wärmeübertragungskoeffizienten für unterstehende Strukturen für einen längeren Zeitraum größer als 0. Die Abbildungen zeigen, dass der Wärmetransport vom Blasensieden dominiert wird.

Diese Simulation ist numerisch stabil gelaufen. Um die numerische Stabilität von ATM_FULL weiter zu analysieren, wurden Parameterstudien mit einer Variation der Geometrie, der Nodalisierung, der Anfangs- und Randbedingungen sowie numerischer Kriterien (z. B. maximaler Zeitschritt und Fehlerbegrenzung) durchgeführt. Die Ergebnisse stimmen in den meisten Fällen mit analytischen Näherungslösungen sehr gut überein. Es zeigte sich aber auch, dass einige Rechnungen numerisch instabil sind oder aufgrund von Modellbeschränkungen zum Programmabsturz führen. Diese Fälle wurden analysiert und im neu aufgesetzten Versionskontrollsystem CI/CD Framework GitLab dokumentiert.

3.1.2.2.3 Fazit

Mit dem aktuellen Entwicklungsstand von ATM_FULL sowie ROH ist es möglich, einige anlagenrelevante Geometrien von Wasserpools stabil zu simulieren. Vergleiche mit analytischen Abschätzungen haben gezeigt, dass der Wasserspiegel insbesondere bezüglich des asymptotischen Verlaufs die Erwartungen sehr gut trifft. Es gibt allerdings Szenarien mit schnellerer Dynamik, die nur mit einer groben Nodalisierung simuliert werden können. Daher gibt es noch Entwicklungsbedarf, um derartige Szenarien stabil mit COCOSYS abbilden zu können. Außerdem können die Temperaturstratifikation und der Wasserdampf innerhalb des Wasserpools nur sehr bedingt betrachtet werden. Für Unfallszenarien, bei denen diese physikalischen Phänomene von einer hohen Relevanz sind, muss COCOSYS noch weiterentwickelt werden.

Das Wassersieden auf Strukturen bis zum nuklearen Sieden wird von COCOSYS stabil simuliert. Eine weitere Validierung von den Korrelationen in den Modulen CO1 sowie ROH ist allerdings für große Wasserpools noch nötig. Diese Korrelationen basieren auf physikalischen Experimenten mit deutlich kleineren Geometrien (und bei kleineren Rayleigh Kennzahlen). Um Filmsieden mit COCOSYS zu untersuchen, sind Weiterentwicklungen nötig. Derartige Phänomene können nicht mit den bisher entwickelten Korrelationen korrekt simuliert werden.

3.1.2.3 Anwendung von CoPool auf den Wärmetransport von einem typischen SMR-Containment an den äußeren Wasserpool

3.1.2.3.1 Erstellung einer typischen SMR-Geometrie

Im Folgenden soll untersucht werden, ob und wie sich CoPool für die Berechnung des Wärmetransportes eines typischen SMR-Containments an den umgebenden Wasserpool eignet. Hierzu wurde ein CoPool-Datensatz mit einer SMR-Geometrie erstellt, die an die NUWARD™-Geometrie angelehnt ist (siehe Abb. 3.24). Das Containment ist dabei vollständig in einen Wasserpool eingetaucht. Dieses ist typisch für mehrere SMR-Designs wie z. B. NUWARD™, NuScale /IAEA 20/. Vom NUWARD™-Design wurden die groben Größenordnungen (Höhe, Durchmesser des Containments, Größe des Wasserpools) übernommen. Dazu konnte auf entsprechende Vorarbeiten im Rahmen des EU-Projekts ELSMOR zurückgegriffen werden. Die Geometrie wurde stark vereinfacht, so ist z. B. das Containment nur durch einen einfachen Zylinder repräsentiert (siehe Abb. 3.24 rechts).

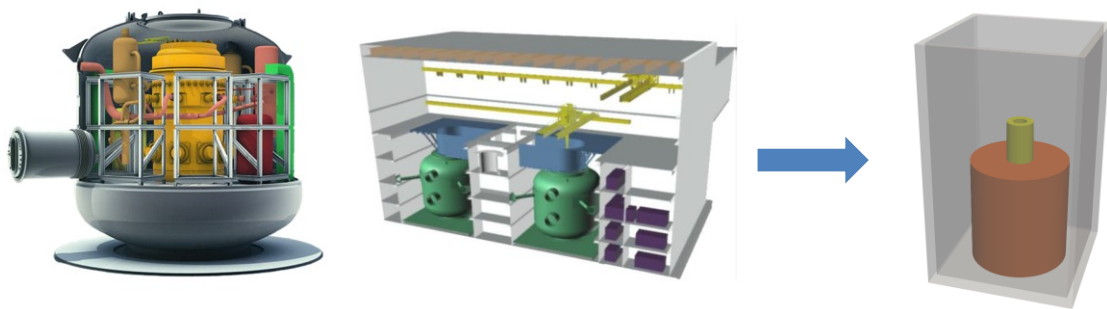


Abb. 3.24 Erstellung einer an den NUWARD™ SMR angelehnten Geometrie für Co-Pool

3.1.2.3.2 Durchführung einer CoPool-Stand-alone-Rechnung

Zunächst wurde nur eine einfache Stand-alone-Rechnung mit CoPool durchgeführt. Dazu wurden die Randbedingungen aufgeprägt. Für die Innenseite des Containments wurde eine konstante Temperatur gewählt (133 °C, dies entspricht den Sättigungsbedingungen von Dampf bei 3 bar). Ansonsten wurden für die erste Berechnung nur adiabate Randbedingungen gewählt (an der Wasseroberfläche und an den Beton-Außenseiten). Weiterhin wurden Monitorpunkte zur Überwachung von Temperaturen und Strömungsgeschwindigkeiten eingefügt (siehe Abb. 3.25). Die Monitorpunkte P1 bis P6 befinden sich in der Mitte des Strömungskanals zwischen Containment und Betonwand; sie haben

eine unterschiedliche Höhe (P1 bei 10 m, P6 bei 20 m). Die Monitorpunkte P7 bis P12 sind auf einer Höhe (10 m), sie gehen aber immer weiter auf die Containment-Wand zu.

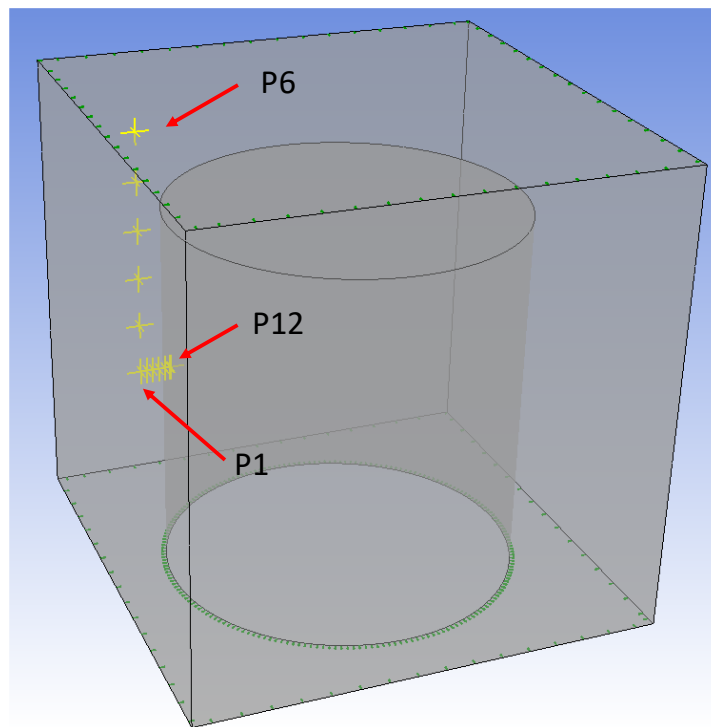


Abb. 3.25 Position der Monitorpunkte im Wasserpool

Mit diesem CoPool Stand-alone-Datensatz wurde eine erste Berechnung durchgeführt. In Abb. 3.26 sind die Temperaturen und Vertikalgeschwindigkeiten im Wasser zum Zeitpunkt $t = 500$ s dargestellt. Es zeigt sich, dass sich das Wasser nahe der Containment-Wand aufheizt und das warme Wasser dann nach oben steigt. Hier entsteht eine Schichtung mit höheren Temperaturen an der Wasseroberfläche. Abb. 3.27 zeigt den Temperaturverlauf an unterschiedlichen Monitorpunkten. Am höchsten ist die Temperatur am Monitorpunkt P6 nahe der Wasseroberfläche. Insgesamt verläuft der Temperaturanstieg an den einzelnen Monitorpunkten aber parallel. Abb. 3.28 zeigt die vertikale Strömungsgeschwindigkeit an unterschiedlichen Monitorpunkten. Positive Werte entsprechen hierbei einem Auftrieb des Wassers (durch höhere Temperaturen / Dichteunterschiede). Die höchsten Strömungsgeschwindigkeiten finden sich am Monitorpunkt P12 nahe der (warmen) Containment-Wand. Hier ist der Auftrieb besonders stark. In der Mitte des Strömungskanal bei Monitorpunkt P1 finden sich leicht negative Werte. Die Strömung geht hier nach unten.

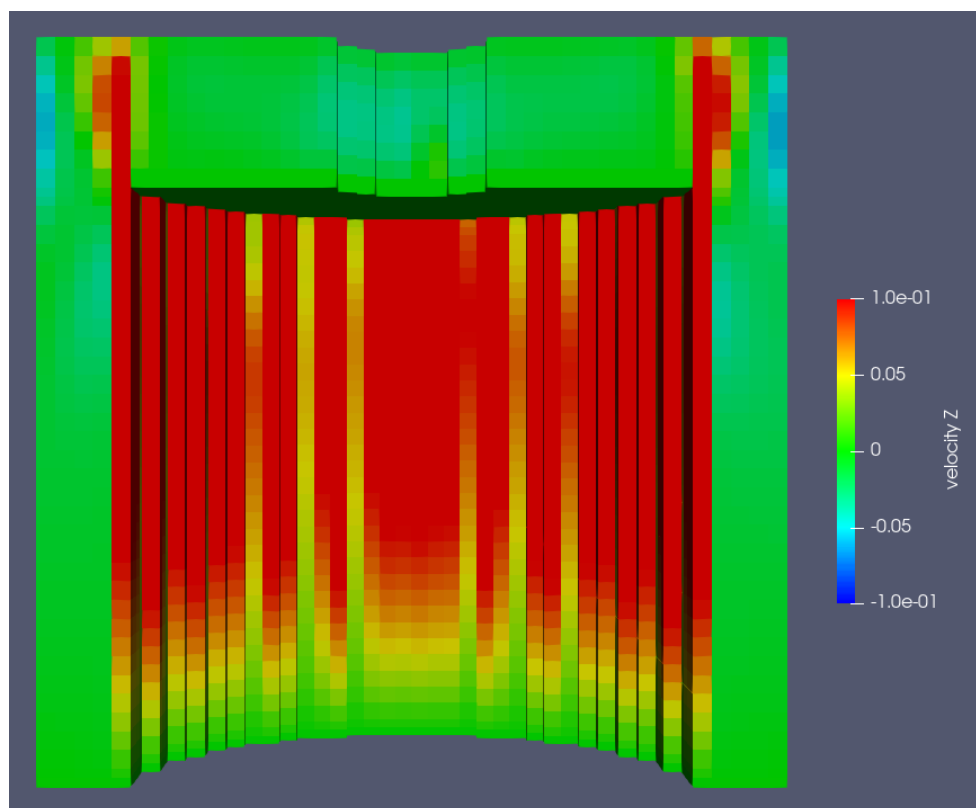
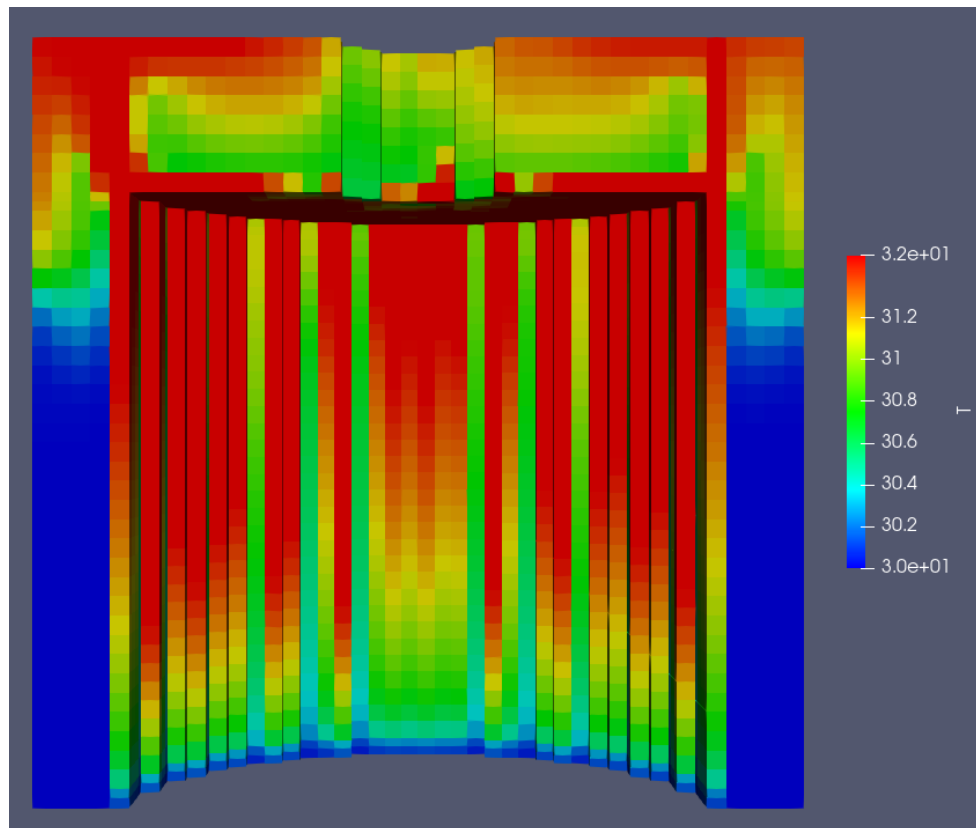


Abb. 3.26 Temperaturen in °C (oben) und Vertikalgeschwindigkeiten in m/s (unten) bei $t = 500$ s

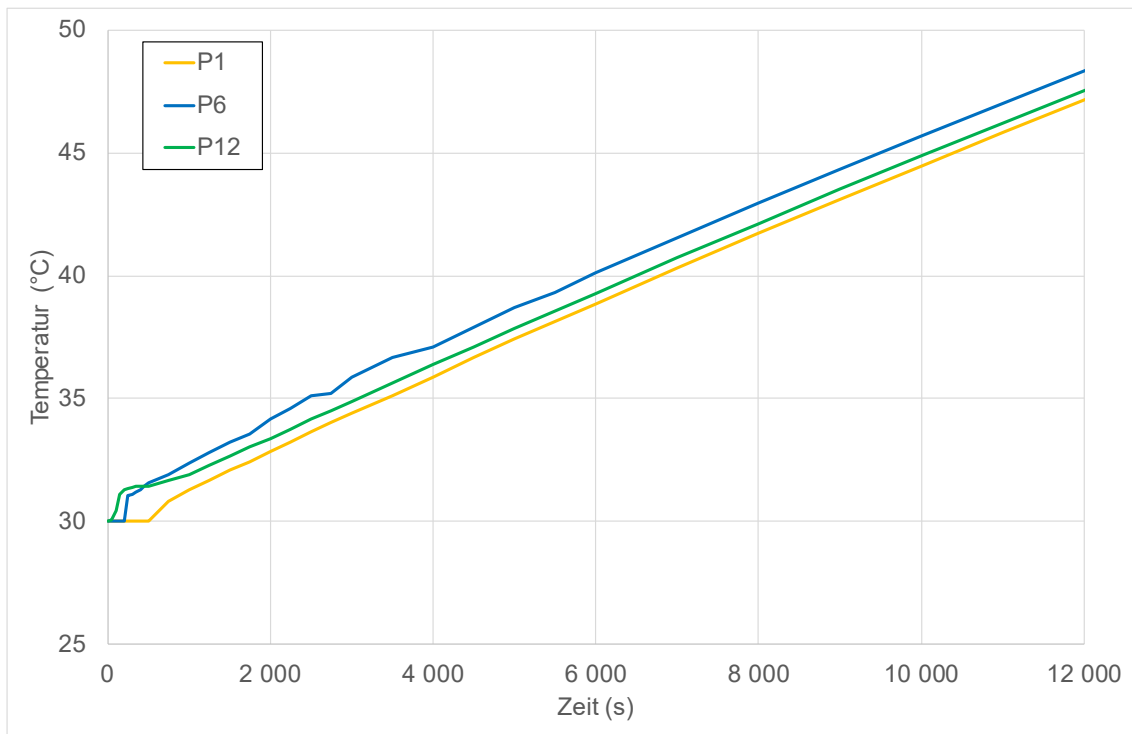


Abb. 3.27 Temperaturverlauf an unterschiedlichen Monitorpunkten (P1, P6, P12, vgl. Abb. 3.25)

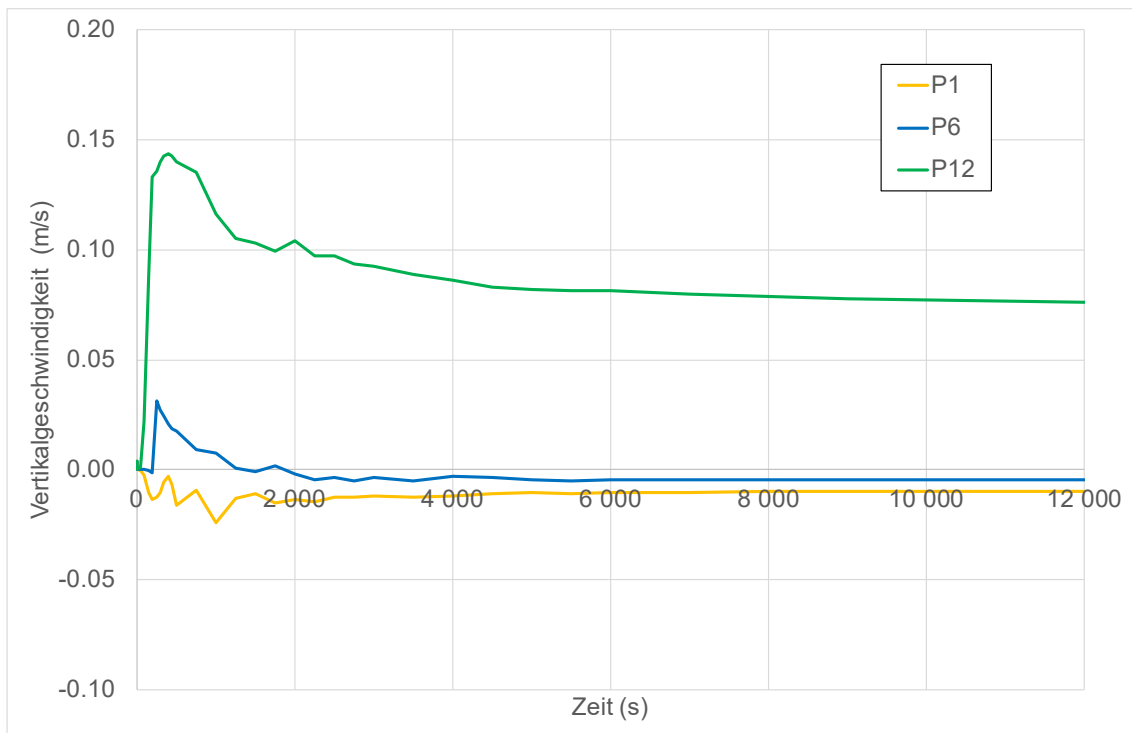


Abb. 3.28 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an unterschiedlichen Monitorpunkten (P1, P6, P12, vgl. Abb. 3.25)

Zur Untersuchung und Verringerung numerischer Fehler wurde das Fluidgitter im Rahmen einer Gitterstudie weiter verfeinert. Die Zellen im Wasser wurden in horizontaler Richtung von $0,50\text{ m} \times 0,50\text{ m}$ auf eine Größe von $0,25\text{ m} \times 0,25\text{ m}$ verkleinert (siehe Abb. 3.29). Die Rechenzeit für den aktuellen Fall hat sich dadurch von ca. einem Tag auf ca. zwei Tage etwa verdoppelt.

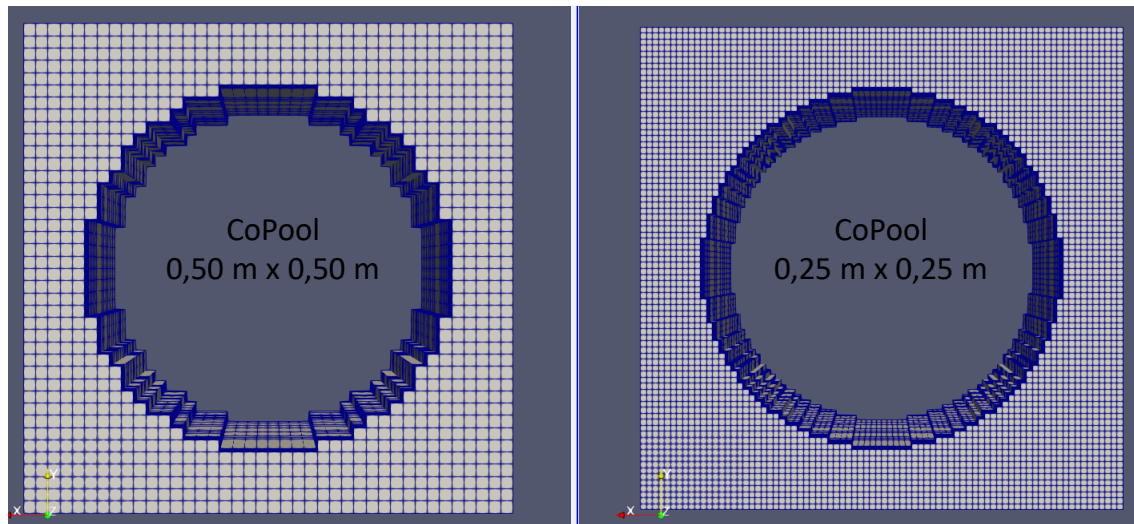


Abb. 3.29 Verfeinerung des CoPool-Gitters im Fluid (Schnitt / Ansicht von oben)

Abb. 3.30 zeigt, dass die Gitterverfeinerung nur einen geringen Effekt auf den Temperaturverlauf an den Monitorpunkten P1 und P12 hat (zur Position der Monitorpunkte vgl. Abb. 3.25). Insbesondere ist der Anstieg der Temperaturen unabhängig von der Gitterfeinheit. Die lokalen Strömungsgeschwindigkeiten können aber durchaus noch vom Gitter abhängig sein. Dieses wird in Abb. 3.31 gezeigt. Hier ist bei dem wandnahen Monitorpunkt P12 die vertikale Strömungsgeschwindigkeit beim feinen Gitter etwas höher als bei dem groben Gitter. Das korreliert mit der etwas höheren Temperatur an diesem Monitorpunkt (siehe Abb. 3.30). Die höhere Temperatur führt also zu einem etwas stärkeren Auftrieb. Auf eine weitere Gitterverfeinerung wurde aus zeitlichen Gründen verzichtet. In den weiteren Untersuchungen wird mit dem feineren Gitter weitergearbeitet.

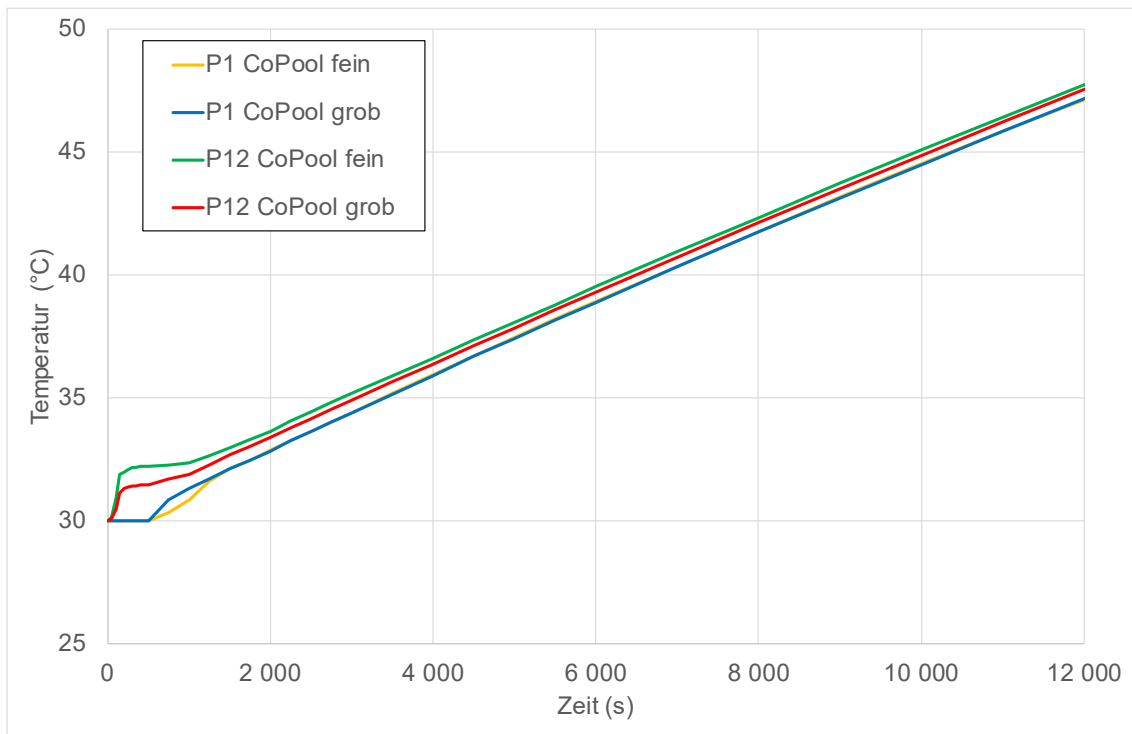


Abb. 3.30 Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an den Monitorpunkten P1 und P12 (vgl. Abb. 3.25)

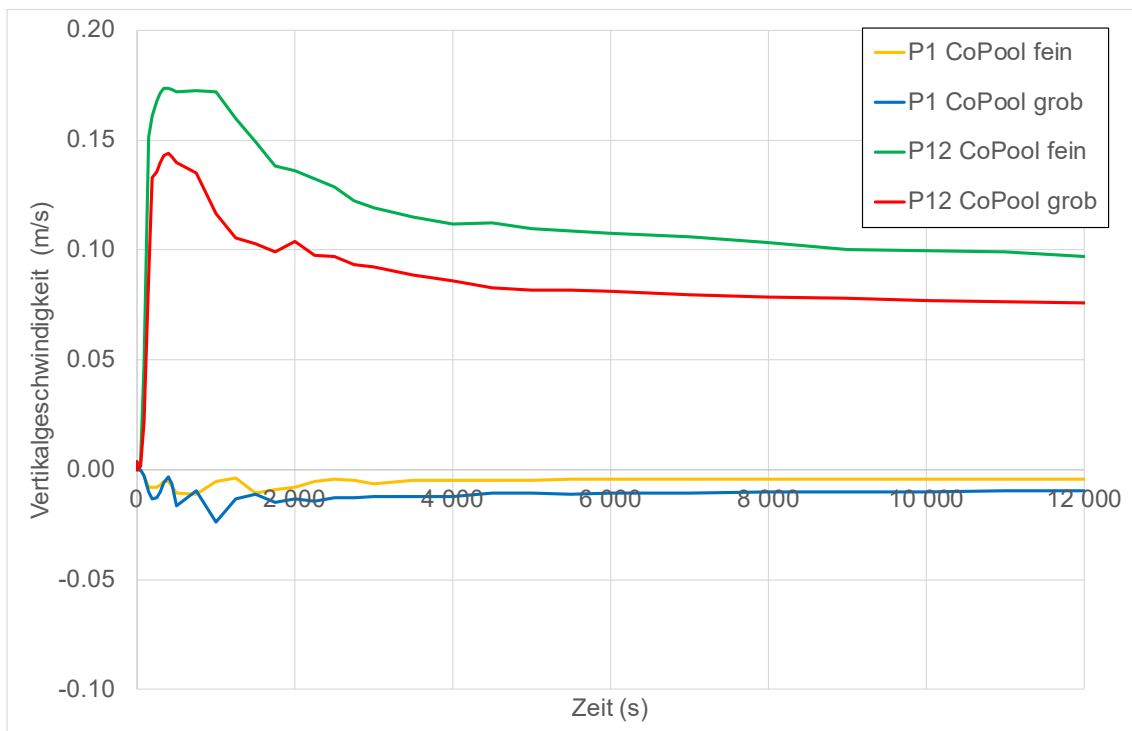


Abb. 3.31 Einfluss der Gitterfeinheit auf die vertikale Strömungsgeschwindigkeit an den Monitorpunkten P1 und P12

In CoPool gibt es unterschiedliche Möglichkeiten, den Wärmeübergang an der Grenzfläche Containment-Wand/Wasser berechnen zu lassen:

- BcType = 0: Temperatur-Randbedingung
- BcType = 1: Isolations-Randbedingung
- BcType = 4: Berechnung eines Wärmeübergangskoeffizienten

Bei den bisherigen Rechnungen wurde für das Containment die Temperatur-Randbedingung (BcType = 0) für die ganze Struktur verwendet, da eine feste Temperatur (133 °C) an der Containment-Innenseite vorgegeben wurde. Dadurch wurde der Wärmeübergang an der Containment-Außenseite (Grenzfläche Wand/Wasser) überschätzt. CoPool bietet die Möglichkeit, hier nur für die Außenseite eine andere Randbedingung zu wählen, somit wurde in einer neuen Berechnung BcType = 4 (Wärmeübergangskoeffizient / HTC) verwendet. Abb. 3.32 und Abb. 3.33 zeigen den Einfluss dieser geänderten Randbedingung auf den Temperaturverlauf und die vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten im Wasserpool. Insgesamt führt die Verwendung der neuen Randbedingung (BcType = 4) zu einem geringeren Energieeintrag ins Wasser und die Temperaturen an den Monitorpunkten steigen langsamer an (siehe Abb. 3.32). Die niedrigeren Temperaturen in Wandnähe führen dort auch zu einem etwas geringeren Auftrieb und damit zu etwas niedrigeren vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten (siehe Abb. 3.33, Monitorpunkt P12). Da die Randbedingung mit dem Wärmetransferkoeffizienten etwas realistischer ist, soll diese im Folgenden weiterverwendet werden.

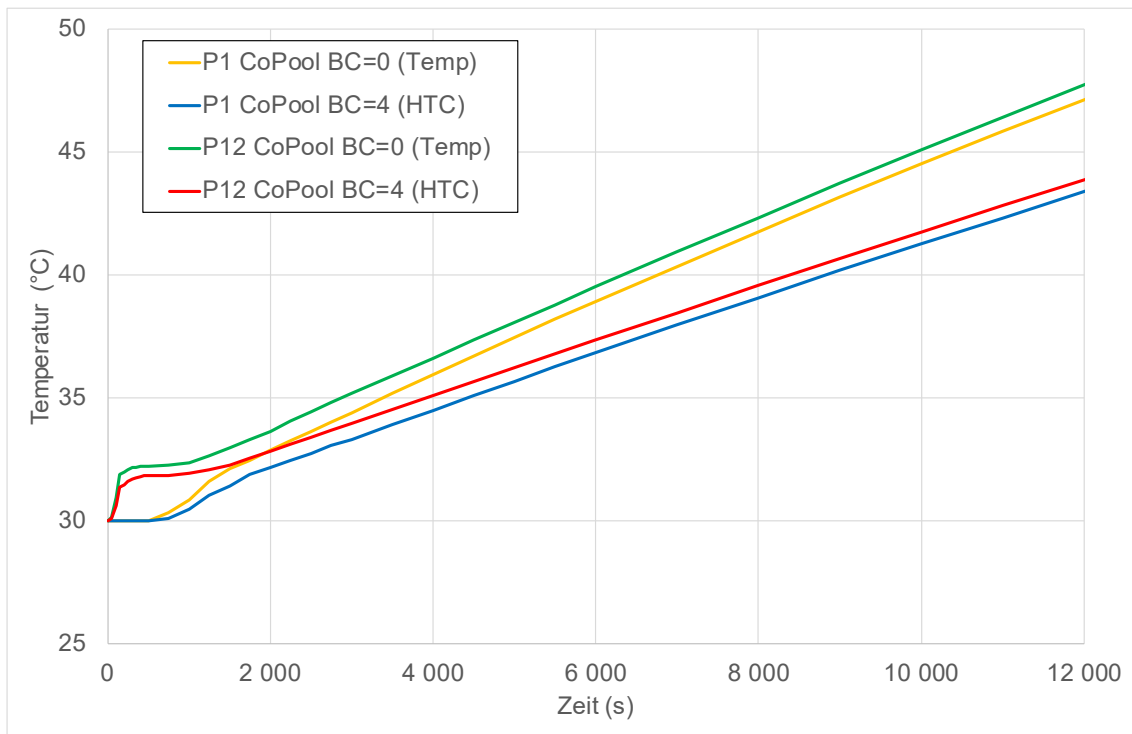


Abb. 3.32 Einfluss der Randbedingung auf den Temperaturverlauf an den Monitorpunkten P1 und P12

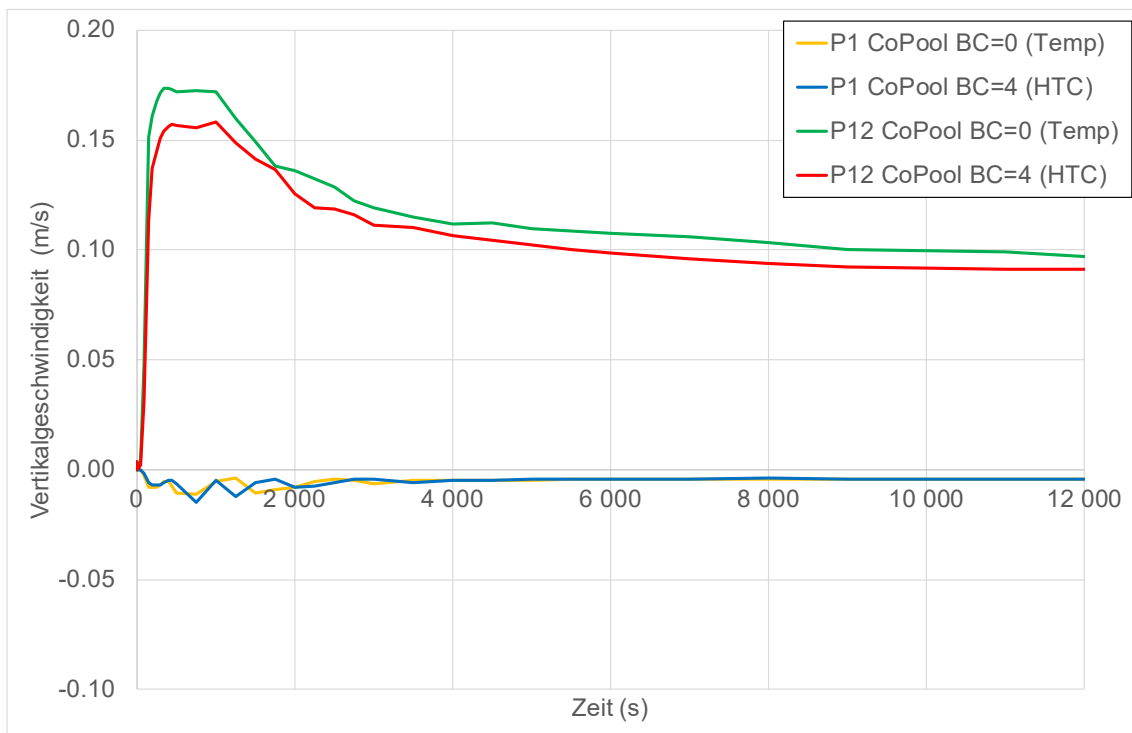


Abb. 3.33 Einfluss der Randbedingung auf die vertikale Strömungsgeschwindigkeit an den Monitorpunkten P1 und P12

3.1.2.3.3 Vergleichende CFX-Analysen

Zur Absicherung der CoPool-Berechnungsergebnisse wurde eine Berechnung mit einer kommerziellen CFD-Software (ANSYS CFX) durchgeführt. Abb. 3.34 zeigt einen Vergleich der beiden verwendeten Berechnungsgitter. Das CoPool-Gitter hat im Fluid 170.984 Elemente, das CFX-Gitter 952.364 Elemente. Während das Gitter bei CoPool aus gleichgroßen Elementen (Zellen) besteht, ist das CFX-Gitter ein adaptives Gitter, das zur besseren lokalen Auflösung, z. B. an den Strukturen, wesentlich feiner aufgelöst ist. Die Kantenlängen der Elemente reichen demzufolge von 5,6 mm bis zu 40,9 cm.

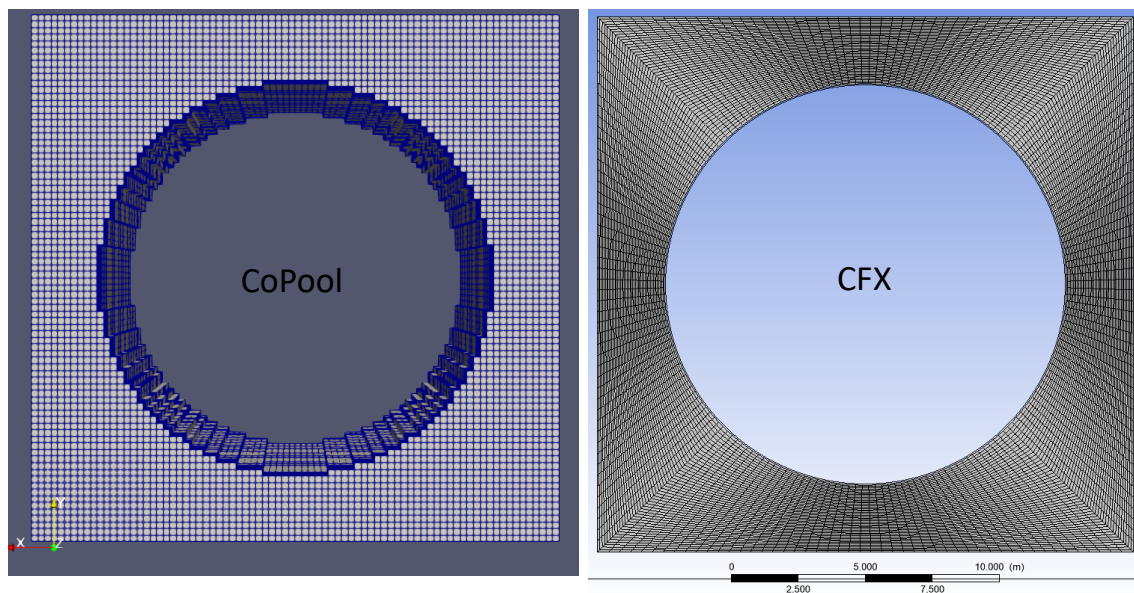


Abb. 3.34 Vergleich der Berechnungsgitter von CoPool und CFX

In Abb. 3.35 werden die Temperaturen in CFX und CoPool bei $t = 500$ s miteinander verglichen. Hier wurden vergleichbare Farbskalen gewählt, wobei die CFX-Ergebnisse in K und die CoPool Ergebnisse in $^{\circ}\text{C}$ dargestellt werden. Die Temperaturen in beiden Simulationen sind sehr ähnlich. Das Wasser erwärmt sich nahe der Containment-Wand und steigt von dort nach oben. Im oberen Bereich nahe der Wasseroberfläche entsteht eine Temperaturschichtung. In Abb. 3.37 werden die Vertikalgeschwindigkeiten miteinander verglichen. Der Auftrieb des warmen Wassers ist in beiden Simulationen recht ähnlich. Die abwärts gerichtete Strömung nahe der Betonwände sieht in CFX etwas signifikanter aus.

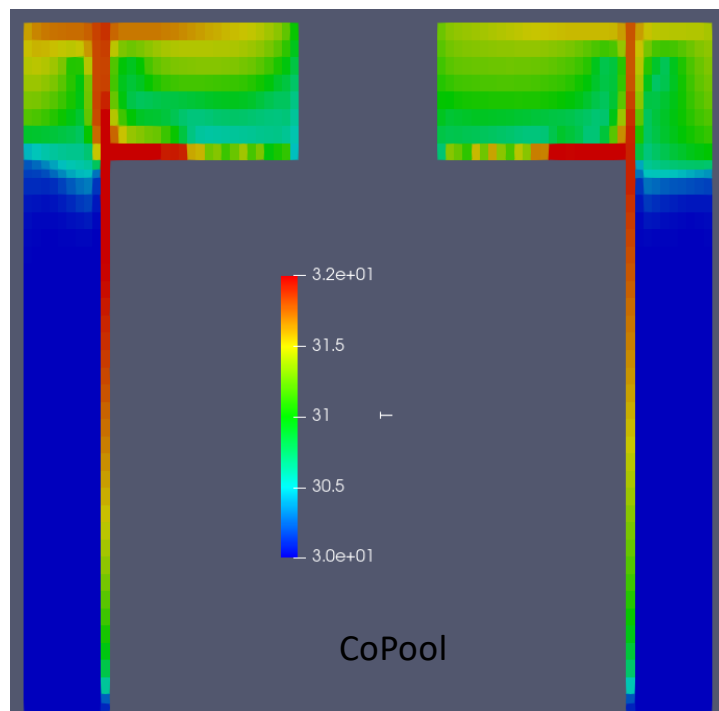
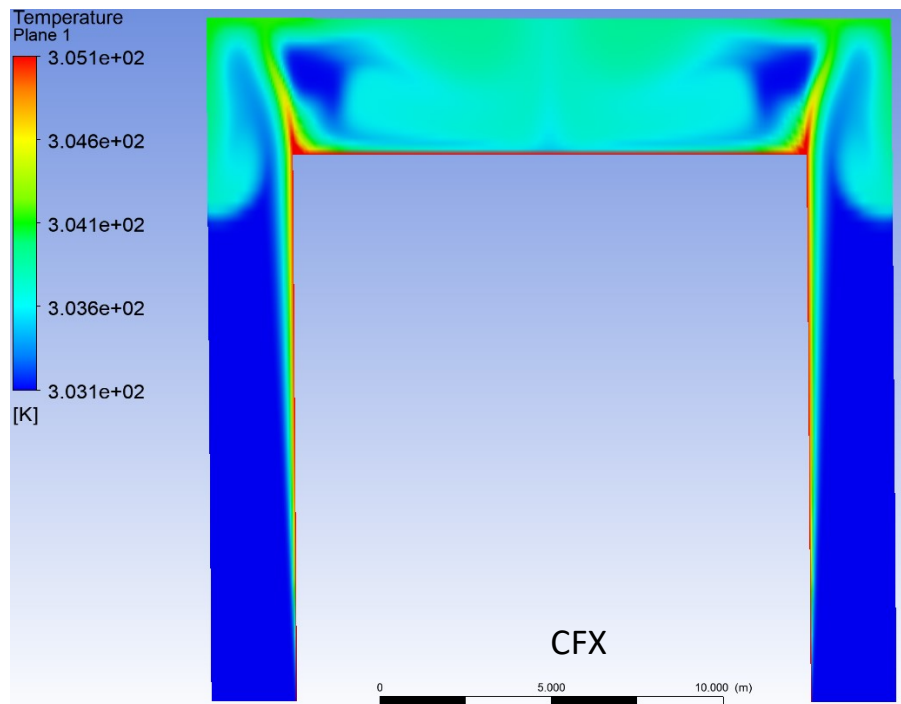


Abb. 3.35 Temperaturen in CFX (oben) und CoPool (unten) bei $t = 500$ s (Farbskala oben in K, unten in °C)

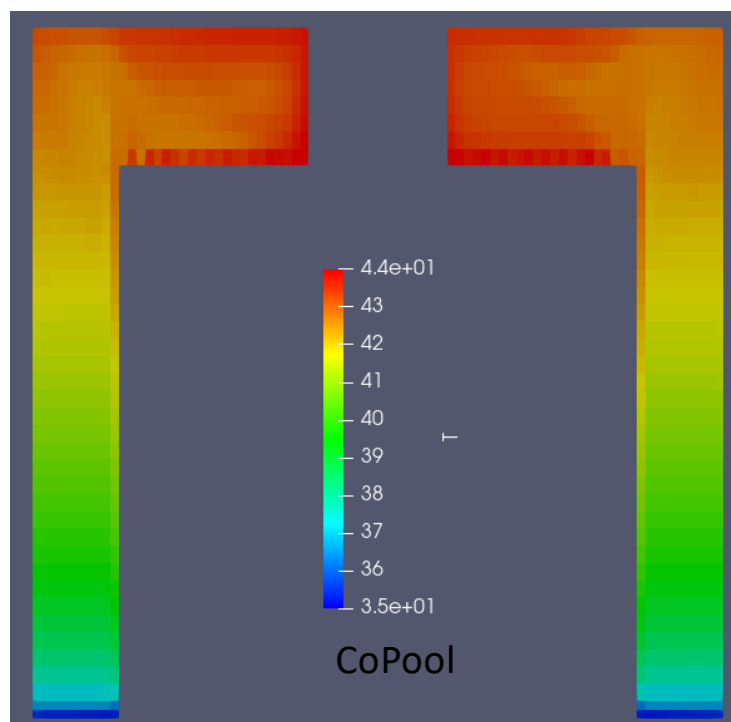
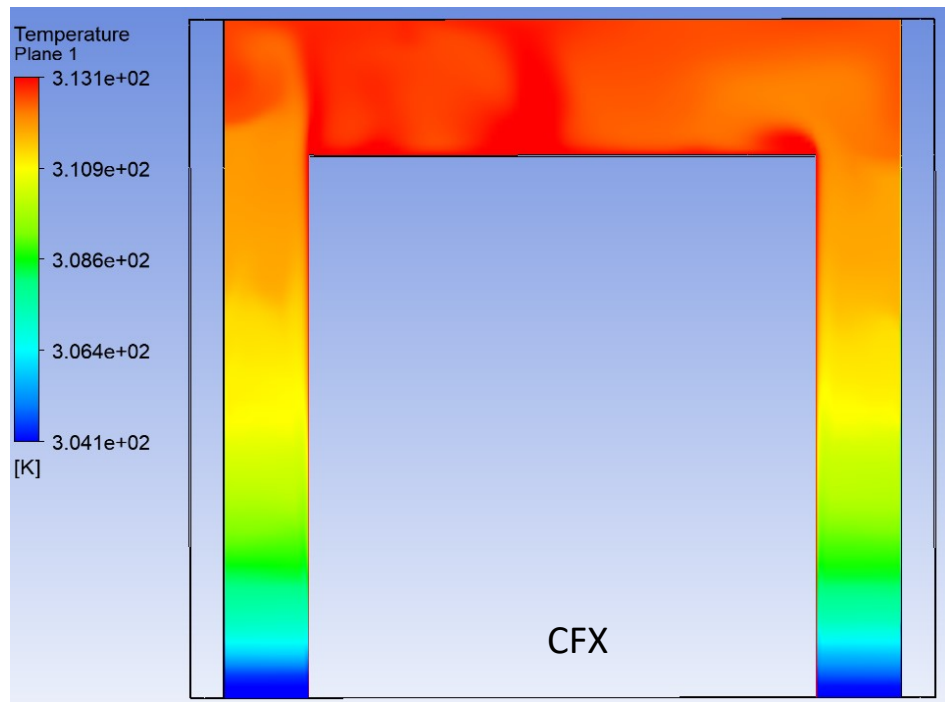


Abb. 3.36 Temperaturen in CFX (oben) und CoPool (unten) bei $t = 10.000$ s (etwas unterschiedliche Farbskalen, oben in K, unten in °C)

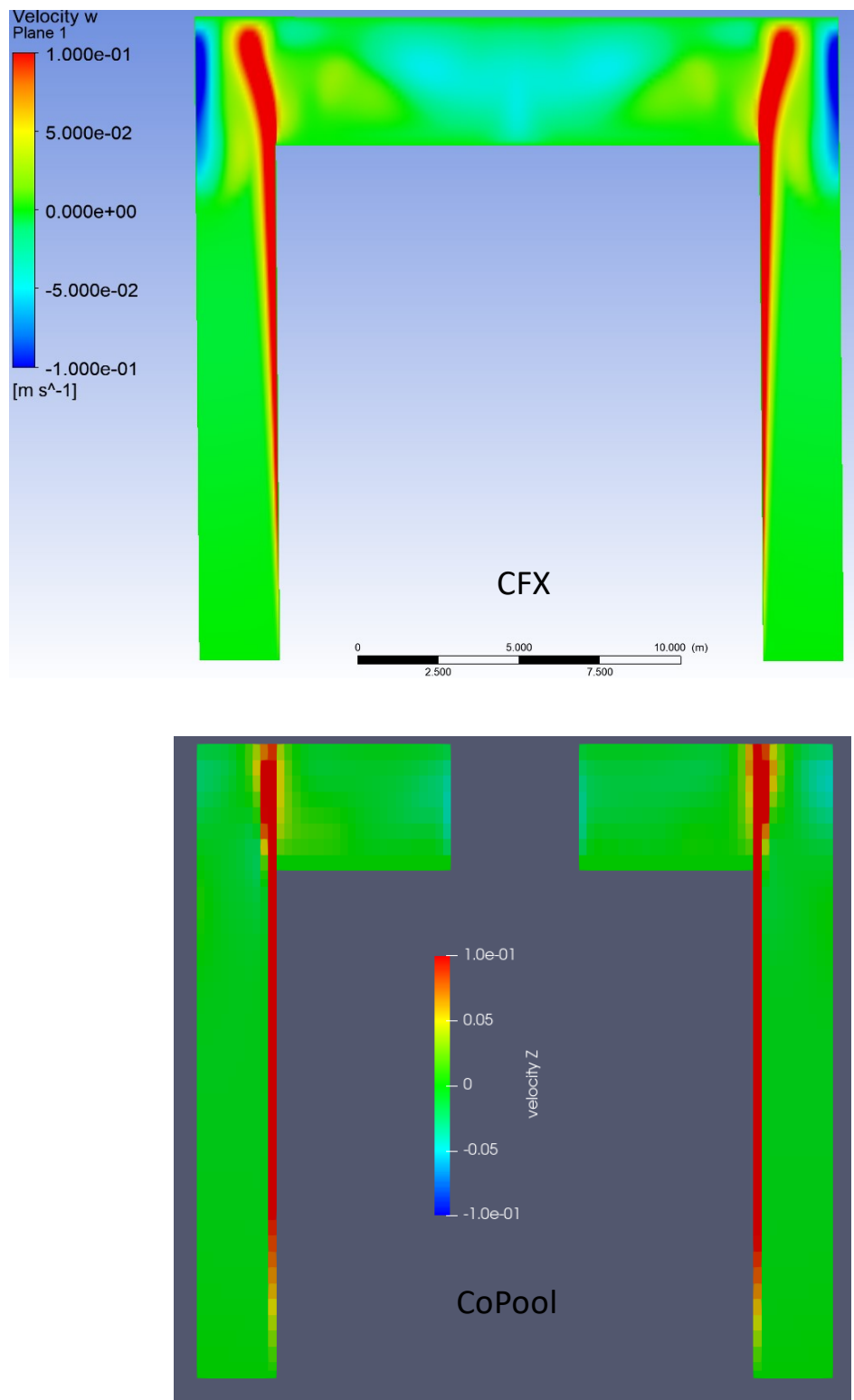


Abb. 3.37 Vertikalgeschwindigkeiten in m/s, CFX (oben) und CoPool (unten), bei $t = 500$ s

Es zeigt sich beim Vergleich, dass die Temperaturen in der CoPool-Rechnung an den Monitorpunkten P1 und P12 etwas schneller ansteigen als in CFX (siehe Abb. 3.38).

Somit berechnet CoPool einen etwas höheren Wärmetransfer von der Containment-Wand zum Wasser.

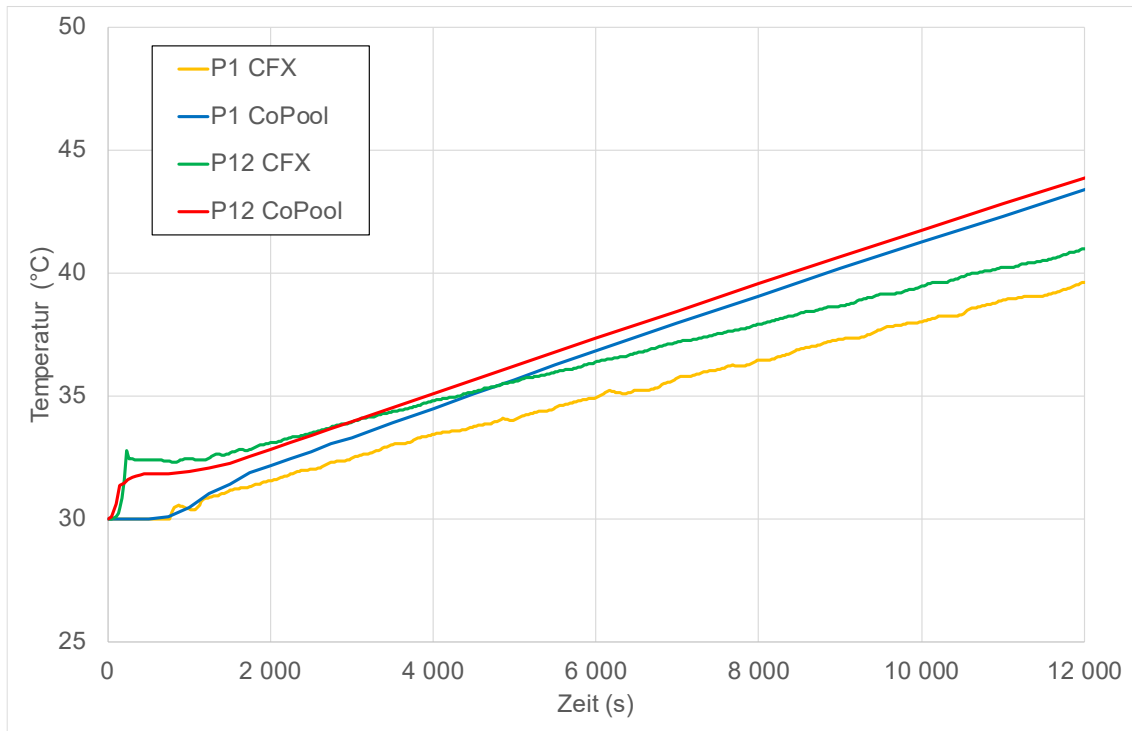


Abb. 3.38 Vergleich der mit CoPool und CFX berechneten Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12

In Abb. 3.39 werden die Temperaturen an den Containment-Außenseiten zum Zeitpunkt $t = 1.000$ s miteinander verglichen. Hier unterscheidet sich die Temperaturverteilung deutlich. Dieses hängt mit der unterschiedlichen Berechnung des Wärmetransfers von CFX und CoPool zusammen. Bei der Berechnung des Wärmetransferkoeffizienten verwendet CoPool eine charakteristische Länge. Dies ist ein anderes Vorgehen als in CFX, hier wird der Wärmestrom direkt aus den Materialdaten und den lokalen Strömungsparametern berechnet. Gemeinsam ist aber, dass die Maximaltemperaturen, die an der Containment-Außenseite schon zu diesem Zeitpunkt ($t = 1.000$ s) erreicht werden, deutlich über den mittleren Wassertemperaturen liegen. In CFX liegen die maximalen Temperaturen über 100 °C, in CoPool über 80 °C. Dieses ist deutlich höher als die an den Monitorpunkten beobachteten Temperaturen von ca. 33 °C zu diesem Zeitpunkt (siehe Abb. 3.38). Im Einzelfall können also bei niedrigen mittleren Wassertemperaturen im Pool schon kritische Siedetemperaturen an der Containment-Außenseite vorliegen. Dieses kann nur mit Hilfe von detaillierten CFX-Simulationen untersucht werden, die möglicherweise auch mehr Details der Oberfläche berücksichtigen.

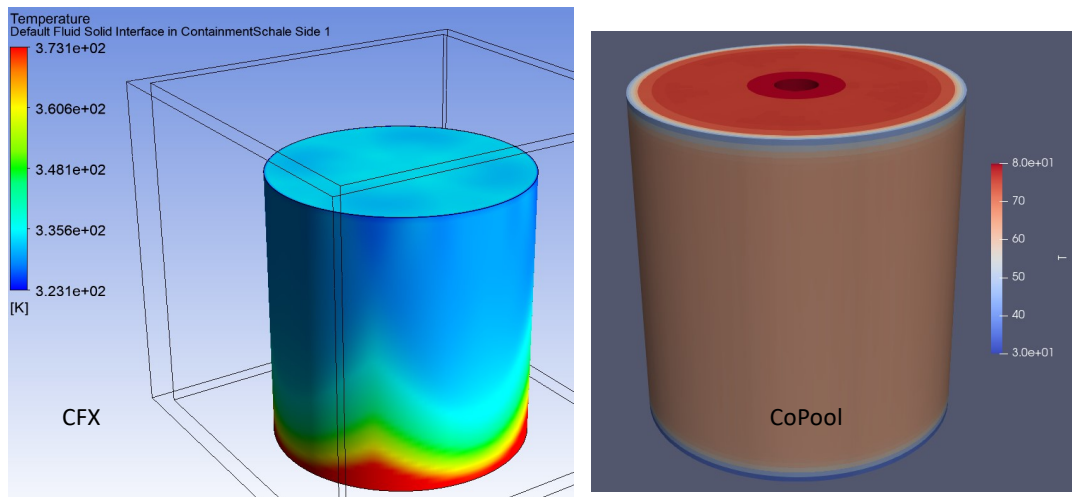


Abb. 3.39 Temperaturen an der Containment-Außenseite bei $t = 1.000$ s (Farbskala links in K, rechts in °C)

In Abb. 3.40 werden die vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten miteinander verglichen. Diese sind in CoPool ähnlich zu den von CFX berechneten Strömungsgeschwindigkeiten. Die etwas höheren Strömungsgeschwindigkeiten (gleich stärkerer Auftrieb) am Monitorpunkt P12 entsprechen den etwas höheren Temperaturen in CoPool an diesem Monitorpunkt (zur Position der Monitorpunkte vgl. Abb. 3.25).

Insgesamt findet sich an vielen Positionen eine gute Übereinstimmung der CoPool- und CFX-Ergebnisse. Dieses kann als gegenseitige Bestätigung und positive Absicherung der Ergebnisse angesehen werden.

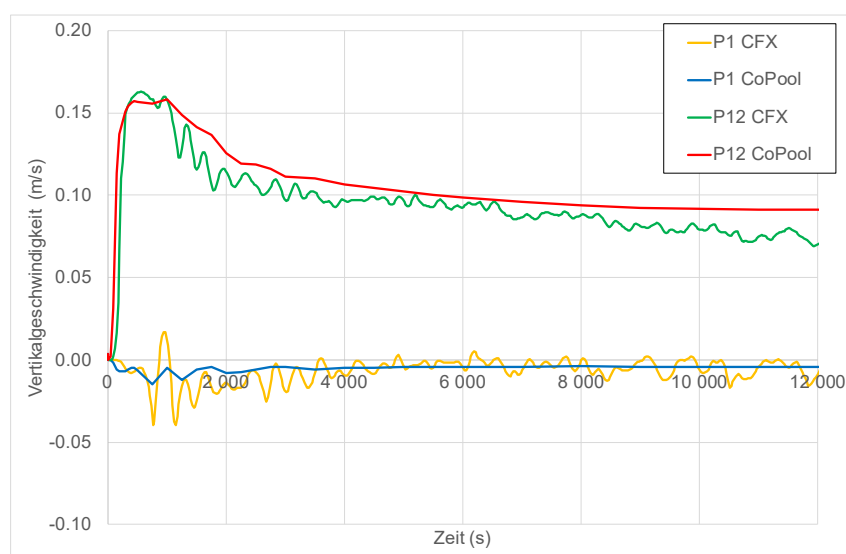


Abb. 3.40 Vergleich der mit CoPool und CFX berechneten vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an den Monitorpunkten P1 und P12

Der CFX-Datensatz wurde zusätzlich für eine Sensitivitätsstudie zu Unregelmäßigkeiten an der Containment-Struktur genutzt. Eine reale Containment-Struktur ist nicht ideal zylindrisch, sondern hat zahlreiche Unregelmäßigkeiten (Rohre, Ventile, Flansche etc. siehe Abb. 3.24). Um den Einfluss solcher Unregelmäßigkeiten zu untersuchen, wurde in einer weiteren generischen Rechnung in halber Höhe der Containment-Wand ein zusätzlicher Flansch mit der Breite und Höhe 20 cm x 20 cm als Hindernis im vollen Umfang um das Containment angenommen und in der CFX-Geometrie modelliert. Abb. 3.41 und Abb. 3.42 zeigen den Einfluss des Flansches auf die Strömungsgeschwindigkeiten und die Temperaturen zum Zeitpunkt $t = 500$ s. Hier lassen sich lokal kleinere Unterschiede in den Strömungsmustern und Temperaturverteilungen erkennen.

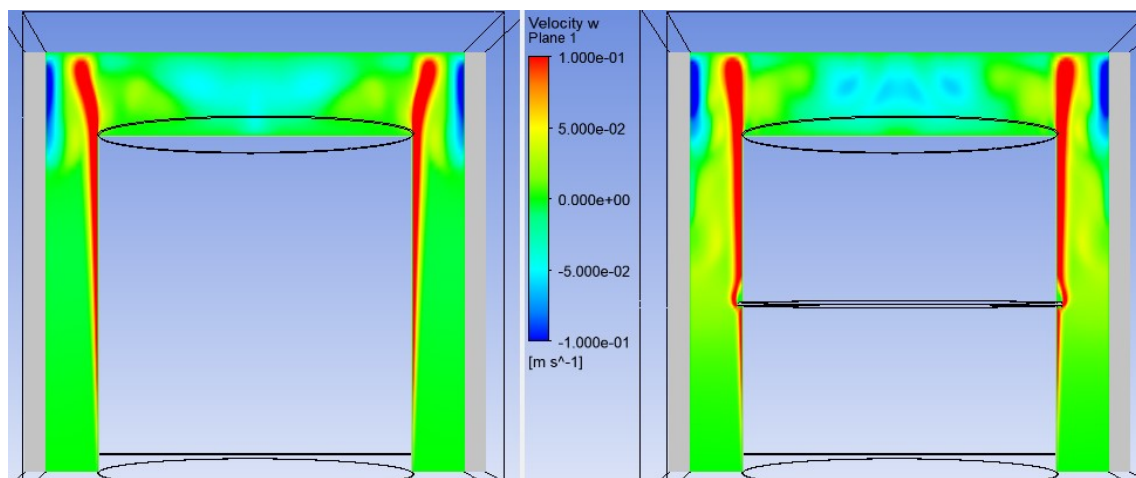


Abb. 3.41 Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten zum Zeitpunkt $t = 500$ s ohne Flansch (links) und mit Flansch (rechts)

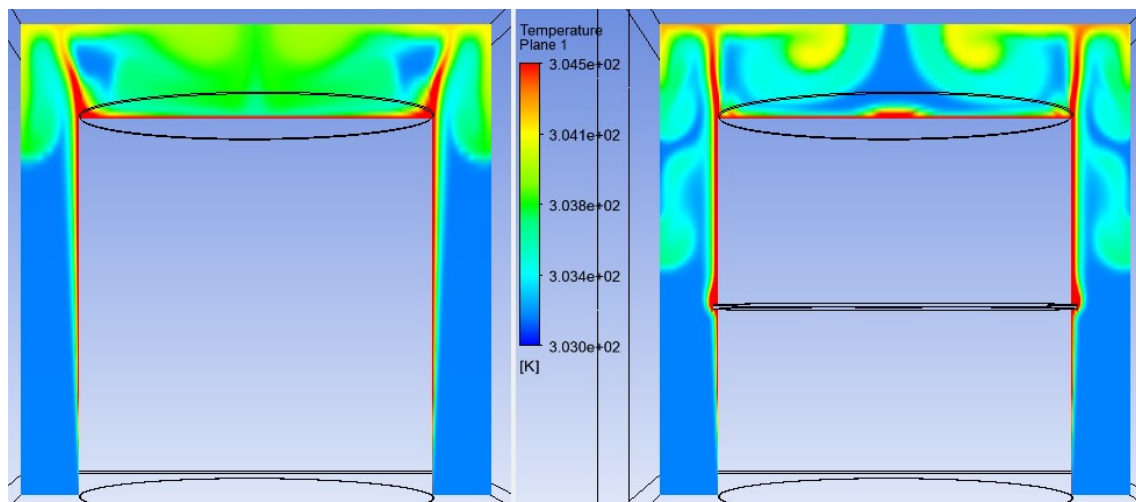


Abb. 3.42 Vergleich der Temperaturen zum Zeitpunkt $t = 500$ s ohne Flansch (links) und mit Flansch (rechts)

In Abb. 3.43 werden die Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 für die beiden Fälle miteinander verglichen (zur Position der Monitorpunkte vgl. Abb. 3.25). Hier zeigen sich nur kleine Unterschiede. Bei der Rechnung mit Flansch haben die Werte etwas stärkere Schwankungen. Der Temperaturanstieg ist aber sehr ähnlich, d. h., dass auch bei der Wandstruktur mit Flansch eine ähnliche Wärmemenge in den Wasserpool eingetragen wird.

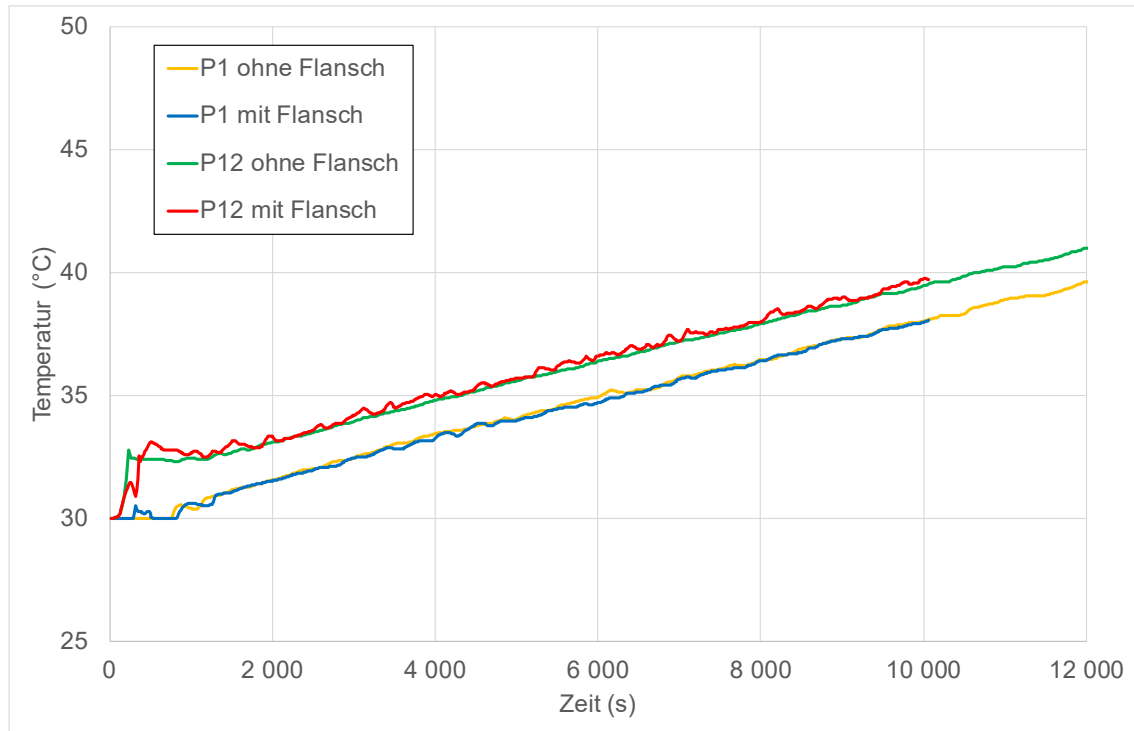


Abb. 3.43 Temperaturen bei den Rechnungen ohne und mit Flansch an den Monitorpunkten P1 und P12

In Abb. 3.44 finden sich die Temperaturen an den Containment-Außenseiten mit und ohne Flansch. Beide zeigen im unteren Bereich die höchsten Temperaturen, die wieder deutlich über den mittleren Wassertemperaturen liegen. Es gibt bei der Temperaturverteilung kleinere Unterschiede, die aber vermutlich auf die Veränderungen des Gitters in Wandnähe zurückzuführen sind.

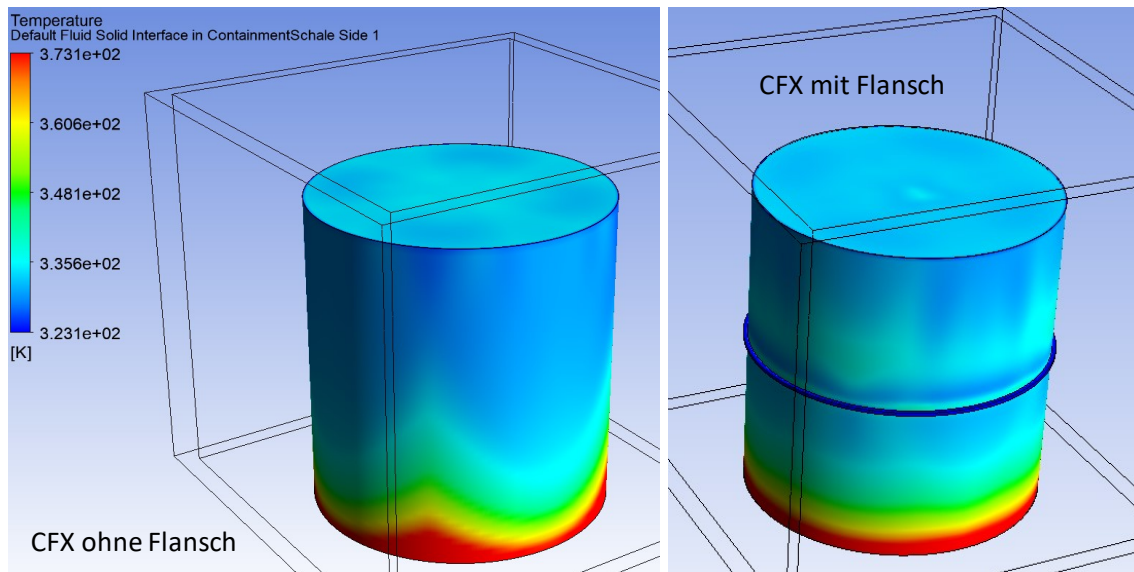


Abb. 3.44 Temperaturen an den Containment-Außenseiten mit und ohne Flansch

Auch bei den lokalen Strömungsgeschwindigkeiten finden sich kleinere Unterschiede (siehe Abb. 3.45). Qualitativ sind die Verläufe aber ähnlich. Insgesamt scheint der Einfluss des Flansches also klein zu sein.

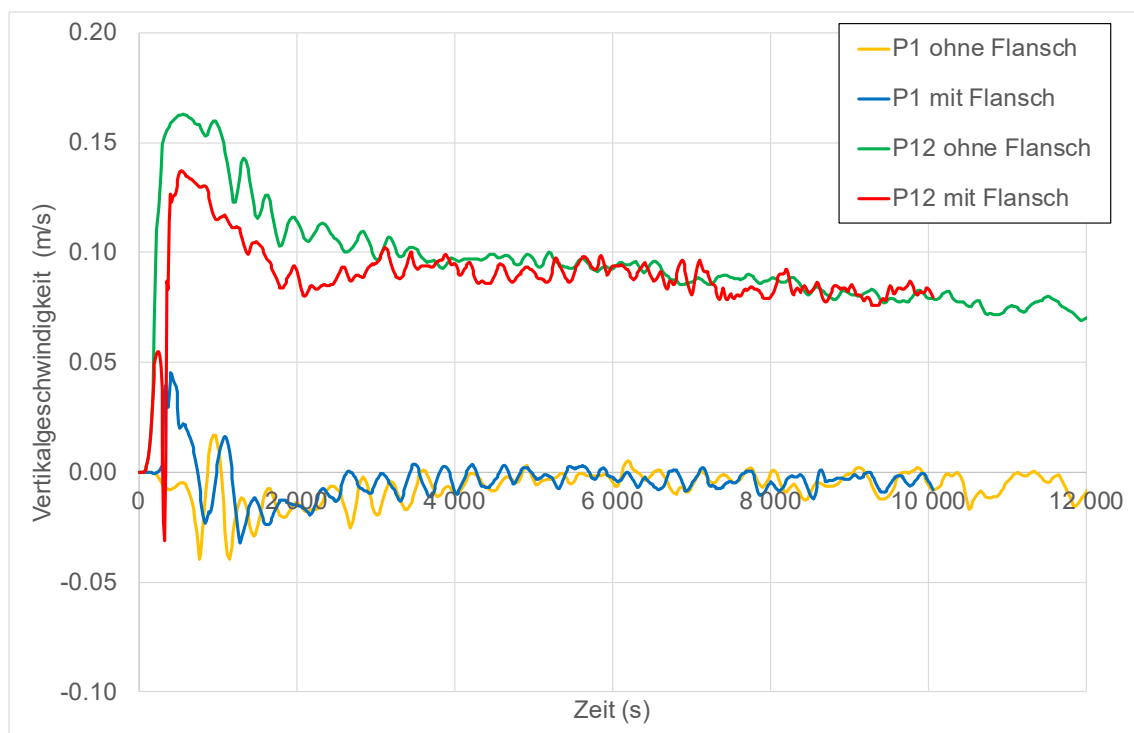


Abb. 3.45 Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten bei den Rechnungen ohne und mit Flansch an den Monitorpunkten P1 und P12

3.1.2.3.4 Durchführung von gekoppelten CoPool/COCOSYS-Rechnungen

Der für die CoPool-Stand-alone-Rechnung verwendete Datensatz wurde in einem weiteren Schritt an einen COCOSYS-Datensatz gekoppelt. Ziel der Kopplung ist, die Möglichkeit einer veränderlichen Einspeisung in das Containment (Massenstrom- und Enthalpie aus einem generischen Störfall) zu schaffen, die Rückwirkung des Wasserpools auf das Containment abzubilden und die Wechselwirkung mit der Atmosphäre an der Wasseroberfläche zu berücksichtigen. Abb. 3.46 zeigt den COCOSYS-Datensatz, der hierfür entwickelt wurde. Dieser ist stark vereinfacht:

- Das Containment ist nur durch eine COCOSYS-Zone (C1) repräsentiert.
- Die Kopplung des Containments an die Containment-Wände ist nur auf die Seitenwände beschränkt (keine Kopplung am Deckel).
- Das Wasser befindet sich in einer COCOSYS-Zone (R1).
- Darüber befindet sich noch eine weitere Atmosphären-Zone (R2).

Die beiden Kopplungs-Schnittstellen CoPool/COCOSYS befinden sich an der Innenseite der Containment-Wand und an der Wasseroberfläche.

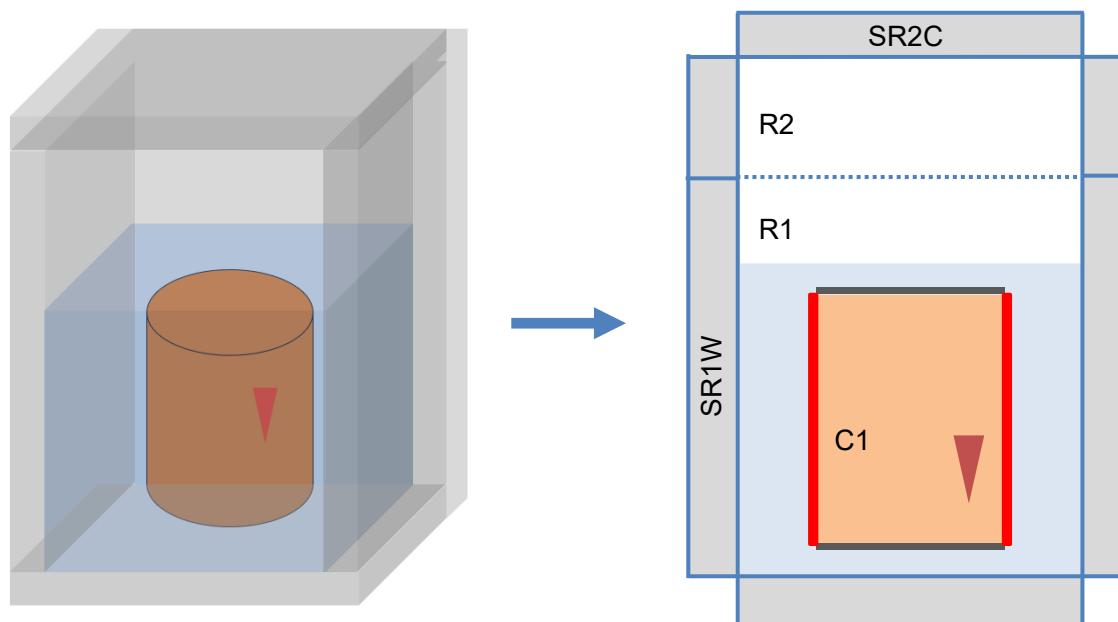


Abb. 3.46 COCOSYS-Nodalisierung (rechts) für die mit CoPool gekoppelte Rechnung

Als erster Schritt wurde eine Rechnung mit einer vorgegebenen Temperatur von 133 °C im Containment (Zone C1) durchgeführt. Um die Temperatur in der COCOSYS-Zone C1

konstant zu halten, wurde eine temperatur-geregelte Energieeinspeisung im COCOSYS-Input integriert. Diese Rechnung soll dann mit der Stand-alone-Rechnung mit der festen Temperatur-Randbedingung verglichen werden. Bei der Auswertung dieser Berechnung zeigt sich, dass die Wärmeabgabe an die Containment-Wand und von dort an den Wasserpool genauso funktioniert wie bei der Stand-alone-Rechnung (siehe Abb. 3.47). Im Postprocessor zeigt sich aber auch, dass die oberste Wasserschicht deutlich kälter bleibt als der restliche Wasserpool. Dieses Verhalten ist physikalisch nicht plausibel.

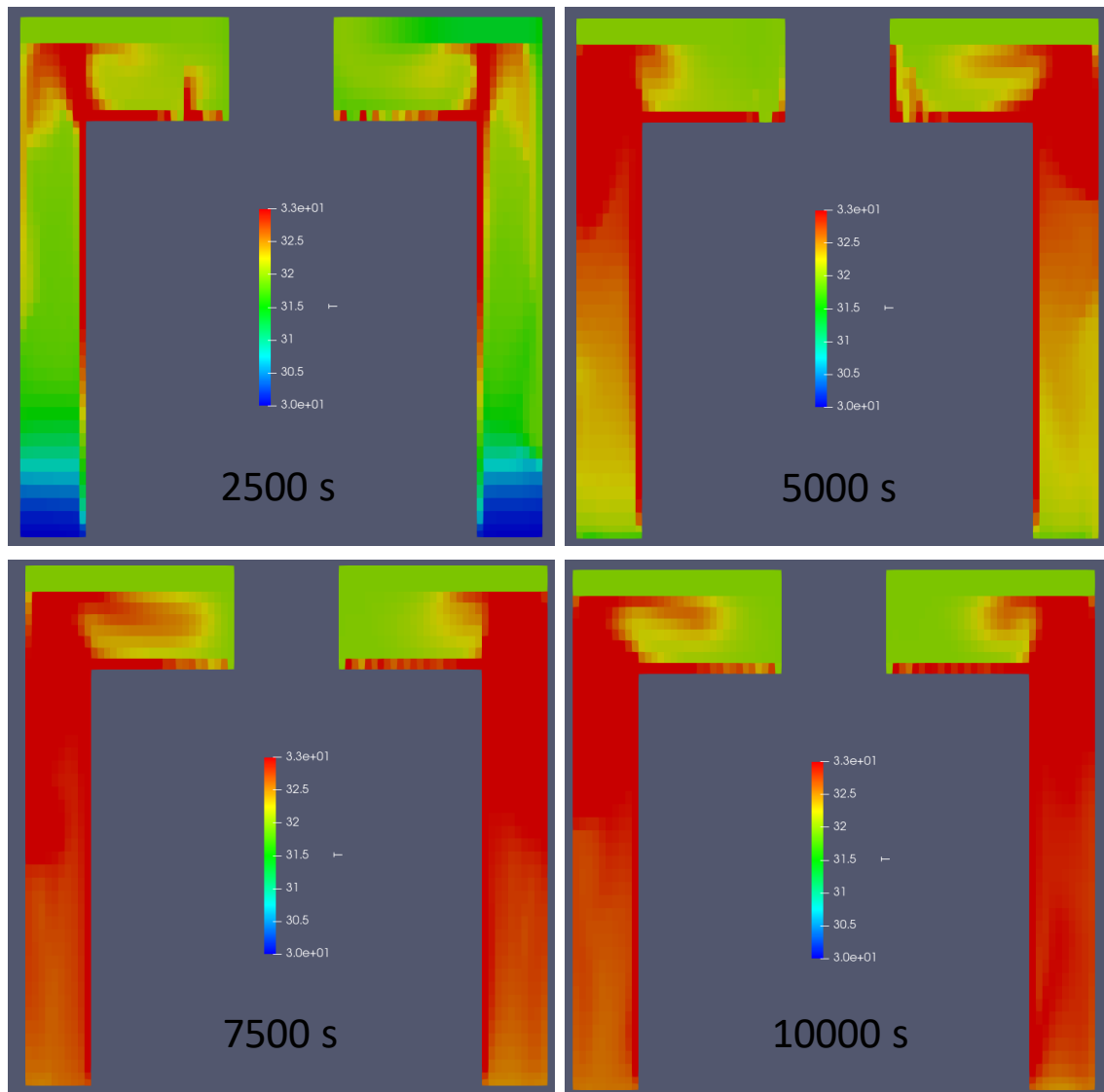


Abb. 3.47 CoPool mit gekoppeltem Datensatz: Temperaturverteilungen in °C

Das physikalisch unplausible Verhalten zeigt sich auch bei Betrachtung der Gastemperatur in COCOSYS-Zone R1 (Atmosphäre oberhalb des Wassers, siehe Abb. 3.48). Diese sinkt nach ca. 3.000 s wieder ab, obwohl stetig neue Energie nachgespeist wird. Dieses hat eine Rückwirkung auf die Temperaturen im Wasserpool, was sich z. B. an den Monitorpunkten P1 und P12 zeigt (siehe Abb. 3.49, zur Position der Monitorpunkte

vgl. Abb. 3.25). Hier sind die Temperaturen bei der gekoppelten Rechnung deutlich niedriger als bei der Stand-alone-Rechnung.

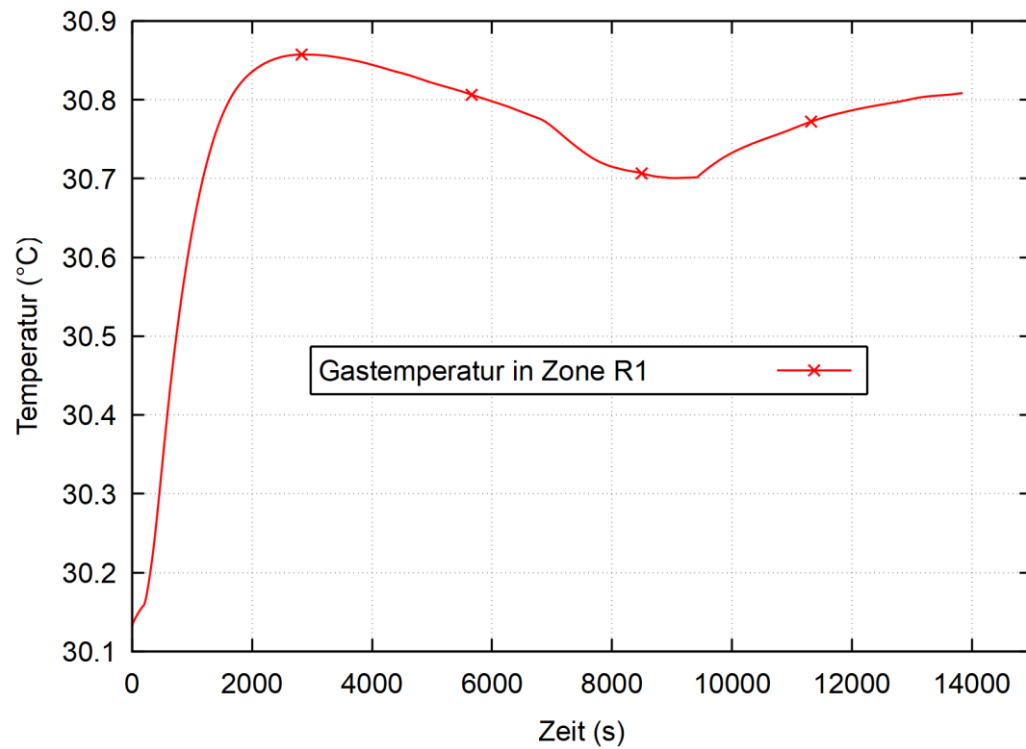


Abb. 3.48 Temperaturverlauf in COCOSYS-Zone R1 (Gasphase)

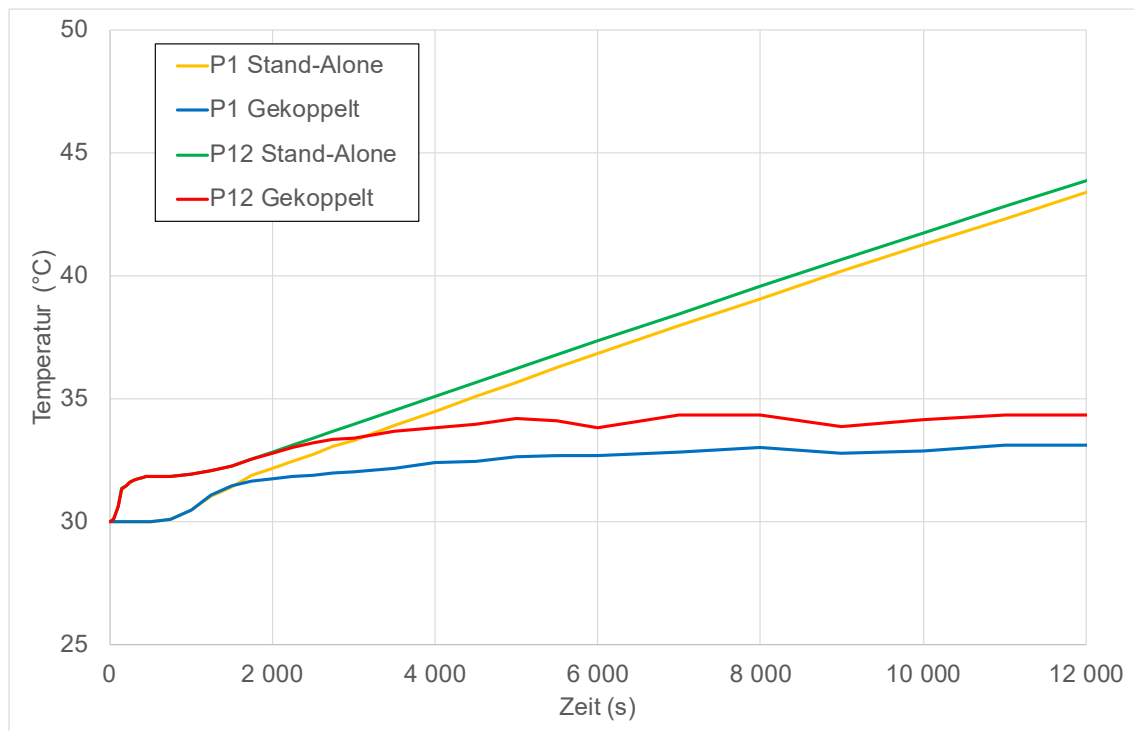


Abb. 3.49 Vergleich der Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung

Es liegt ein Problem an der Kopplungsschnittstelle CoPool/COCOSYS an der Wasseroberfläche vor. Um das Problem zu beheben, wurden folgende Parametervariationen durchgeführt:

- Änderung der Randbedingung an der Wasseroberfläche innerhalb des Geometry.xml-Files von CoPool (BcType: 0, 1 oder 4).
- Variation der Zeitschrittweite und -steuerung innerhalb von CoPool.
- Veränderung des Fluid-Gitters von CoPool (siehe Abb. 3.50). Hierbei wurde die Position der Stützstellen und die Anzahl der Gitterzellen in vertikaler (z-)Richtung verändert. Ziel war es, dass die Wasseroberfläche nicht genau auf einer Zellgrenze liegt, dass die Zellen im Wasser bis zur Oberfläche möglichst gleichmäßig sind und dass oberhalb des Wassers in der Atmosphäre möglichst wenige Zellen im Gitter sind.

Die Änderung der Randbedingung und die Variation von Zeitschrittweite/-steuerung hatten keinen Effekt auf die Ergebnisse der gekoppelten Simulation.

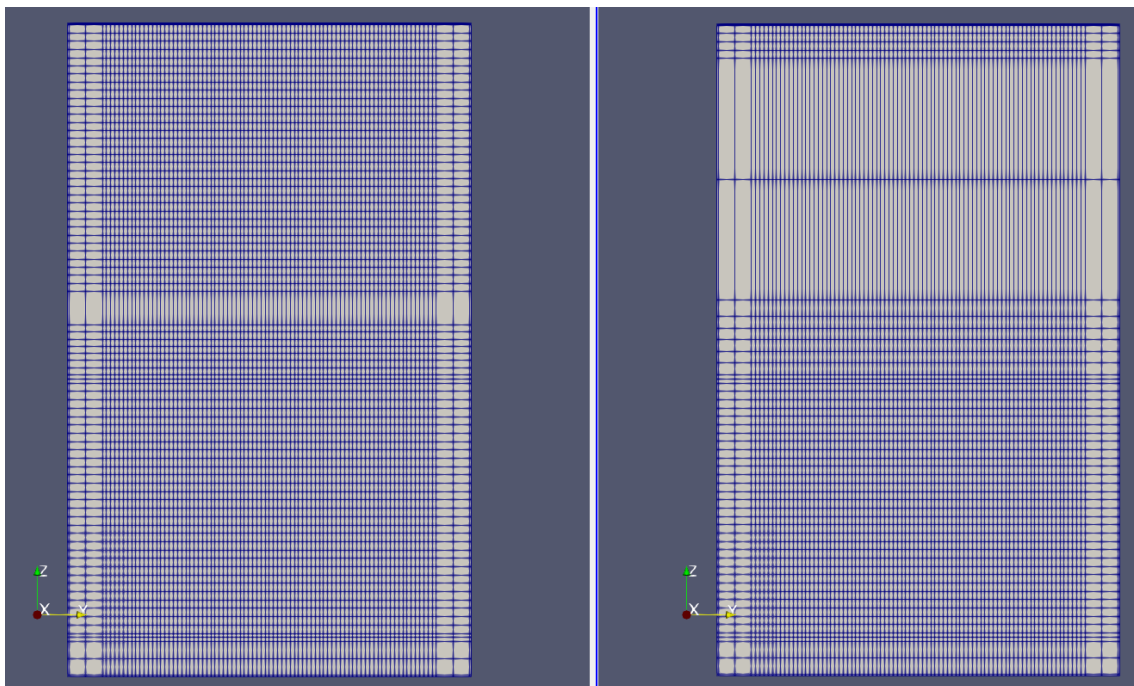


Abb. 3.50 Veränderung des Fluid-Gitters in z-Richtung (links: vorher, rechts: nachher)

Die Veränderung des Gitters hatte einen deutlichen Effekt. Die Temperaturen in der obersten Wasserschicht heizen sich nun auf (siehe Abb. 3.51).

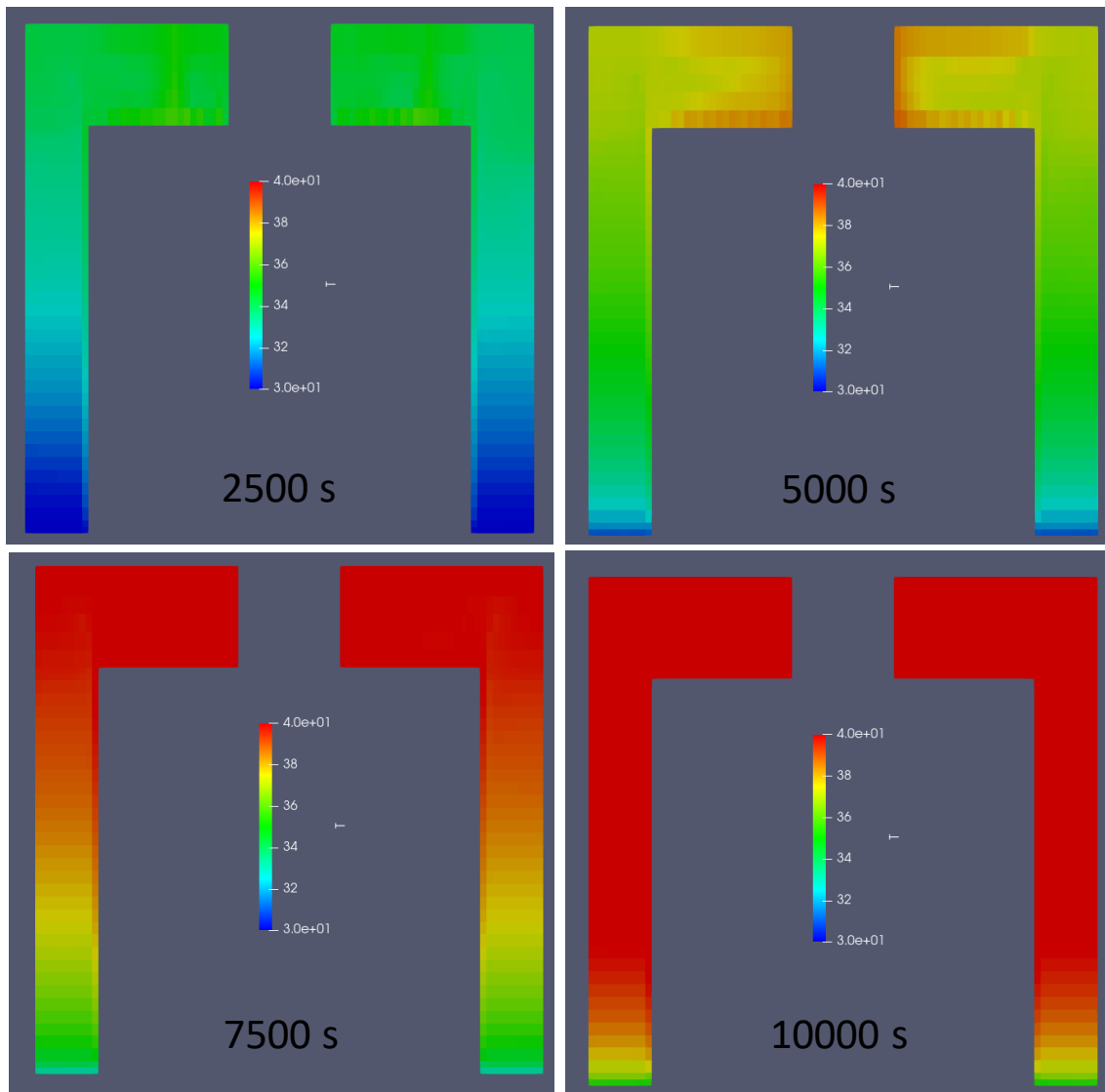


Abb. 3.51 CoPool mit gekoppeltem Datensatz (modifiziertes Gitter): Temperaturverteilungen in °C

Die Gastemperatur in der COCOSYS-Zone R1 steigt stetig an (Atmosphäre oberhalb des Wassers, siehe Abb. 3.52) und die Wassertemperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 liegen nun höher und entsprechen den Temperaturen, die auch schon bei der Stand-alone Rechnung vorlagen. Die Kurven liegen so nahe übereinander, dass man keinen Unterschied mehr erkennen kann (siehe Abb. 3.53). Beim Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten findet sich auch eine sehr gute Übereinstimmung mit nur minimalen Abweichungen (siehe Abb. 3.54). Das zeigt, dass jetzt auch die Kopplungsschnittstelle an der Wasseroberfläche korrekt funktioniert. Diese Probleme bzw. Lösung zur Kopplung an der Wasseroberfläche entsprechen dem, was auch schon in früheren Analysen für den Fall einer vereinfachten Geometrie beobachtet worden ist.

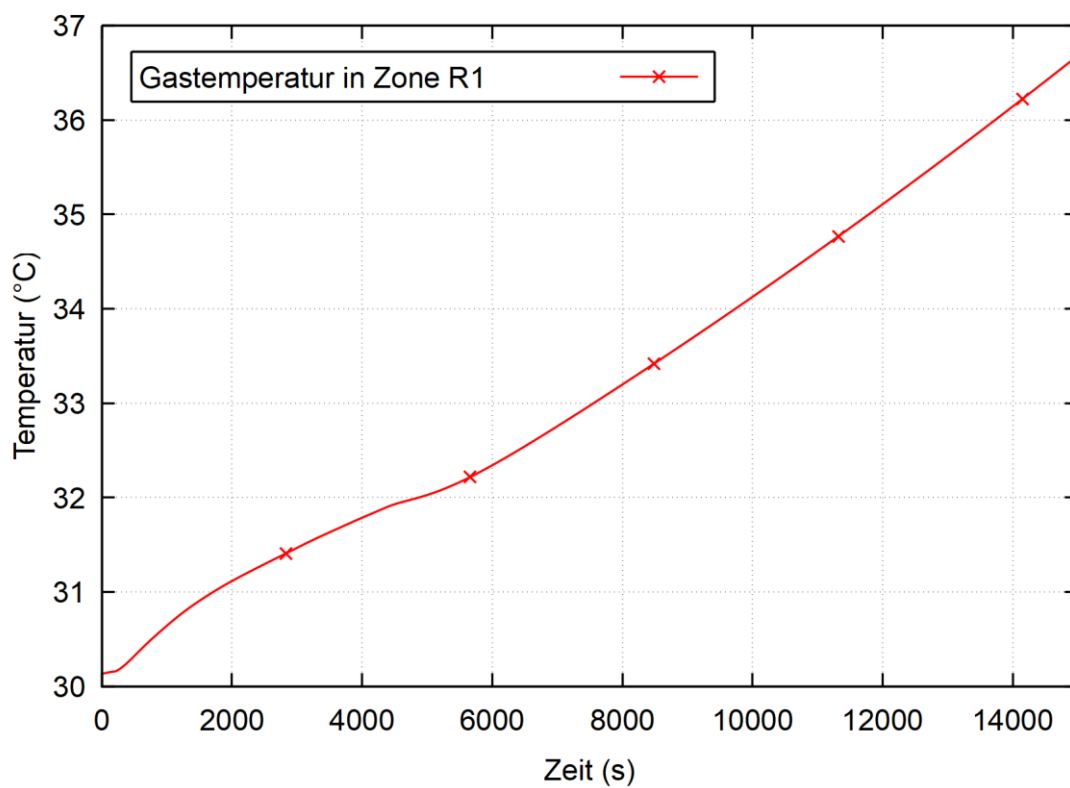


Abb. 3.52 Temperaturverlauf in COCOSYS-Zone R1 (Gasphase / neues Gitter)

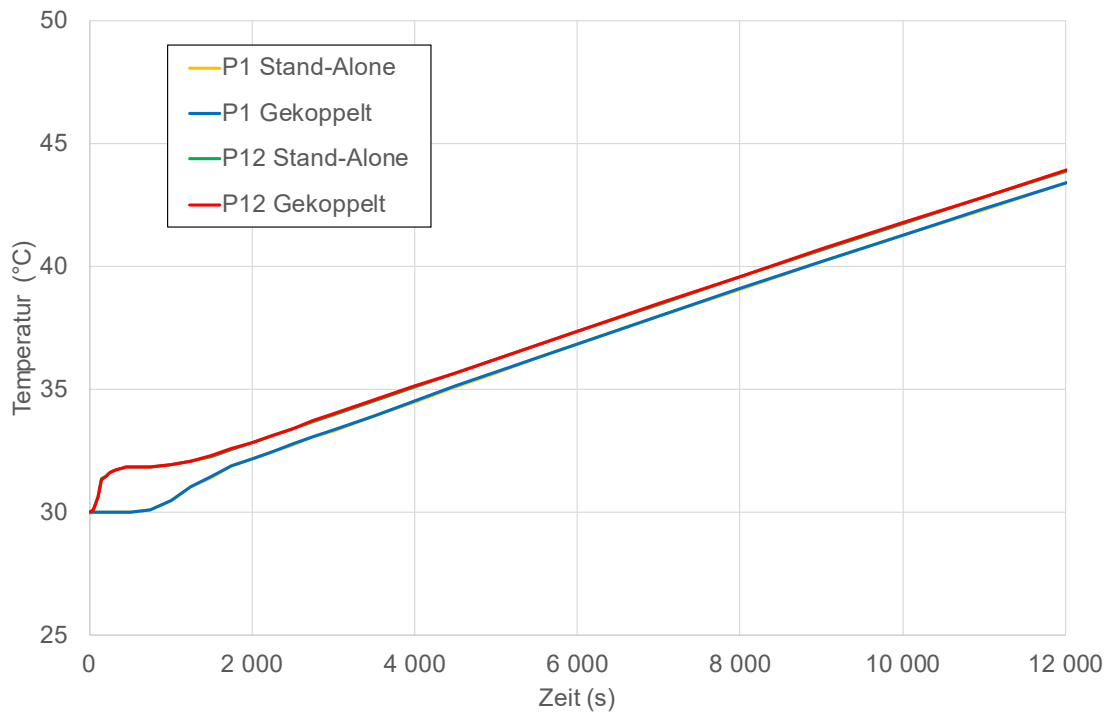


Abb. 3.53 Vergleich der Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung (neues Gitter)

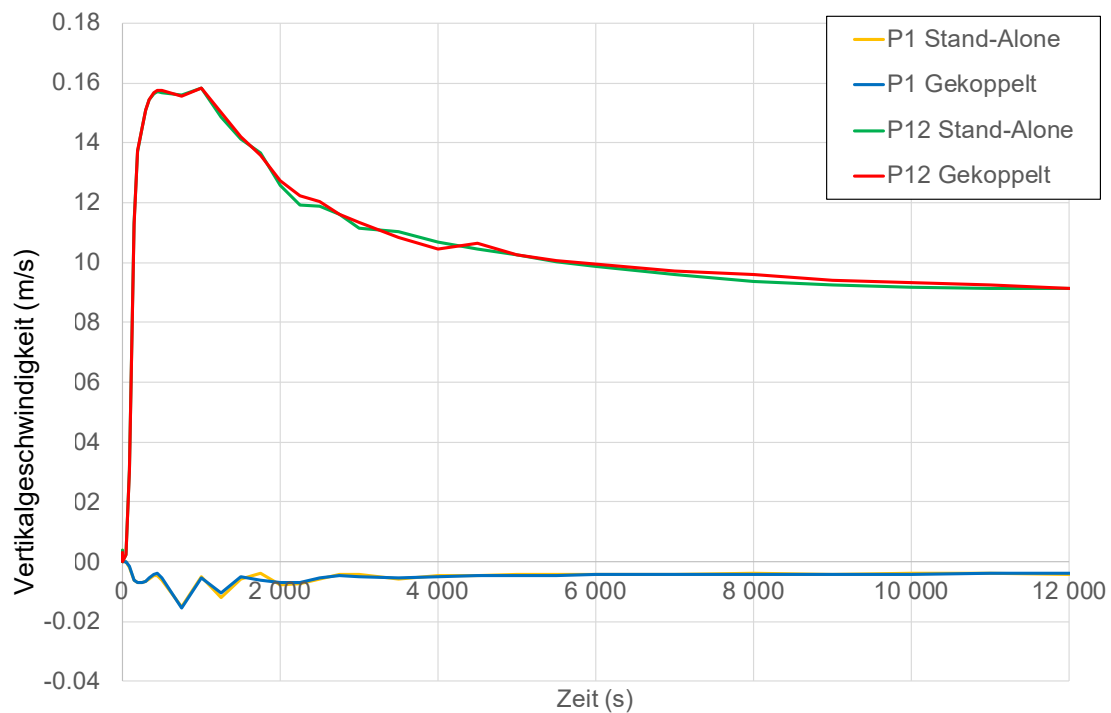


Abb. 3.54 Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte Co-Pool/COCOSYS-Rechnung (neues Gitter)

In einem weiteren Schritt soll nun eine realistischere Einspeisung in die COCOSYS-Zone C1 (Containment) erfolgen. Dabei sollen ein Massenstrom und eine Enthalpie aus einem generischen Störfall in diese Zone eingespeist werden. Diese sind in Abb. 3.55 und Abb. 3.56 dargestellt. Ab 500 s öffnet sich ein Leck, aus dem heißer Dampf in das Containment ausströmt. Der hier dargestellte Massenstrom und die Enthalpie stammen aus einer GRS-intern durchgeführten ATHLET-Rechnung und Abschätzungen für einen Leckstörfall in einem NUWARDTM-Containment. Falls genauere Werte vorliegen, könnten diese sehr einfach ausgetauscht werden. Zusätzlich zu dieser Einspeisung aus dem Leck wurde noch eine Wärmeabgabe vom RDB und Rohrleitungen an die Containment-Atmosphäre von 6 kW angenommen.

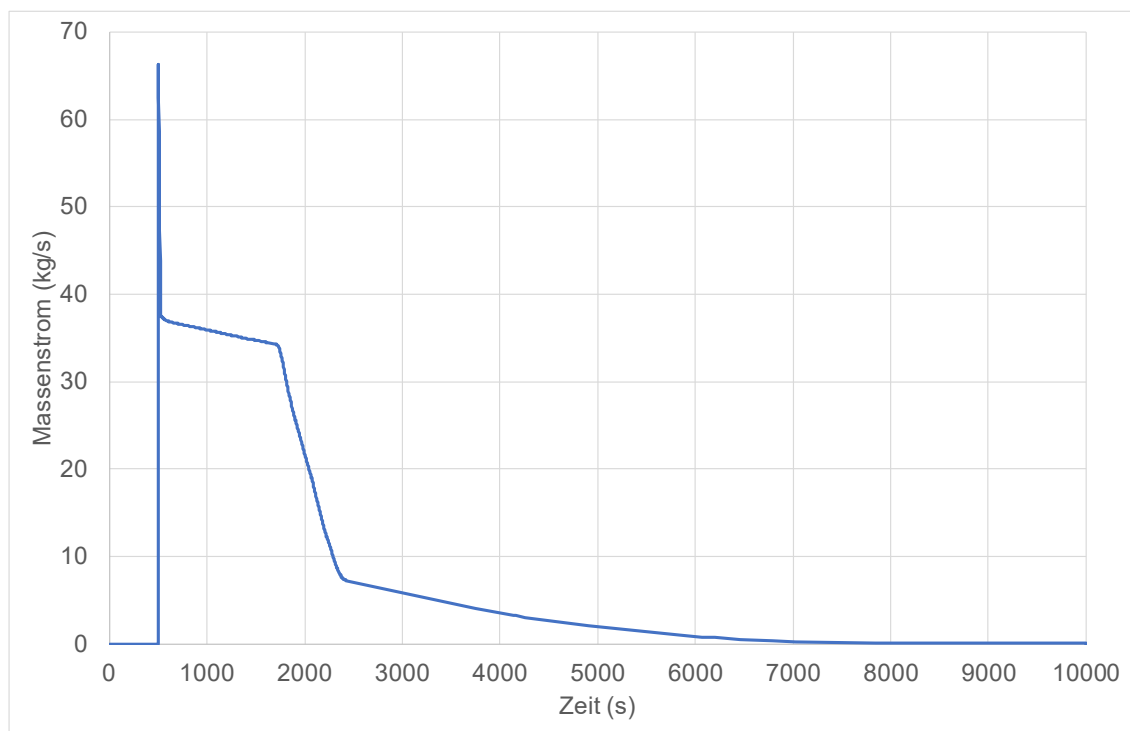


Abb. 3.55 Leckstörfall: Massenstrom für die Einspeisung in COCOSYS-Zone C1

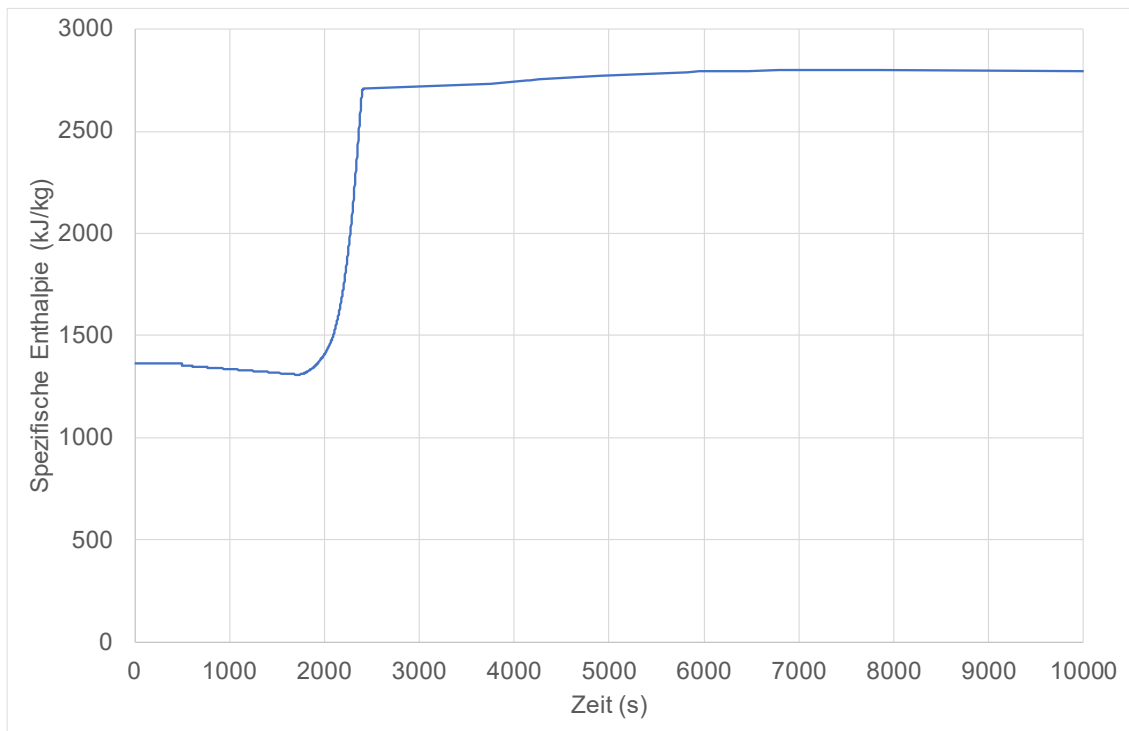


Abb. 3.56 Leckstörfall: Spezifische Enthalpie für die Einspeisung in COCOSYS-Zone C1

Im Folgenden werden die Ergebnisse der Simulation diskutiert. Dabei wird die aktuelle Rechnung mit einer früheren Rechnung verglichen:

- Die aktuelle Rechnung ist eine gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung, die frühere war eine Stand-alone-COCOSYS-Rechnung.
- Bei der aktuellen Rechnung liegt ein vereinfachtes COCOSYS-Modell vor. So wurde z. B. für das Containment nur eine Zone (C1) gewählt. Bei der früheren Rechnung wurde feiner diskretisiert. Für das Containment wurden z. B. zwölf unterschiedliche Zonen gewählt.
- Es gibt verschiedene kleinere Unterschiede bzw. Zonen-Volumina, Materialdaten, Zeitschrittweite.

In Abb. 3.57 ist der Druckverlauf im Containment dargestellt. Dieser steigt zunächst steil an, erreicht bei 1.750 s seinen Maximalwert von 3,09 bar und fällt dann langsam wieder ab. Ein ähnliches Verhalten kann auch bei der früheren Rechnung /BEC 18/ beobachtet werden, wobei der Maximaldruck hier etwas höher liegt (ca. 3,3 bar, siehe Abb. 3.58). In Abb. 3.59 ist der Temperaturverlauf im Containment dargestellt. Dieser hat ein ähnliches Verhalten wie der Druckverlauf, wobei das Maximum bei 1.750 s bei einer Temperatur

von 117,1 °C liegt. In der früheren Rechnung (siehe Abb. 3.60) liegt das Maximum wieder etwas höher bei ca. 123 °C. Die mittlere Temperatur im Wasserpool ist in Abb. 3.61 dargestellt. Diese steigt stetig an, bis 7.000 s schneller, danach etwas langsamer. Bei 10.000 s liegt die mittlere Temperatur etwa bei 32,9 °C. Hier zeigt die frühere Rechnung wieder etwas höhere Werte (34,3 °C, siehe Abb. 3.62). Die Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 sind in Abb. 3.63 dargestellt. Sie sind in einer ähnlichen Höhe wie die mittlere Wassertemperatur. In Abb. 3.64 werden die Temperaturen im Wasserpool und an der Containment-Außenseite zum Zeitpunkt $t = 2.000$ s miteinander verglichen. Hier zeigt sich wieder, dass lokal an der Containment-Außenseite deutlich höhere Temperaturen auftreten als an einzelnen Monitorpunkten oder als die mittlere Temperatur des Wasserpools.

Sollen mittlere Temperaturen (im Wasserpool) berechnet werden, so ergeben sich mit oder ohne Verwendung von CoPool nur geringe Unterschiede. Sollen in einem Grenzfall jedoch kritische Temperaturen an oder nahe zur Containment-Außenseite untersucht werden, so macht eine CFD-Simulation durchaus Sinn. Hier empfiehlt sich jedoch eher eine hochauflösende CFD-Simulation wie z. B. mit CFX oder OpenFOAM. Eine gröbere Auflösung wie bei CoPool ist hier eher nicht sinnvoll.

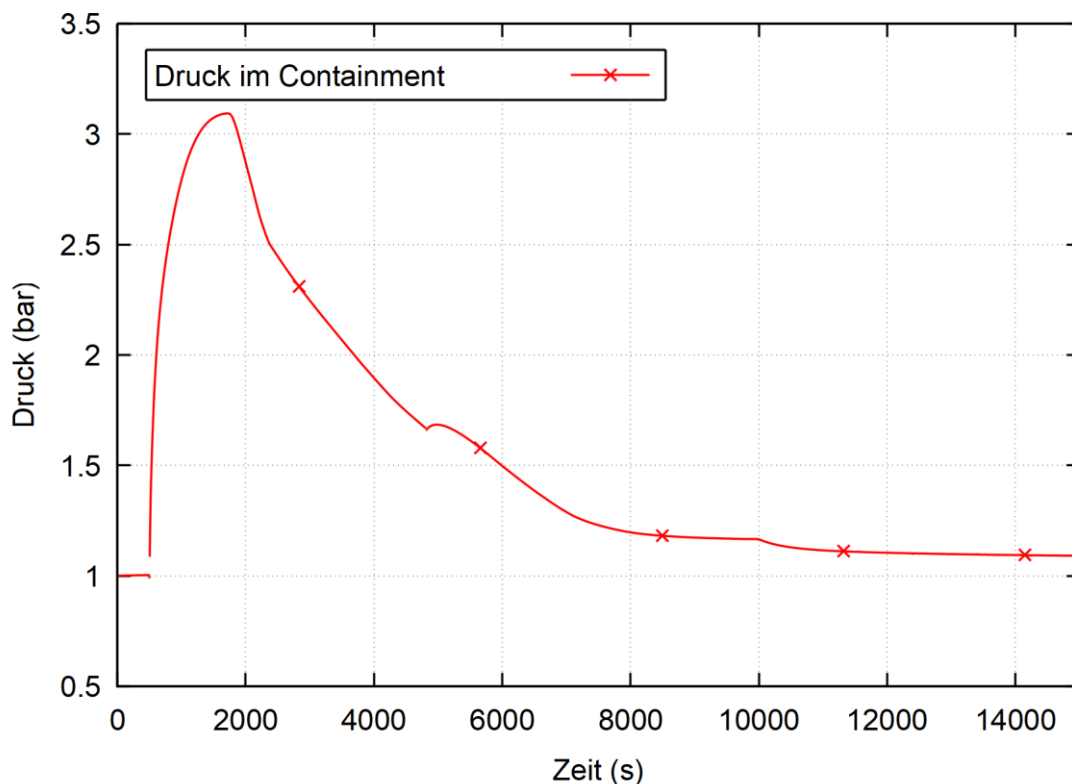


Abb. 3.57 Aktuelle Rechnung: Druckverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)

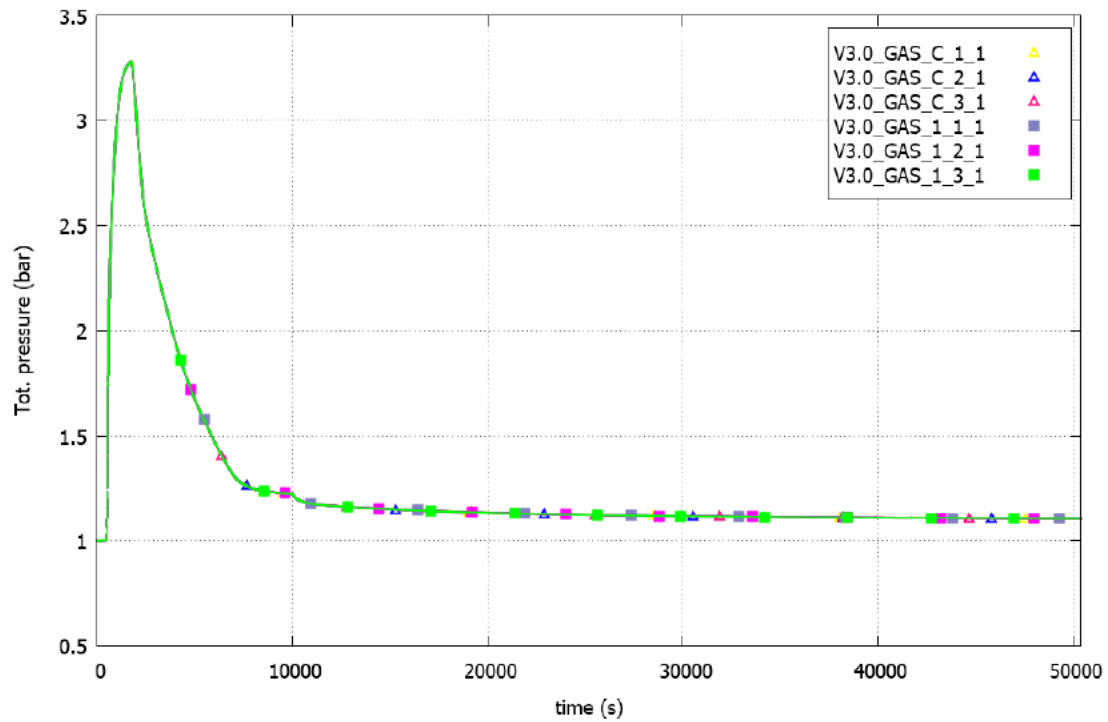


Abb. 3.58 Frühere Rechnung: Druckverlauf im Containment

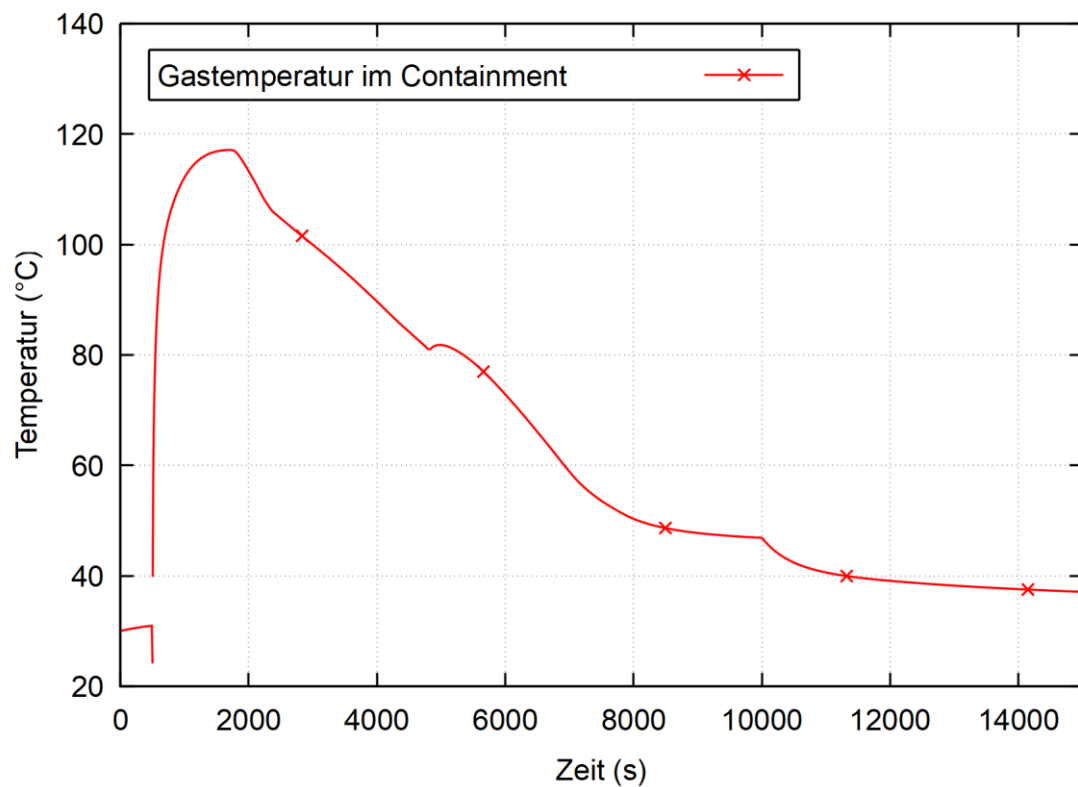


Abb. 3.59 Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)

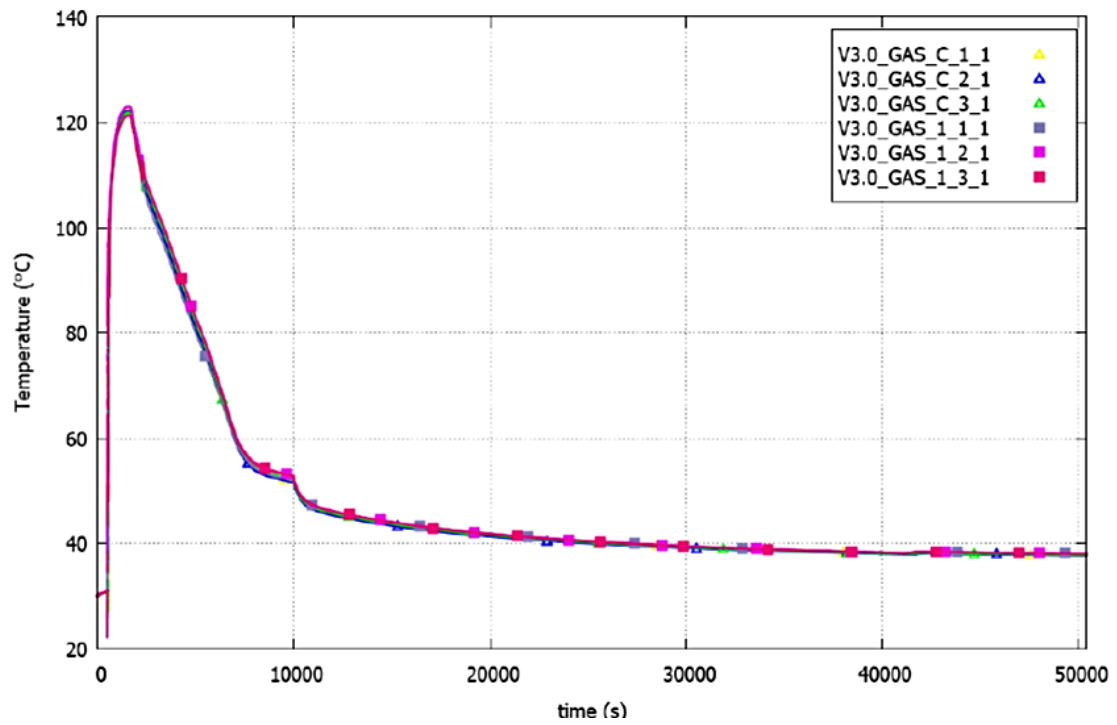


Abb. 3.60 Frühere Rechnung /BEC 18/: Temperaturverlauf im Containment

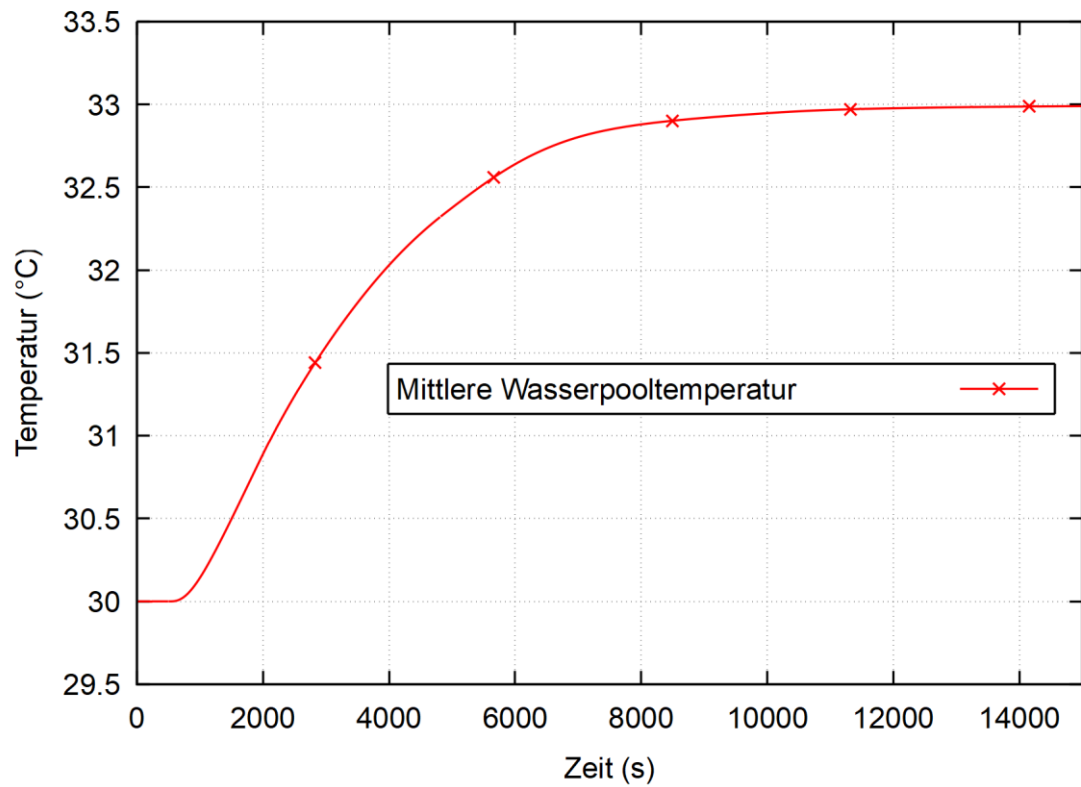


Abb. 3.61 Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf im Wasserpool (COCOSYS-Zone R1)

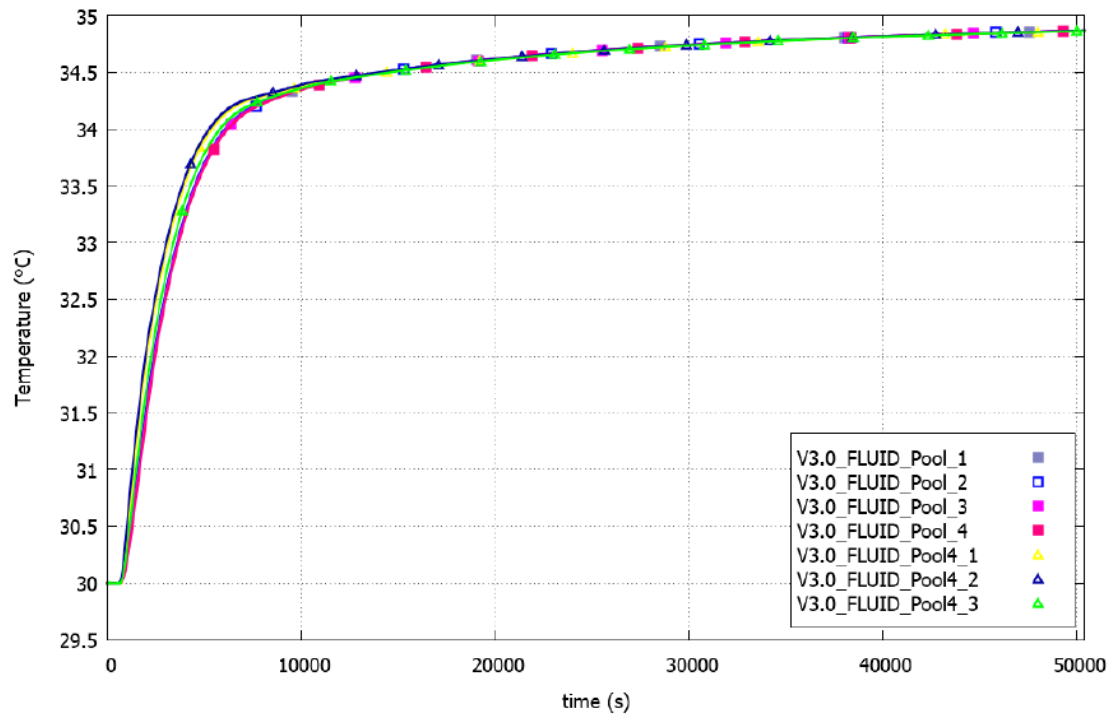


Abb. 3.62 Frühere Rechnung /BEC 18/: Temperaturverlauf im Wasserpool

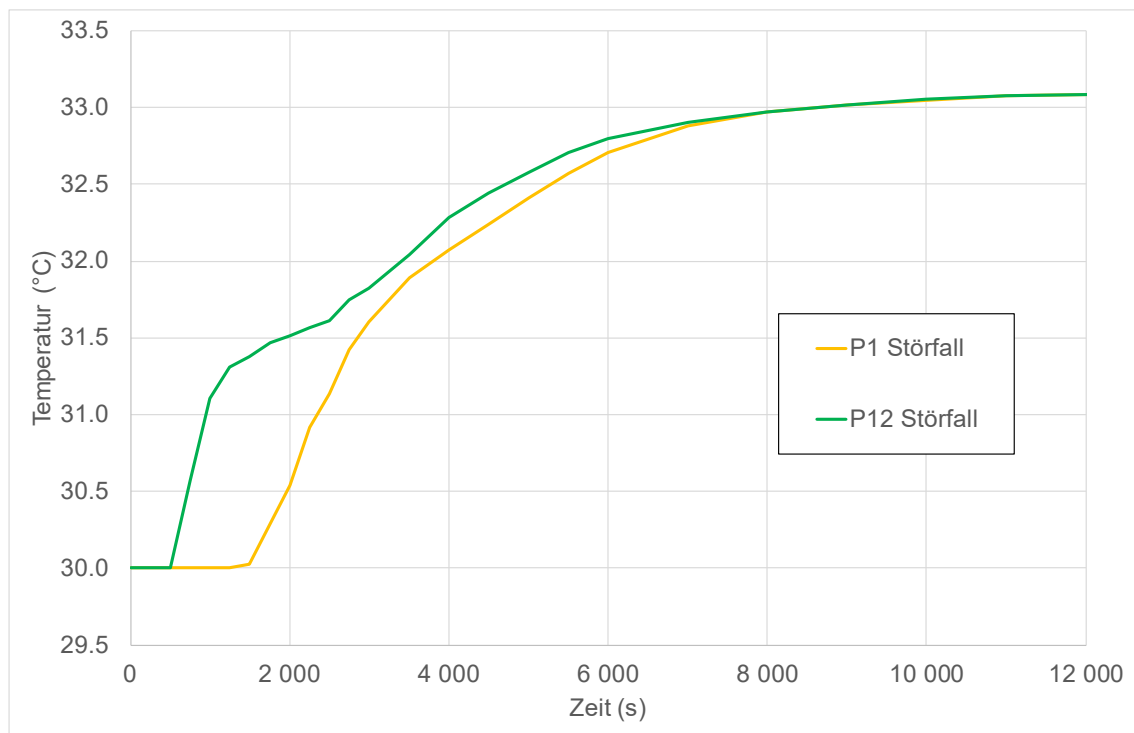


Abb. 3.63 Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf an den Monitorpunkte P1 und P12 im Wasserpool

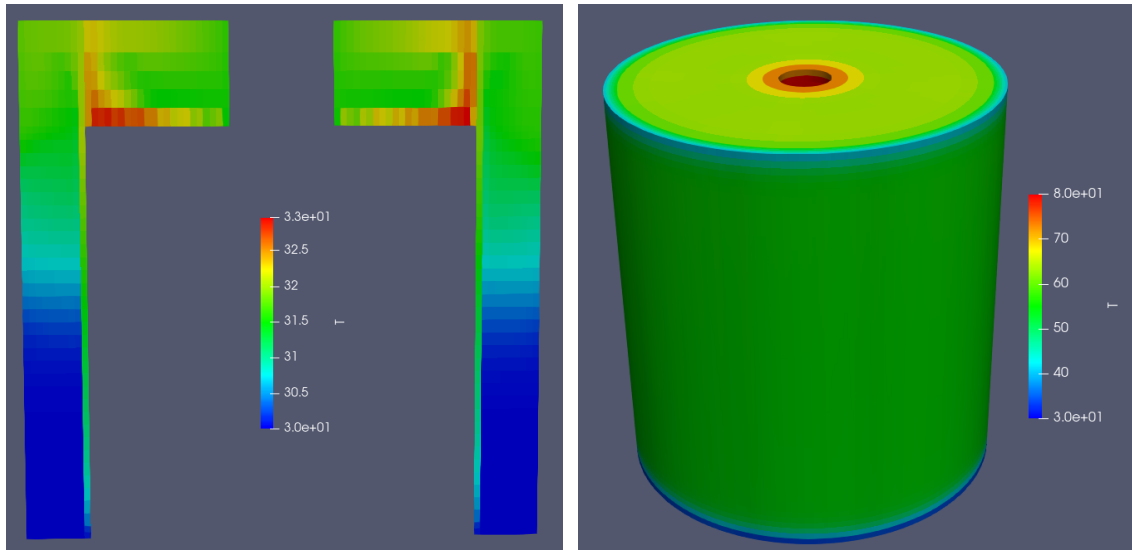


Abb. 3.64 Aktuelle Rechnung: Temperaturen in °C im Wasserpool (links) und an der Containment-Außenseite (rechts) zum Zeitpunkt $t = 2.000 \text{ s}$

Im Rahmen einer zusätzlichen Parameterstudie wurde ein Extrem-Szenario angenommen, in dem zusätzlich Nachzerfallswärme in das Containment eingespeist wurde und in dem das Containmentvolumen (durch Einbauten) um die Hälfte reduziert wurde. Abb. 3.65 zeigt, dass sich dann der maximale Druck im Containment deutlich auf über 7 bar steigern würde. Die Temperaturen im Containment steigen auf über 300 °C an und verbleiben länger bei diesen höheren Werten (siehe Abb. 3.66). Abb. 3.67 und Abb. 3.68 zeigen die Temperatur an der Containment-Wand (auf der Pool-Seite) und die mittlere Pooltemperatur. Hier ist auch jeweils ein deutlicher Anstieg zu sehen. Die Temperatur an der Containment-Wand ist ein Mittelwert, lokal kann es nochmal deutliche Abweichungen geben.

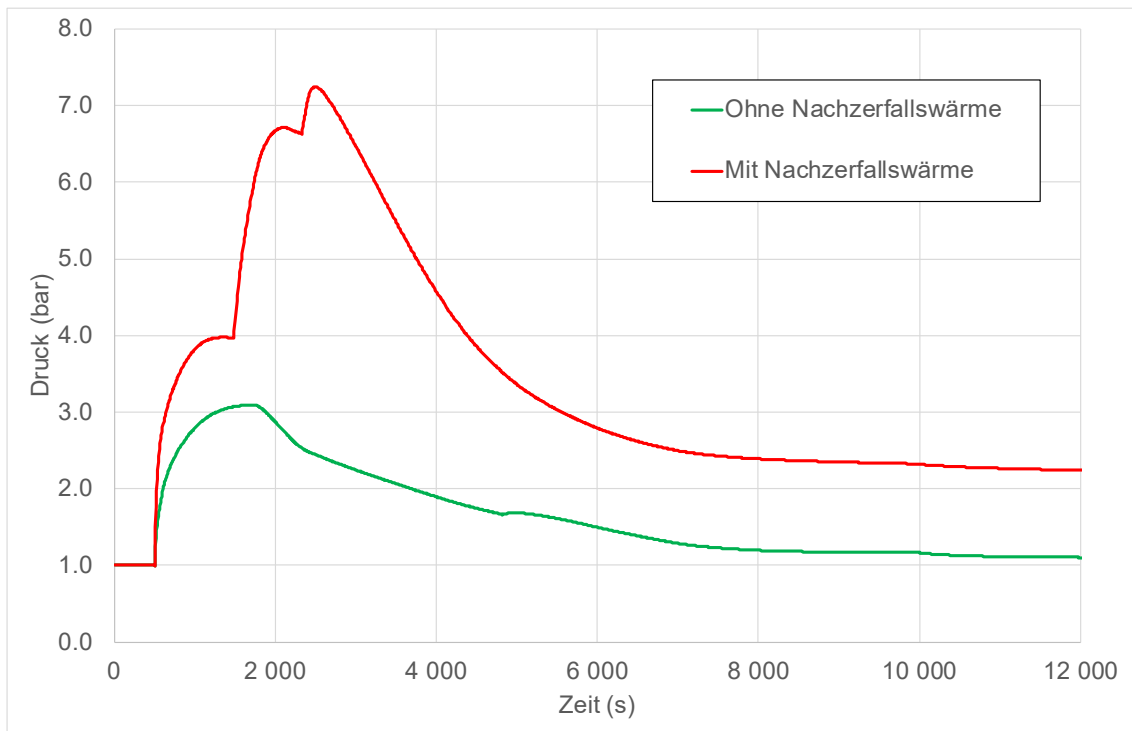


Abb. 3.65 Parameterstudie: Druckverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)

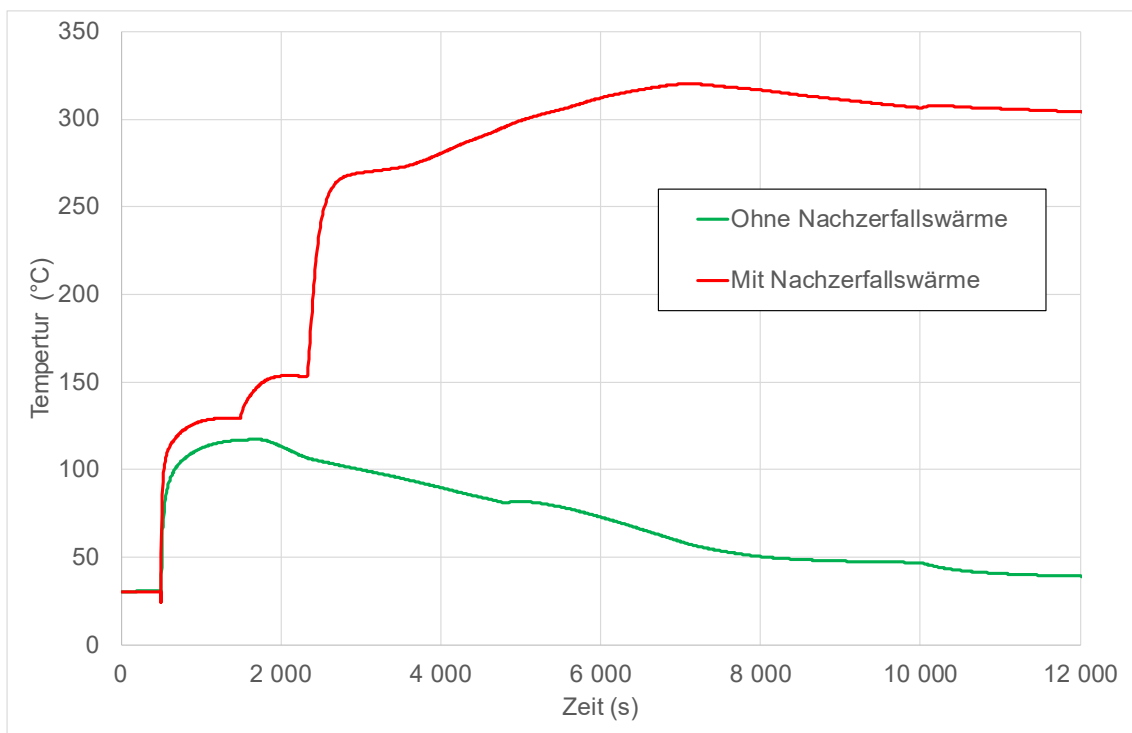


Abb. 3.66 Parameterstudie: Temperaturverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)

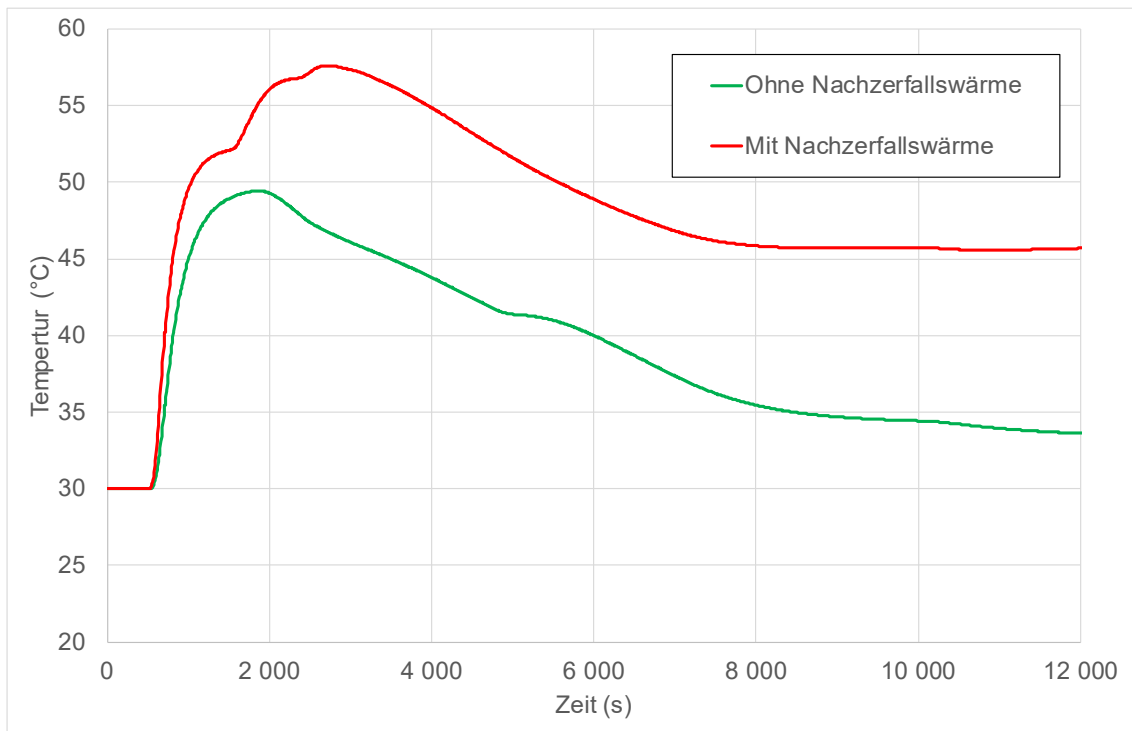


Abb. 3.67 Parameterstudie: Temperatur an der Containment-Wand (Pool-Seite)

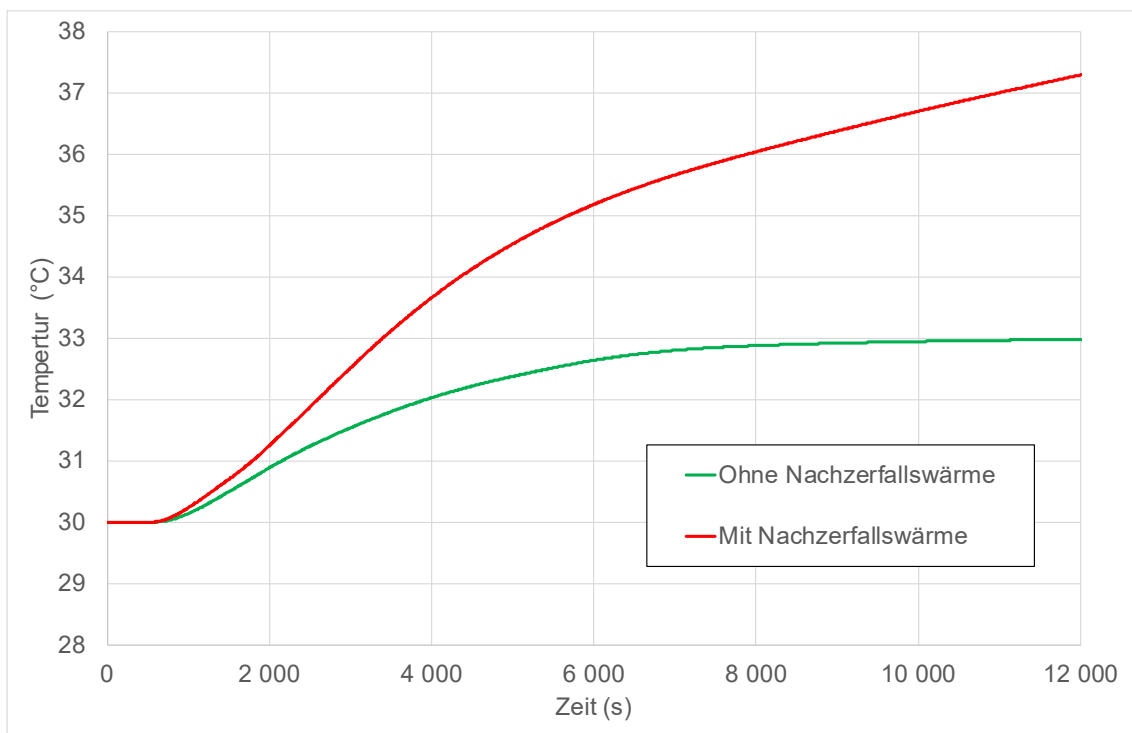


Abb. 3.68 Parameterstudie: Mittlere Pooltemperatur

3.1.2.3.5 Fazit

Im vorliegenden Arbeitspunkt sollte untersucht werden, ob und wie sich CoPool für die Berechnung des Wärmetransportes eines typischen SMR-Containments an den umgebenden Wasserpool eignet. Dazu wurden sowohl CoPool-Stand-alone- als auch gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnungen mit einer vereinfachten, generischen SMR-Geometrie durchgeführt.

Bei den Stand-alone-Rechnungen wurden zunächst eine Gitterstudie und eine Variationsrechnung mit unterschiedlichen Randbedingungen an der Containment-Wand durchgeführt. Die beste Rechnung aus diesen Variationen wurde anschließend mit einer CFX-Rechnung verglichen. Hier zeigt sich an vielen Positionen eine gute Übereinstimmung von Temperatur- und Geschwindigkeitsverteilungen. Allerdings schätzt CoPool die Wärmeabgabe vom Containment an den Wasserpool etwas höher ein als CFX. Mit CFX wurde noch eine Variationsrechnung mit einem zusätzlichen Flansch durchgeführt, die aber nur kleinere Veränderungen in den Ergebnissen zeigte. Generell zeigt sich, dass trotz niedriger Temperaturen im Wasserpool an der Containment-Außenseite (und nahe zur Oberfläche) deutlich höhere Temperaturen auftreten können.

Bei den gekoppelten Rechnungen wurde zunächst ein Fehler an der Schnittstelle Wasser/Atmosphäre identifiziert und durch eine Gitteränderung behoben. Anschließend wurden Einspeiseraten in die Containment-Zone aus einem generischen Leckstörfall für eine weitere gekoppelte Berechnung ausgewählt. Beim Vergleich der Ergebnisse mit einer früheren, reinen COCOSYS-Rechnung zeigt sich eine weitgehende Übereinstimmung bzgl. Druckaufbau im Containment und mittleren Temperaturen im Wasserpool. Allerdings zeigen die CoPool-Daten auch hier deutlich höhere lokale Temperaturen an der Containment-Außenseite.

Die zusätzlichen CoPool-Rechnungen und die Kopplung mit COCOSYS sind sehr zeitaufwändig und auch fehleranfällig. Sollen nur mittlere Temperaturen im Containment oder Wasserpool betrachtet werden, so lohnt sich dieser Aufwand kaum, da sich die Ergebnisse für die mittleren Werte kaum unterscheiden. In kritischen Grenzfällen kann aber nur mit Hilfe von CFD-Simulationen beurteilt werden, ob lokal schon Siedetemperaturen an der Containment-Oberfläche auftreten.

3.2 Passive Wärmeabfuhrsysteme fortschrittlicher Anlagekonzepte

Analog zur im vorherigen Kapitel diskutierten passiven Containmentwärmeabfuhr direkt über die Containmentschale basiert das Funktionsprinzip des Gebäudekondensators prinzipiell auf denselben Phänomenen: Im Falle eines Störfalls, z. B. eines Kühlmittelverluststörfalls, wird Dampf in die Containmentatmosphäre freigesetzt und sammelt sich bei DWR im Kuppelbereich des Containments. Dort kondensiert der Dampf an den Rohren des Gebäudekondensators, was zu einer Reduzierung des Drucks im Containment führt. Das entstehende Kondensat sammelt sich im Gebäudesumpf und wird zur Kühlung - je nach Störfallfortschritt - des Kerns, der RDB-Außenseite oder - falls RDB-Versagen eingetreten ist - der bereits sich ausgebreiteten Schmelze genutzt.

3.2.1 PASI-Versuche zur Validierung des GEKO-Modells

Im Rahmen des BMUV-Projektes INT KoNuS (4720101512) wurden Arbeiten zur Adaption des Programmpaketes AC² an die passiven Wärmeabfuhrsysteme in Kernkraftwerken mit Reaktoren des Typs WWER-1200/V-491 durchgeführt. Ein wesentlicher Arbeitspunkt war dabei die Verifikation und Validierung des GEKO-Modells /BRO 11/ als Voraussetzung für Unfallanalysen mit COCOSYS zu KKW dieses Typs. Auf der Basis von Publikationen und technischen Dokumenten über die Versuchsanlage PASI der Lappeenranta-Lahti University of Technology (LUT) in Finnland wurde dazu ein COCOSYS-Datensatz für ein ausgewähltes Experiment, das Natural Circulation Experiment (NCE), erstellt und damit Validierungsrechnungen durchgeführt /EBE 22/. In den Rechnungen kamen neue Modellerweiterungen aus der COCOSYS-Entwicklung zum Einsatz, insbesondere die Erweiterung des GEKO-Modells um Wärmeübergangsmodelle an senkrechten Rohren (Details siehe Kap. 3.2.2, S. 243). In Fortführung der Arbeiten sind Analysen begleitend im Validierungsvorhaben aufgearbeitet und bewertet worden.

3.2.1.1 PASI-Versuchsanlage

Die PASI-Versuchsanlage bei LUT /KOU 21/ bildet das passive Containment-Kühlsystem einer WWER-1200/V-491-Anlage (Passive Heat Removal System – Containment, PHRS-C) ab, das aus senkrecht angeordneten Wärmetauschern im Containment, Wasserpools außerhalb des Containments sowie verbindenden Rohrleitungssystemen besteht. Die Versuchsanlage (Abb. 3.69) umfasst einen Druckbehälter, der das Containment repräsentiert, einen Wärmetauscher als Teil des PHRS-C, einen Wasserpool,

Downcomer- und Riser-Rohrleitungen sowie einen Sparger im Wasserpool. Hilffssysteme dienen der Bereitstellung von Dampf zur Störfallsimulation, zur Abfuhr von Kondensat oder der Möglichkeit der Nachspeisung von Wasser in den Pool.

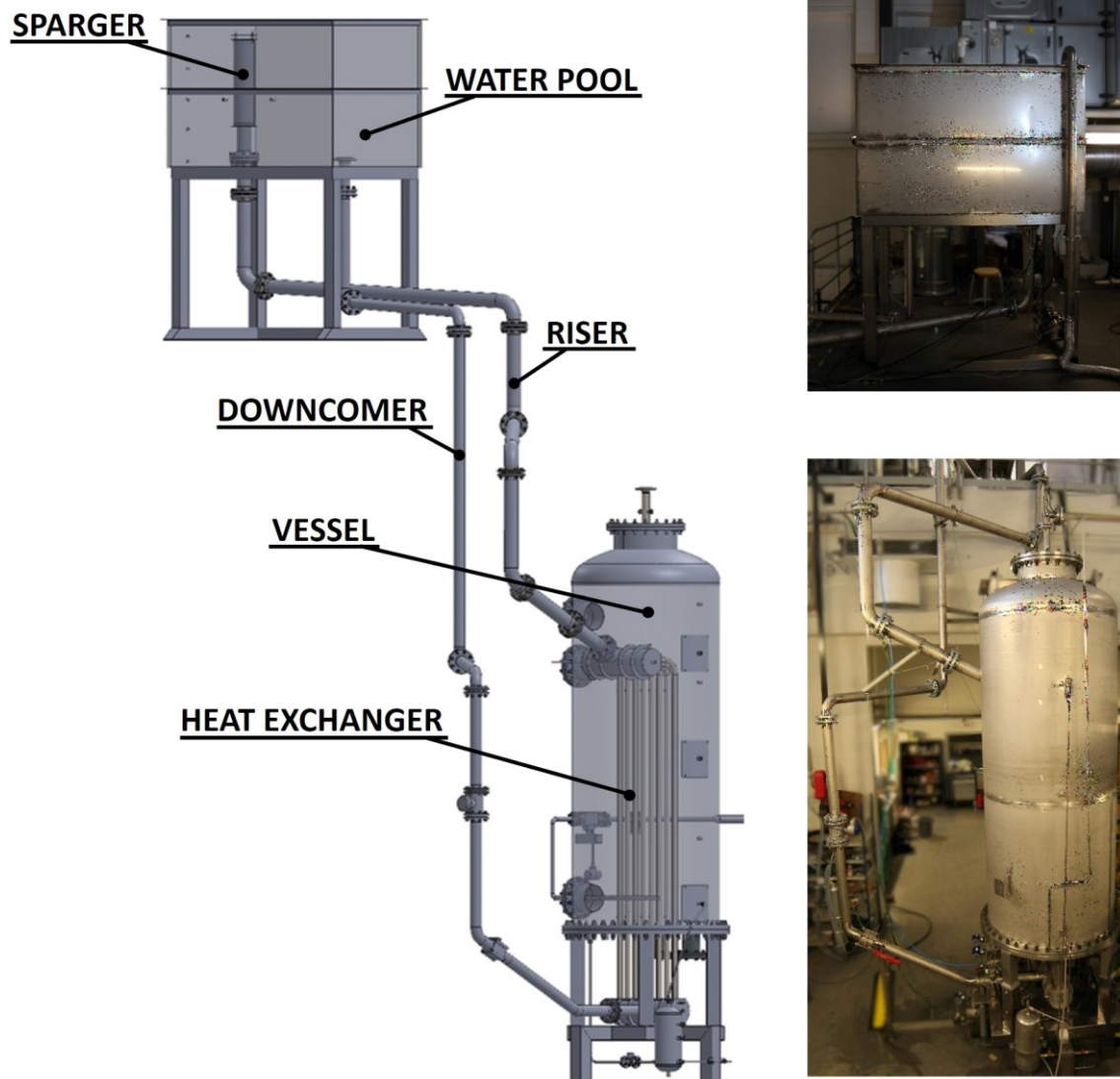


Abb. 3.69 Schema der PASI-Versuchsanlage (Kouhia, Kauppinen et al, DOI: 10.1016/j.nucengdes.2021.111417, CC BY 4.0 DEED /KOU 21/)

Das Natural Circulation Experiment (NCE) startete bei Umgebungs-Druck und -Temperaturen in der Versuchsanlage sowie gefülltem Kondensator-Kreislauf und Pool. Der Druckbehälter wurde mit nahezu konstantem Massenstrom an gesättigtem Dampf beaufschlagt und dabei wurden Parameter im Kondensatorkreislauf sowie im Druckbehälter gemessen. Die Aufheizung des Kreislaufs führt zur Ausbildung eines Naturumlaufs und damit zur Wärmeabfuhr aus dem Containment. Mit Erreichen der Sättigungstemperatur im Kreislauf wechselt die einphasige Wasserströmung zur zweiphasigen Wasser-/Dampfströmung mit charakteristischen Druckschwingungen im Kondensator.

3.2.1.2 COCOSYS-Datensatz

Für die Validierungsrechnungen wurde ein COCOSYS-Datensatz mit 6 Zonen, 7 Strömungsverbindungen und 8 wärmeleitenden Strukturen erstellt (Abb. 3.70). Der Druckbehälter ist durch Zone CONVE abgebildet. Der darin installierte Gebäudekondensator inklusive der Verbindungsleitungen mit dem Wasserpool ist mit dem GEKO-Modell simuliert. Der Wasserpool ist in zwei Zonen POOLD und POOLR unterteilt.

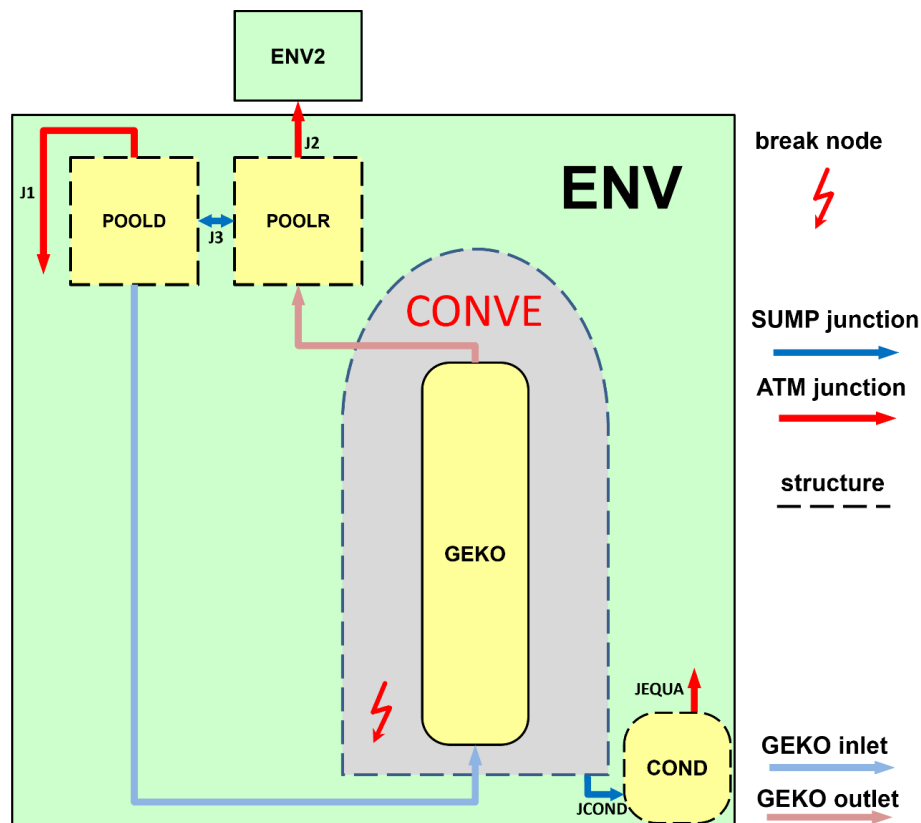


Abb. 3.70 PASI-Versuchsanlage, COCOSYS-Nodalisierung

3.2.1.3 Simulationsergebnisse

Da die Daten im Rahmen des EU-PASTELS Vorhabens derzeit noch nicht für die Öffentlichkeit zugänglich sind, werden nachfolgend die Nachrechnungen nur qualitativ beschrieben. Die Hauptaufgabe des Gebäudekondensators (PHRS-C) – die durch den Kondensator aus dem Containment abgeführte Energie – wird etwas überschätzt. Jedoch gibt das GEKO-Modell auch die durch den Übergang zur Zweiphasigkeit im Kondensator gemessenen Schwingungen in der Energie, dem Massenstrom und der Riser-Temperatur korrekt wieder. Der berechnete Druck und die Atmosphärentemperatur im Containment-Behälter werden konservativ überschätzt.

Weiterhin wurde festgestellt, dass der berechnete Wärmeübergangskoeffizient zwischen Druckbehälter-Atmosphäre (Containment) und Wärmetauscherrohren des Kondensators wesentlich geringer ist als der für die Außenwand des Behälters, obwohl beide Oberflächen mit der gleichen Atmosphäre interagieren. Der Wärmeübergang wird im GEKO-Modul mit den entsprechenden Korrelationen für unterschiedliche thermohydraulische Randbedingungen für waagerechte und senkrechte Rohrbündel berechnet /ALL 17/. Sie basieren auf dem VDI-Wärmeatlas und sind völlig unabhängig von den Standardmodellen in COCOSYS. Letztere gelten nur für die freie (laminare und turbulente) Konvektion, berücksichtigen aber nicht die in PASI durch die Dampfeinspeisung vorliegende erzwungene Konvektion, die auch bei Kühlmittelverluststörfällen im Containment charakteristisch ist. Um den Einfluss dieses Effekts zu untersuchen, wurde der berechnete Wärmeübergangskoeffizient um den Faktor 1,8 erhöht (in /BUC 18b/ wurden Faktoren zwischen 1,1 und 1,8 genannt, ohne jedoch als Ursache die fehlende erzwungene Konvektion zu nennen). Damit werden die gemessenen Druck- und Temperaturverläufe im Druckbehälter sehr gut reproduziert. Andere Ergebnisse sind davon nur gering beeinflusst bzw. verbessern sich leicht.

Im Zuge zusätzlicher Validierungsrechnungen und Parameterstudien wurden einige Modellschwächen und damit Punkte für die weitere Verbesserung des GEKO-Modelles herausgearbeitet:

- So wurden Defizite in den für die Nachrechnung notwendigen Daten festgestellt. Dies betraf z. B. die Energie des eingespeisten Dampfes (ohne Dampfdruck kann die Enthalpie nicht genau festgelegt werden), Angaben zur Leckage des Druckbehälters und die Anfangswassermasse im Pool.
- Im GEKO-Modell existiert nur ein Eingabewert zur Berücksichtigung der Strömungsverlustbeiwerte (ZETA) des gesamten Kondensatorkreislaufes. Dieser Wert wurde für PASI mit 8,5 bestimmt. Voraussetzung für die erfolgreiche Nachrechnung des gemessenen Massenstromes und damit der abgeführten Energie war aber die Vorgabe eines wesentlich geringeren Wertes von $ZETA = 0,3$. Solch ein geringer ZETA-Wert wurde auch durch den Modell-Entwickler RWTH Aachen in Validierungsrechnungen zu waagrecht installierten Kondensatoren angewendet /ALL 17/. In das COCOSYS User Manual wurde eine entsprechende Information zum gefundenen kleinen ZETA-Wert eingefügt. Ungeachtet dessen sind die Ursachen für die Notwendigkeit eines solch kleinen ZETA entwicklungsseitig zu ergründen. Daneben wäre eine Modellerweiterung zur Verwendung von lokalen Verlustbeiwerten für Downcomer, Wärmetauscherrohre und Riser zu diskutieren.

- In der PASI-Anlage befindet sich der untere Abschnitt der Wärmetauscherrohre außerhalb des Druckbehälters und nimmt nicht am Wärmeaustausch mit der Containment-Atmosphäre teil (siehe Abb. 3.69). Die entsprechende Oberfläche ist isoliert und damit ihr Wärmeverlust reduziert. Im COCOSYS-Datensatz für PASI ist dieser Anteil vernachlässigt, insbesondere auch weil im GEKO-Modell gegenwärtig nur eine Containment-Zone angekoppelt werden kann.

Das GEKO-Modell sollte dahingehend erweitert werden, dass mehrere Containment-Zonen angekoppelt werden können. Hier bietet sich an, die Kopplung jeweils für den Downcomer, die Wärmetauscherrohre und des Risers zu realisieren. Solch eine Erweiterung bietet dann auch die Möglichkeit, bei feiner Unterteilung des Containment-Doms die 5 m langen senkrechten Rohre des PHRS-C unterschiedlichen Zonen auf verschiedenen Knoten zuzuordnen.

3.2.1.4 Fazit

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass in Störfallanalysen das GEKO-Modell zur Simulation der Energieabfuhr über das PHRS-C-System (Gebäudekondensatoren) im KKW mit WWER-1200/V-491 prinzipiell angewendet werden kann. Die Hauptaufgabe des PHRS-C – die durch den Kondensator aus dem Containment abgeführte Energie – wird etwas überschätzt. Die Verläufe des Massenstroms durch den Kondensatorkreislauf sowie der Temperaturen im Riser und im Wasserpool (gemessene Werte) wurden sehr gut reproduziert. Insbesondere gibt das GEKO-Modell auch die durch den Übergang zur Zweiphasigkeit im Kondensator gemessenen Schwingungen in der Energie, dem Massenstrom und der Riser-Temperatur wieder. Der berechnete Druck und die Atmosphärentemperatur im Containment-Behälter werden konservativ überschätzt. Dabei sind die obigen Aussagen zur Unsicherheit bzgl. des eingespeisten Dampfes, der begrenzten Anzahl von gemessenen Parametern sowie zur Skalierung zu berücksichtigen.

Die während der PASI-Rechnungen gewonnenen Erkenntnisse sind hilfreich für die Bewertung der Fähigkeiten des GEKO-Modells im Hinblick auf seine Anwendung auf WWER-1200/V-491 und zeigen notwendige Modellverbesserungen für die weitere COCOSYS-Entwicklung auf.

Im Rahmen der zukünftigen COCOSYS/AC²-Entwicklung sollen die Wärmeübergangsmodelle vereinheitlicht und somit die Korrelationen für Rohrbündel aus dem GEKO-Modell allgemein verwendbar werden. Es sollte dabei angestrebt werden, Ansätze zur

Berücksichtigung der erzwungenen Konvektion zu erarbeiten und zu implementieren. Alternativ könnte man dem Nutzer über Korrekturfaktoren Einfluss auf die Wärmeübergangskoeffizienten ermöglichen.

3.2.2 INKA-Experimente mit dem GEKO-Modul in COCOSYS

In COCOSYS kann ein Gebäudekondensator durch das von der RWTH Aachen entwickelte GEKO-Modul simuliert werden /BRO 11/. Das Modul berechnet den Wärmeübergang (inklusive Kondensation) von der Containmentatmosphäre zum Kondensator, die Aufwärmung des Wassers im Kondensator und die sich dadurch im Kondensator einstellende Naturkonvektion. Durch Anwendung des GEKO-Moduls kann das langzeitige Verhalten der Containmentatmosphäre bei Wärmeabfuhr über passive Gebäudekondensatoren, d. h. Druck- und Temperaturentwicklung, bewertet werden. Die Anwendungsmöglichkeiten dieser Version des Moduls waren dabei auf horizontale bis leicht geneigte Rohre beschränkt.

Das GEKO-Modul wurde ursprünglich von der RWTH Aachen anhand verschiedener Testreihen im kleinskaligen GEKO-Versuchsstand am Forschungszentrum Jülich validiert /BRO 11/. Im Rahmen des EASY-Projektes (BMW-Vorhaben 1501492 EASY – Teilprojekt C) wurde von der RWTH Aachen das GEKO-Modul in COCOSYS anhand von INKA-Experimenten eingehender bewertet. Da nach dem Abschluss des Vorhabens keine weiteren Entwicklungsschritte seitens RWTH Aachen vorgenommen wurden, hat die GRS entschieden, die Arbeiten zur Weiterentwicklung des GEKO-Moduls auf Basis der verfügbaren experimentellen Daten allein weiterzuführen.

Ziel der durchgeführten Arbeiten ist es, den aktuellen Stand der Validierung des GEKO-Moduls in COCOSYS unabhängig zu den RWTH-Aktivitäten in EASY zu überprüfen. Dazu wurden mit dem GEKO-Modul Nachrechnungen ausgewählter Experimente an der INKA-Testanlage durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Nachrechnungen sind in der vorliegenden technischen Notiz ausführlich diskutiert.

Die INKA-Testanlage befindet sich am Standort der Framatome GmbH in Karlstein. Sie wurde zur Untersuchung der passiven Sicherheitssysteme von Siedewasserreaktoren im Original-Maßstab errichtet. Diese besteht aus den Einzelkomponenten Gasraum im Sicherheitsbehälter (Drywell-Behälter), Flutbehälter, Kondensationskammer (Wetwell-Behälter), Absetzbecken, Reaktordruckbehälter (GAP), Notkondensator (NOKO), Gebäudekondensator (GEKO). Der Energieeintrag in den GAP-Behälter, die der

experimentellen Nachzerfallsleistung entsprach, erfolgte durch Frischdampfeinspeisung (NZL-Dampf). Eine detaillierte Beschreibung der INKA-Versuchs-anlage ist in /BUC 18b/ dokumentiert (Abb. 3.71).

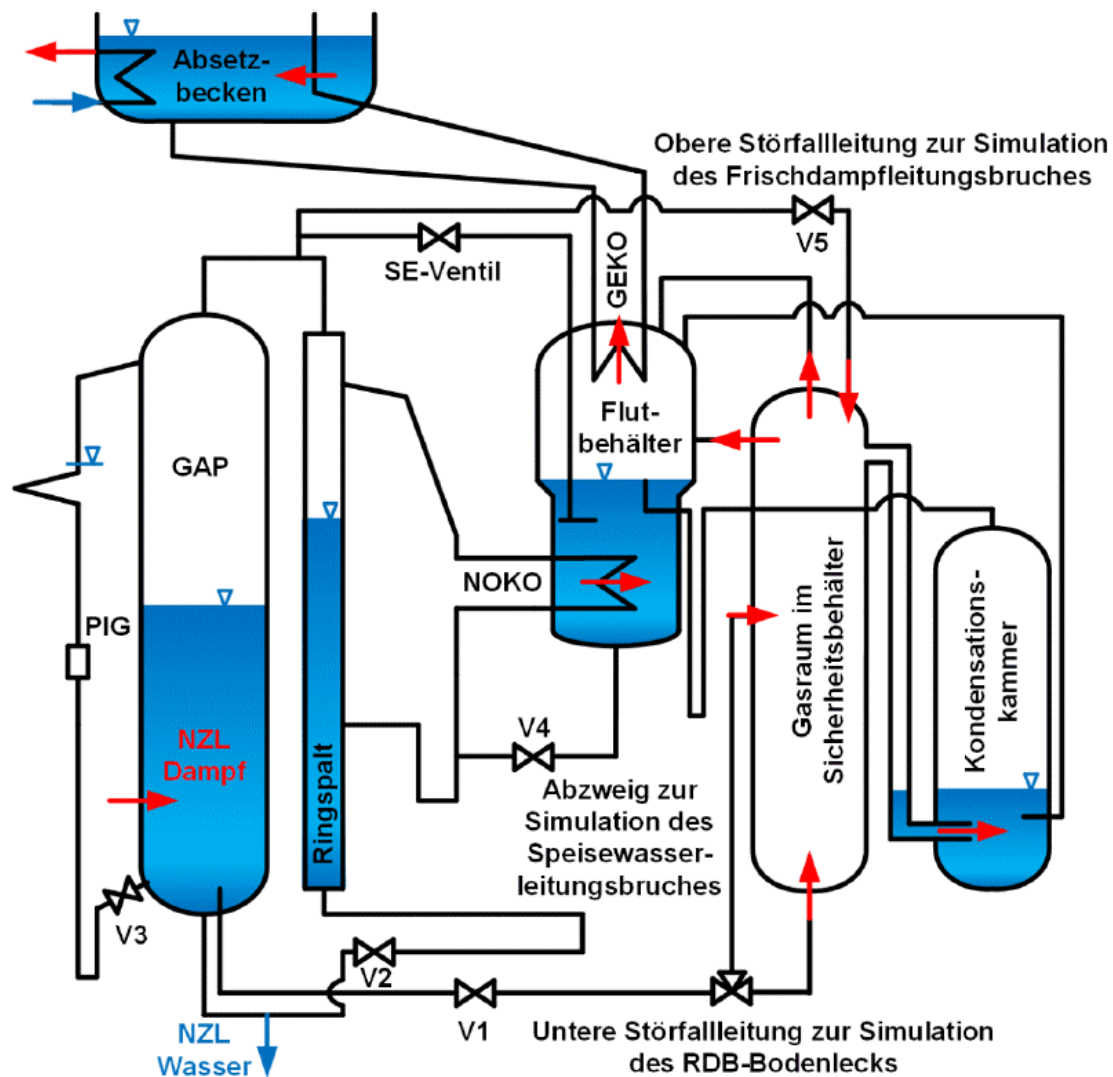


Abb. 3.71 Vereinfachte schematische Darstellung der INKA-Versuchsanlage /LEY 12/

3.2.2.1 INKA-Versuchsaufbau

Zur Untersuchung der physikalischen Phänomene im Gebäudekondensator wurde eine Reihe von Versuchen sowohl mit reiner Containment-Dampf-atmosphäre als auch mit einer Mischung aus Dampf und Luft durchgeführt. Für die Versuche zum Gebäudekondensator kamen nur der Flutbehälter (FPV) und das Absetzbecken (SSPV) des INKA-Teststands (s. auch Abb. 3.71) zum Einsatz /WAG 17/.

Der Flutbehälter hat eine Höhe von 11,35 m (Abb. 3.72) und einen Innendurchmesser von 5 m im unteren Bereich, in dem sich der Notkondensator befindet, und 5,5 m im oberen Bereich, in dem der Gebäudekondensator installiert ist. Das freie Gasvolumen des Flutbehälters beträgt ca. 220 m³ /BUC 18b/. Vor Beginn des Versuchs wurde die Atmosphäre im Flutbehälter auf eine Dampfatmosphäre mit einem Referenzdruck konditioniert. Somit wurden auch die Wände der Kondensatorrohre und die Behälterwände bis auf die Atmosphärentemperatur aufgeheizt. Am Flutbehälter wurde eine Druckregleinrichtung installiert, um den Druck konstant zu halten. Der Flutbehälter war an der Außenseite mit Steinwolle (80 mm) und Abdeckblechen aus Aluminium (2 mm) isoliert.

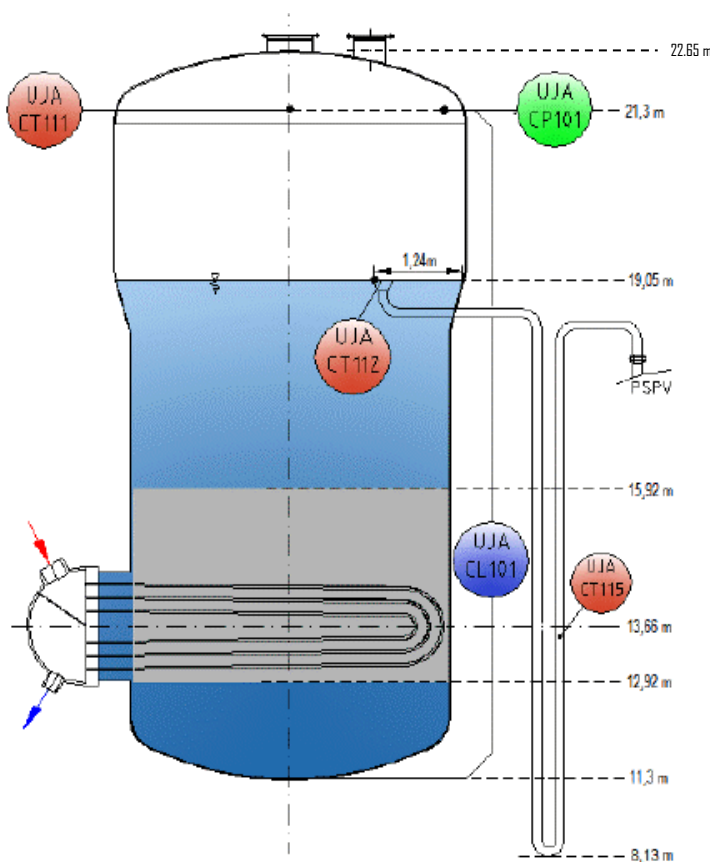


Abb. 3.72 Flutbehälter mit Messstellen für den Druck und die Temperatur /WAG 17/

Das Absetzbecken (SSPV in Abb. 3.71) hat eine Höhe von 7,34 m und ein Wasservolumen von ca. 29 m³. Das Wasser im Absetzbecken wurde bei den meisten Experimenten aktiv mittels eines geschlossenen Kühlkreislafs gekühlt. Durch eine Pumpe wird das warme Wasser aus dem Absetzbecken durch einen Kühler gefördert und dann wieder in das Absetzbecken zurückgeführt. Das Absetzbecken war zwar zur Atmosphäre offen, sonst aber rundum mit Isolierung (Steinwolle, 80 mm) und Abdeckblechen (Aluminium, 2 mm) isoliert.

In allen Versuchen war der Notkondensator (NOKO) im Flutbehälter entleert und primärseitig zur Atmosphäre offen. Die Energiezufuhr in den Flutbehälter erfolgte durch Frischdampfeinspeisung mittels einer Einspeisedüse am Boden des Flutbehälters, die zu Beginn des Versuchs mit kaltem Wasser (Wasservorlage) überdeckt war.

Zu Beginn der Versuche waren zunächst die Ventile im Rücklauf des Gebäudekondensators vollständig geöffnet, um ein Unterdruckversagen des Kondensators zu verhindern. Die Zulaufventile waren allerdings geschlossen, so dass nicht schon vor Versuchsbeginn Wärme aus dem Flutbehälter abgeführt wird. Allerdings war somit das Wasser im Kondensatorkreislauf bereits aufgewärmt. Die Versuche wurden gestartet, indem die Zulaufventile geöffnet wurden /WAG 17/. Dadurch strömt das kalte Kühlwasser aus dem Absetzbecken in den Gebäudekondensator. Der an der Wasseroberfläche im Flutbehälter erzeugte Dampf kühlt sich an den geneigten Wärmetauscherrohren (WTR) des Gebäudekondensators ab und tropft in die Flutbecken zurück. Auf der Innenseite der WTR erwärmt sich das Kühlwasser, aufgrund der Dichtereducierung entsteht dann eine aufwärts gerichtete Strömung. Gleichzeitig fließt kaltes Wasser aus dem Absetzbecken in die WTR nach, d. h., es stellt sich ein Naturumlauf ein. Im Rücklauf kommt es im Verlauf der Versuche durch die Abnahme des hydrostatischen Druckes innerhalb der WTR zur Dampfbildung, da die Sättigungstemperatur erreicht wird. Der Dampf tritt zusammen mit Wasser aus dem WTR aus (Zweiphasenströmung, kondensiert aber auch teilweise in der Rücklaufleitung und Kondensat fließt wieder zurück in die WTR. Es kann sich also zeitweise eine zweiphasige Gegenströmung ausbilden. Abb. 3.73 zeigt die mögliche Ausbildung einer inneren Strömungsschicht aus Kondensat und einer äußeren Strömungsschicht aus Dampf. Durch den Naturumlauf steigt die Wassertemperatur im Absetzbecken langsam an und somit auch die Eintrittstemperatur des Gebäudekondensators.

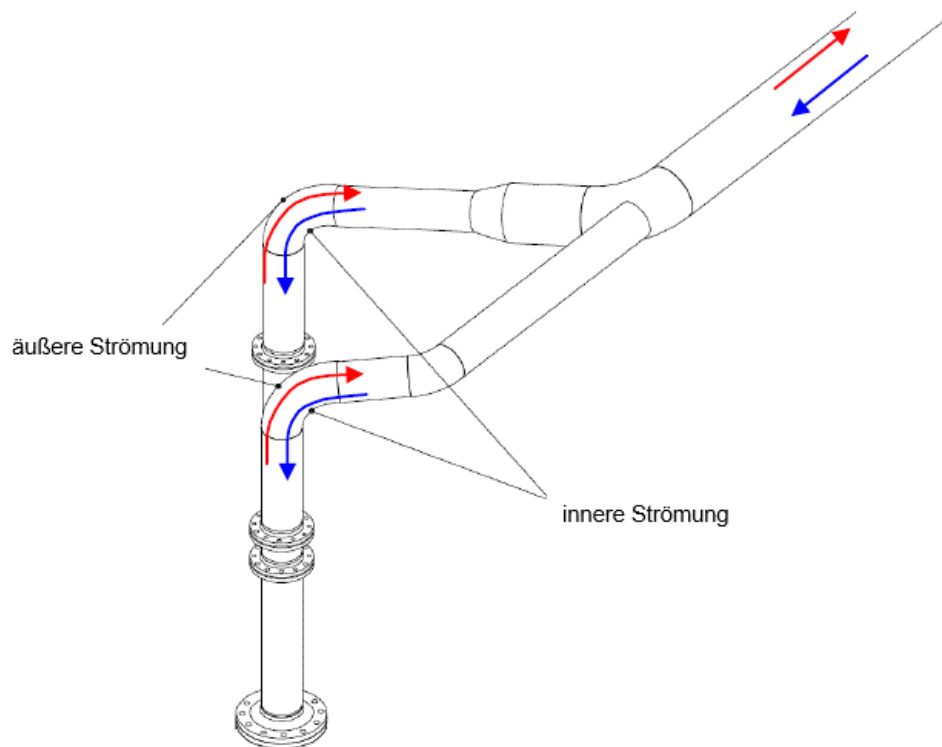


Abb. 3.73 Ausbildung von inneren (Kondensat) und äußeren (Dampf) Strömungsschichten in der Rücklaufleitung des Gebäudekondensators /WAG 17/

3.2.2.2 Auswahl von Experimenten zur Nachrechnung

Zur Validierung des GEKO-Gebäudekondensator-Modells in COCOSYS wurden aus den von Framatome zur Verfügung gestellten experimentellen Daten ein Experiment mit reiner Dampf-atmosphäre (CCC_040_025_100_01) und ein Experiment mit einem Dampf-Luft-Gemisch bzw. mit sehr niedrigem Dampfgehalt (CCC_050_030_20_01) ausgewählt. Die Auswahl des ersten Versuchs ist damit zu begründen, dass sich im Sicherheitsbehälter einer Reaktoranlage rund um den Gebäudekondensator eine reine Dampf-atmosphäre ausbilden kann. Die Auswahl des zweiten Versuchs erfolgte unter dem Aspekt, dass mit großer Wahrscheinlichkeit der Gebäudekondensator einer Reaktoranlage von einer Atmosphäre umgeben sein kann, die aus Dampf und nicht kondensierbaren Gasen wie Luft oder Wasserstoff besteht. Die Bezeichnung der Experimente CCC_WWW_XXX_YYY_ZZ ist wie folgt:

- WWW: Anfangstemperatur im Absetzbecken
- XXX: Anfangsdruck im Flutbehälter; z. B. 030 = 3 bar
- YYY: Dampfanteil im Flutbehälter um den GEKO
- ZZ: laufende Nummer

Im Versuch CCC_040_025_100_01 beträgt der Anfangsdruck im Flutbehälter 2,5 bar bei einer Temperatur von 132 °C, welche der gemessenen Temperatur (UJACT153) im Flutbehälter entspricht (Überhitzung). Im zweiten Versuch beträgt der Systemdruck im Flutbehälter zu Beginn 3,05 bar und die Atmosphärentemperatur entspricht der zu Beginn des Experimentes gemessenen Temperatur (96,23 °C), s. Tab. 3.1. Die Anfangstemperatur des Wassers im Absetzbecken liegt beim Versuch CCC_040_025_100_01 bei ca. 38 °C, während im Versuch CCC_050_030_20_01 die Kühlmitteltemperatur ca. 30 °C beträgt.

Tab. 3.1 Anfangs- und Randbedingungen der für die COCOSYS-Nachrechnungen ausgewählten INKA-Experimente

Experiment	Druck (bar) (UJACP101)	Temperatur (°C) (UJACT153)	Wassertemperatur, (°C) (UJACT141)	Dampfanteil, (%)
CCC_040_025_100_01	2,5	132,0	38	100
CCC_050_030_20_01	3,0	96,23	30	20

3.2.2.3 COCOSYS-Datensatz

Für die Validierung des GEKO-Modells wurde von der RWTH Aachen im Rahmen des EASY-Projektes ein COCOSYS-Datensatz entwickelt /BUC 18b/, wobei von der INKA-Versuchsanlage im Datensatz nur der Flutbehälter und das Absetzbecken modelliert sind. Der COCOSYS-Datensatz umfasst 6 Zonen für den Flutbehälter und 2 Zonen für das Absetzbecken. Die Umgebung wird als eine Raumzone (ENVIRON) abgebildet. Die Abb. 3.74 zeigt die COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters der INKA-Versuchsanlage.

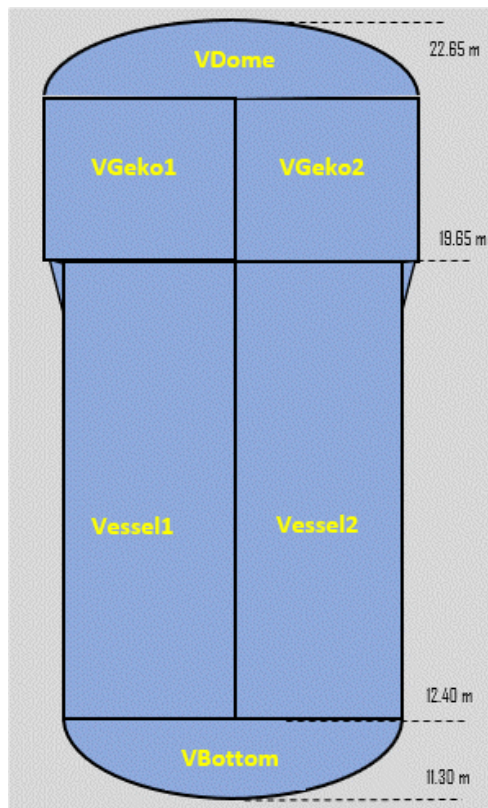


Abb. 3.74 COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters der INKA-Versuchsanlage

Zur Modellierung aller Zonen wird das Nichtgleichgewichtsmodell von COCOSYS verwendet. Die Zusammensetzung der Atmosphäre (Luft, Dampf, sonstige Gase) kann in COCOSYS auf verschiedene Arten erfolgen. Gasgemische aus Dampf und Luft können einerseits durch die Kombination aus Druck, Temperatur sowie der Sättigung der Atmosphäre, andererseits aus Druck, Temperatur und der entsprechenden Partialdrücke definiert werden. In den vorliegenden Nachrechnungen wurde die Kombination aus Druck, Temperatur und der entsprechenden Dampfpartialdrücke verwendet. So wurde auf die Gastemperatur und den entsprechenden Dampfpartialdruck zurückgegriffen. Dies bedeutet, dass auch bei einer in Realität reinen Dampfatmosphäre, wie z. B. im Versuch CCC_040_025_100_01 ein Rest an Luft für alle Zonen des Flutbehälters definiert werden muss. Für den Versuch mit reiner Dampfatmosphäre (CCC_040_025_100_01) ergibt sich damit ein Dampfgehalt von 99,9 %, während der Rest an Luft 0,1 % beträgt. So liegt der Systemdruck im Flutbehälter zu Beginn der Simulation bei 2,32 bar und die Atmosphärentemperatur entspricht der zu Beginn des Experimentes gemessenen Temperatur (132 °C) im Flutbehälter. Für den Versuch mit einem Dampf-Luft-Gemisch (CCC_050_030_20_1) wurde der Dampfgehalt auf 20 % gesetzt, so dass der Rest an Luft bei 80 % liegt. In dem Fall beträgt der Systemdruck im Flutbehälter zu Beginn der Simulation 3,05 bar und die Atmosphärentemperatur entspricht der zu Beginn des

Experimentes gemessenen Temperatur (96,23 °C) im Flutbehälter. Aufgrund fehlender Informationen konnte die Druckregeleinrichtung am Flutbehälter nicht modelliert werden.

Weiterhin sind die Zonen des Flutbehälters durch insgesamt 8 Verbindungen miteinander verknüpft, die ausschließlich waagrecht und senkrecht angeordnet sind. Als Strömungsfläche wird die jeweilige geometrische Querschnittsfläche zwischen den Zonen verwendet /BUC 18b/.

Der COCOSYS-Datensatz berücksichtigt die in den einzelnen Zonen vorhandenen wärmeleitenden Strukturen wie Decken, Böden und Wände aus Stahl. Den Zonen des Flutbehälters sind insgesamt 6 wärmeleitende Strukturen zugeordnet. Beim Absetzbecken werden die Wände und der Boden mit 3 wärmeleitenden Strukturen abgebildet. Die Strukturen des Flutbehälters sowie des Absetzbeckens sind mit 3 Schichten unterschiedlicher Materialien – Stahl (20 bzw. 14 mm), Isolierung, (Steinwolle, 80 mm) und Abdeckblechen (Aluminium, 2 mm) abgebildet. Dabei ist jede einzelne Materialschicht in mehrere Temperaturnodes unterteilt. Für alle wärmeleitenden Strukturen wird das neue kombinierte CO1-Wärmeübertragungsmodell angewendet. Für die Strukturen des Flutbehälters wurden im Datensatz die jeweiligen Anfangstemperaturen als Randbedingungen definiert. Da die Atmosphäre im Flutbehälter zu Beginn der Versuche auf eine Dampfatmosphäre beim Referenzdruck konditioniert wurde, wurde auch die Temperatur der Behälterwände zu Beginn der Nachrechnung auf Höhe dieser Atmosphärentemperatur der angrenzenden Zonen eingestellt. Diese Randbedingung gilt nur für die Stahlschicht der Behälterwände. Dagegen wurde die Temperatur der Aluminiumverkleidung der Isolierung auf die Temperatur der Umgebung eingestellt, so dass sich durch die Isolierungsschicht von Steinwolle ein entsprechender Temperaturgradient ergab.

Bei der Überprüfung des vorhandenen COCOSYS-Datensatzes von der RWTH Aachen /BUC 18b/ wurde festgestellt, dass die Zuordnung der Strukturoberflächen zu den angrenzenden Zonenatmosphären (Flutbehälter und Umgebung) fehlerhaft war. Demzufolge wurde die korrekte Zuordnung der Strukturoberflächen angegeben. Es stellte sich aber heraus, dass die Ergebnisse der Nachrechnungen nur geringfügig von den vorgenommenen Korrekturen beeinflusst wurden, da die Stahlwände des Flutbehälters vorgeheizt waren.

Im COCOSYS-Datensatz wird die Energiezufuhr durch Einspeisen von überhitztem Dampf in den Wasserpool am Boden der Flutbehälterzone (VBottom) simuliert. Die Dampfeinspeisung ist in Form einer Tabelle implementiert, in der Massen- sowie

Enthalpiestrom vorgegeben ist. Wenn der Wasserpool zu sieden beginnt, wird dadurch Sattedampf in die Atmosphäre des Flutbehälters freigesetzt.

Der Gebäudekondensator wird in COCOSYS mittels des GEKO-Moduls simuliert, das durch Angabe des Kontrollwortes "C---- BUILD_COND" aktiviert wird /ARN 21a/. Das GEKO-Modul ist so aufgebaut, dass der Anwender keinen Einfluss auf die entsprechenden Modell-Gleichungen hat (sind fest implementiert) und lediglich die geometrischen Angaben sowie die thermodynamischen Anfangs- und Randbedingungen vorgeben kann. Der Gebäudekondensator ist im Datensatz auf zwei Zonen (VGeko1 und VGeko2, (s. Abb. 3.74) aufgeteilt. Daher sind zwei eigenständige, aber baugleiche Gebäudekondensatoren definiert, die je einer Hälfte des Originalgebäudekondensators entsprechen. Jede Kondensatorhälfte besteht aus 145 Wärmetauscherrohren, die in 5 Reihen angeordnet sind. Die Wärmetauscherrohre sind 4 m lang (s. Abb. 3.75 /WAG 17/) und werden dabei in 15 Segmente eingeteilt. Segment 1 repräsentiert dabei das Segment am Eintritt der WTR und Segment 15 den Übergang zum Rücklaufrohr. Für jedes Segment werden im GEKO-Modell sowohl die Siedeform bzw. Strömungsform und der Dampfanteil innerhalb der WTR als auch der Wärmeübergang aus der Atmosphäre des Flutbehälters in den Kondensator berechnet. Die Anzahl der Segmente basiert auf Erfahrungswerten, die sich bei früheren Nachrechnungen als geeignet herausgestellt haben. Jedes Wärmetauscherrohr hat einen Innendurchmesser von 34 mm mit einer Wandstärke von 2 mm. Die Wände der Kondensatorrohre werden je Segment in drei Temperaturnodes unterteilt, was eine Aufteilung in drei Schichten entspricht (s. Abb. 3.76). Der Neigungswinkel der WTR beträgt $5,7^\circ$ gegenüber der Horizontalen.

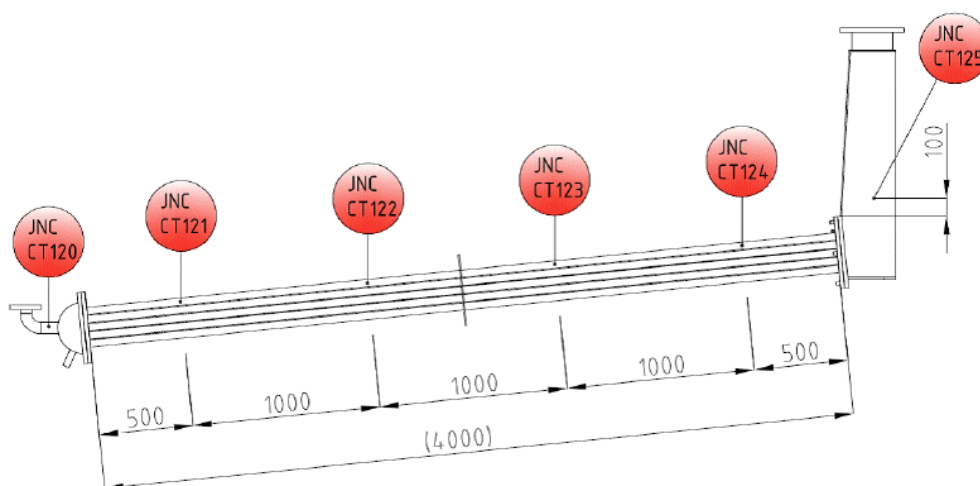


Abb. 3.75 Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators mit Messstellen für die Temperatur des Kühlmittels /WAG 17/

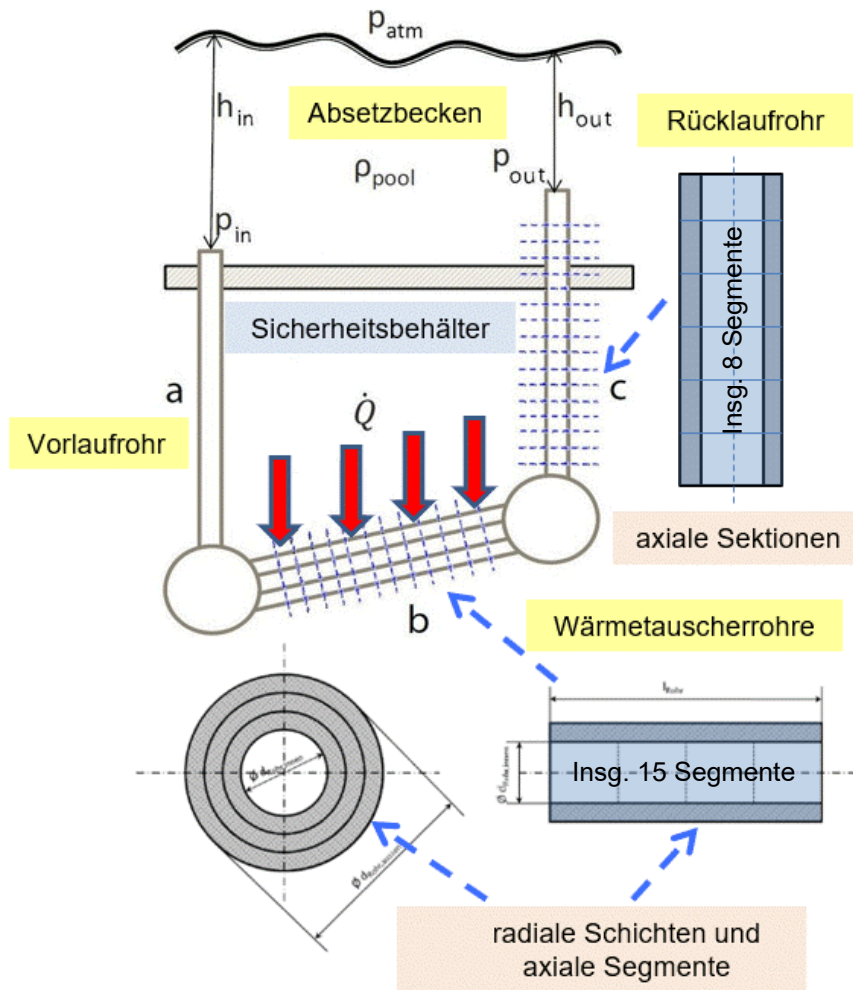


Abb. 3.76 Nodalisierungsschema des Rücklaufrohres und der Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators

Die Vor- und Rücklaufrohre des Gebäudekondensators haben einen Durchmesser von 82,5 mm bzw. 200 mm, die jeweils als engste Querschnitte verwendet wurden. Das Vorlaufrohr ist im GEKO-Modul als eine Zone betrachtet, in der eine einphasige Strömung ohne Wärmeübertragung angenommen wird. Das Rücklaufrohr wird insgesamt in 8 axiale Sektionen unterteilt (Schema s. Abb. 3.76). Sektion 1 modelliert dabei die Sektion am Eintritt des Rücklaufrohrs und Sektion 8 die Sektion zum Absetzbecken. Die Materialeigenschaften der Wärmetauscherrohre, wie z. B. Wärmeleitfähigkeit oder Wärmekapazität, sind durch die entsprechenden Angaben für das GEKO-Modul angegeben.

Im GEKO-Modul wird anstelle der originalen Rohrleitungslängen von Vor- und Rücklauf nur die Höhendifferenz zwischen Ein- und Auslass verwendet. Für das Vorlaufrohr beträgt diese 4,444 m, gemessen von der Unterkante des Absetzbeckens (23,994 m) bis zum Mittelpunkt des Verteilers (19,55 m) im Gebäudekondensator (Abb. 3.77). Für das

Rücklaufrohr liegt die Höhendifferenz bei 7,850 m, gemessen von der Stelle, an der die WTR in den Sammler münden (20,0 m) bis zur Mitte der Lochdüse im Absetzbecken (27,85 m) (Abb. 3.77).

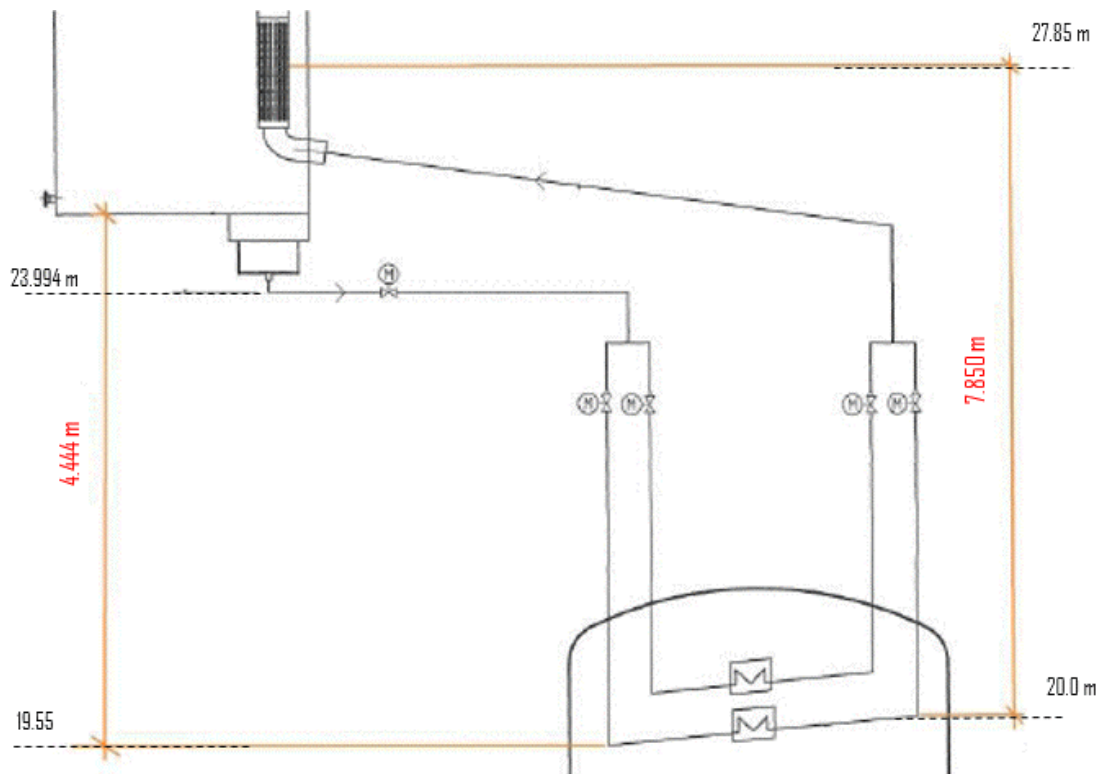


Abb. 3.77 Höhendifferenzen zwischen Gebäudekondensator und Absetzbecken

Für das ganze Strömungssystem aus WTR, Vorlauf- und Rücklaufleitungen kann im GEKO-Modul nur ein Widerstandsbeiwert vorgegeben werden. In der vorliegenden Nachrechnung wurde ein Widerstandsbeiwert von 0,6 definiert. Wie in Abb. 3.77 dargestellt ist, mündet die Rücklaufleitung des Gebäudekondensators oberhalb der Höhenlinie der Vorlaufleitung, so dass sich im Experiment eine Temperaturschichtung innerhalb des Absetzbeckens ausgebildet hat, d. h. das Wasser an der Eintrittsöffnung zum Kondensator ist kälter als das Wasser im Bereich der Austrittsöffnung. Zur Simulation der Aufheizung und der Temperaturschichtung wurde das Absetzbecken in zwei einzelne nebeneinander liegende COCOSYS-Zonen unterteilt. Diese sind mit einer speziellen Verbindung von ATM_FULL-Typ verknüpft, die zum einen den Ausgleich des Wasserspiegels, zum anderen aber auch den Energieaustausch zwischen den Wasserbereichen der Zonen ermöglicht. Für diese Verbindung kann ein Vorfaktor angegeben werden, der die Simulation der thermischen Wasserkonvektion innerhalb des Absetzbeckens ermöglicht. Auf diese Weise ist es möglich, einen verzögerten Temperaturanstieg des Zulaufwassers aufgrund der Temperaturschichtung im Absetzbecken abzubilden.

Im Versuch war der Notkondensator (NOKO) nicht mit Wasser gefüllt und zur Atmosphäre offen. Im COCOSYS-Datensatz ist der Notkondensator nicht berücksichtigt.

3.2.2.4 Simulationsergebnisse

In den durchgeführten Nachrechnungen wurde die verfügbare COCOSYS-Entwicklerversion 3.0.1 (rev. 8882) angewendet.

Experiment CCC_040_025_100_01

In Abb. 3.78 und Abb. 3.79 werden die im Versuch gemessenen Druck- und die Temperaturentwicklung im Flutbehälter den vom GEKO-Modell berechneten Simulationsergebnissen in ausgewählten Zonen (im Dom des Flutbehälters) gegenübergestellt.

In Abb. 3.78 lässt sich ein deutlich ausgeprägter Druckabfall im Flutbehälter unmittelbar nach Beginn der Simulation beobachten. Während der Konditionierungsphase des Experiments werden die Wärmetauscherrohre (WTR) des Gebäudekondensators auf die Temperatur der angrenzenden Atmosphäre des Flutbehälters (132 °C) aufgeheizt. Daher strömt mit Beginn des Experimentes kaltes Wasser aus dem Absetzbecken über die Vorlaufleitung in die bereits heißen Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators. Dagegen bekommen im GEKO-Modell die Wandschichten der WTR automatisch eine Anfangstemperatur, die aus der Atmosphärentemperatur unmittelbar um die WTR (132°C) und der Temperatur des Kühlwassers in den WTR (38 °C) berechnet wird. Diese beträgt im vorliegenden Fall ca. 85 °C. Somit stellt die Wärmetauscheroberfläche eine große Wärmesenke dar, so dass in der Simulation zu Beginn deutlich mehr Wärme aus der Flutbehälteratmosphäre (die den Sicherheitsbehälter repräsentiert) an den Gebäudekondensator abgegeben wird. Das führt dazu, dass der Druck und die Temperatur im Flutbehälter zu Beginn der Rechnung stark absinken. Langfristig weisen die mit COCOSYS berechneten Werte für Flutbehälterdruck und -temperatur eine gute Übereinstimmung mit den im Experiment gemessenen Druck- und Temperaturwerten auf.

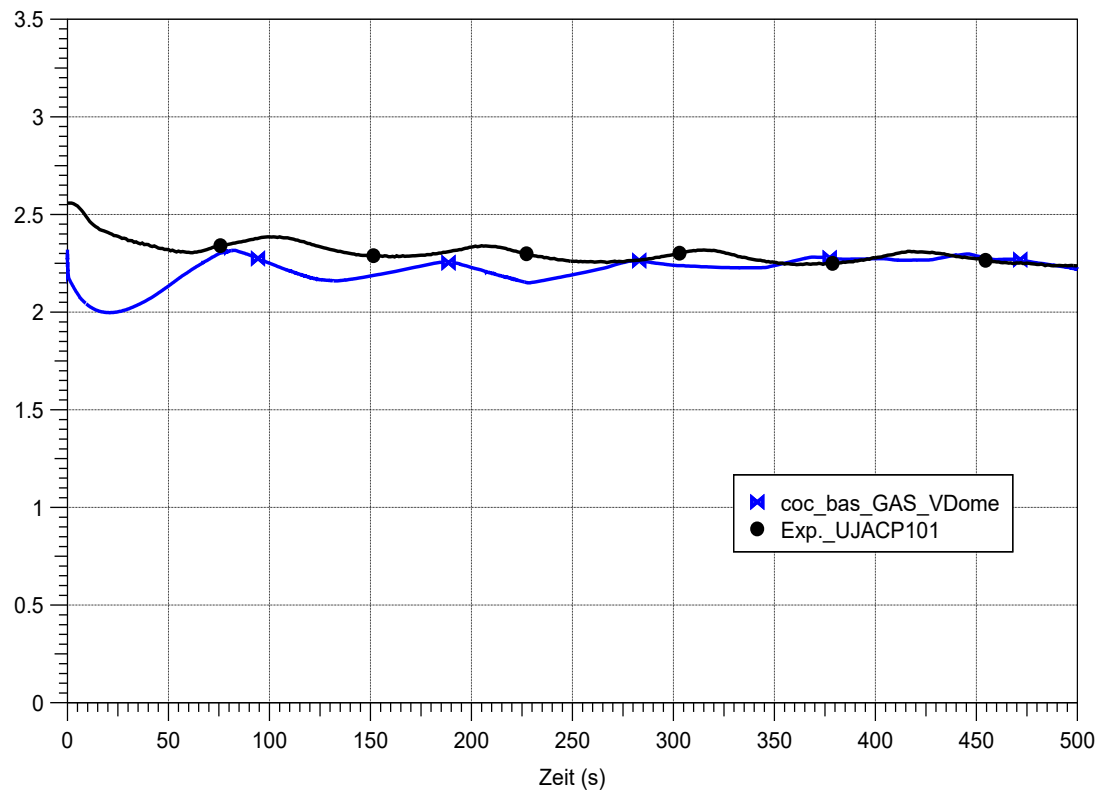


Abb. 3.78 CCC_040_025_100_01, Vergleich des berechneten Druckes mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im Dom des Flutbehälters.

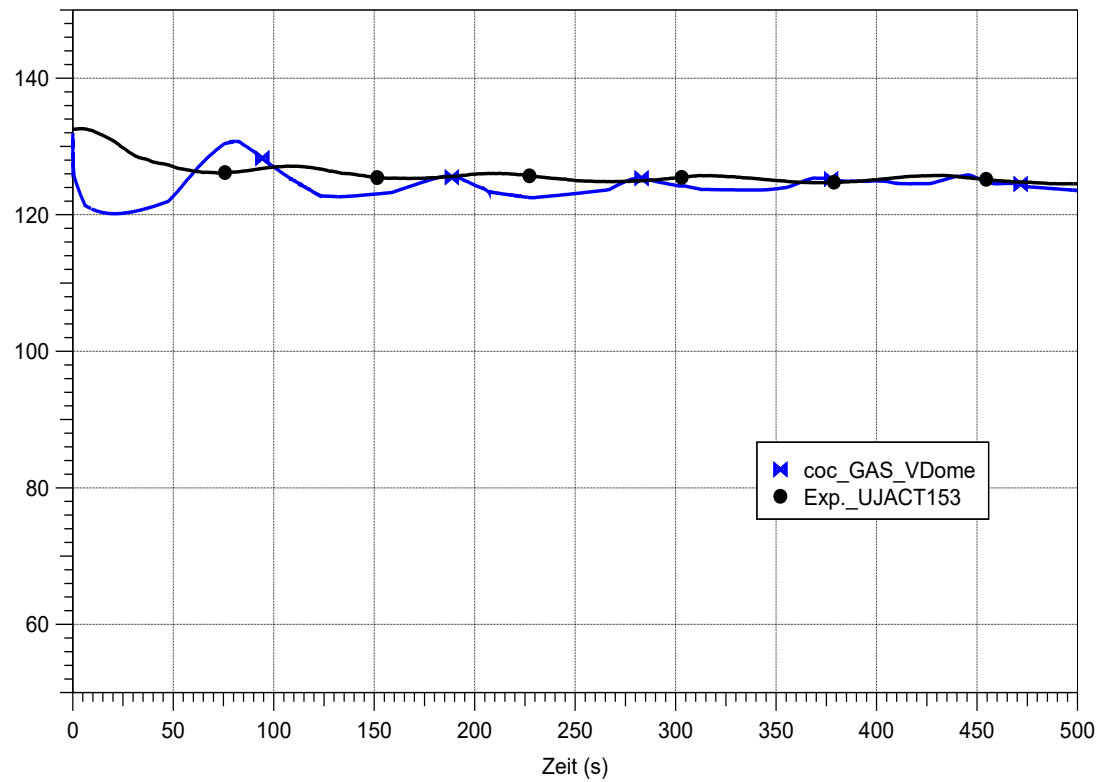


Abb. 3.79 CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Atmosphärentemperatur mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter

Abb. 3.80 zeigt den Vergleich des vom GEKO berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment gemessenen Massenstrom. Im Experiment wurde der Massenstrom auf der Basis des in der Vorlaufleitung gemessenen Volumenstromes (Ultraschallsonde JNCCF101) und der aus der Temperaturmessung JNCCT101 berechneten Fluidichte ermittelt. Da in der Nachrechnung zwei eigenständige Gebäudekondensatoren modelliert sind, ist der Massenstrom mit der Hälfte des Massenstroms aus dem Experiment verglichen.

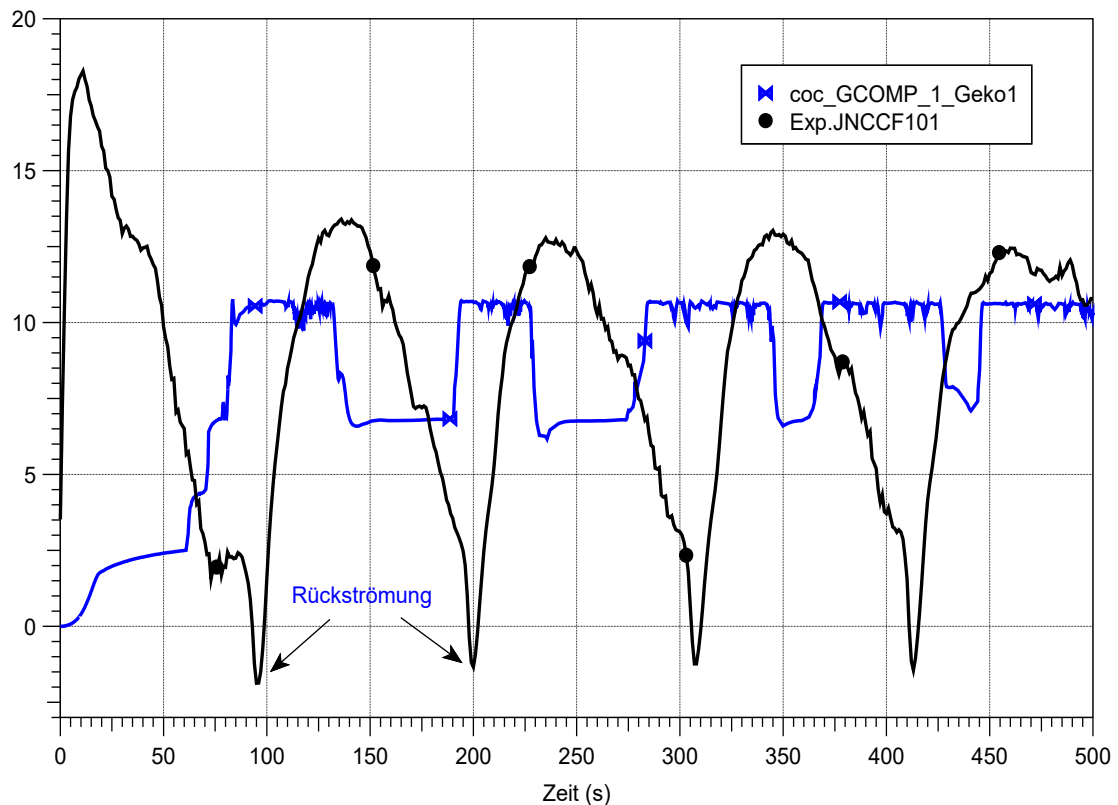


Abb. 3.80 CCC_040_025_100_01, Vergleich des berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom

Der im Experiment gemessene Massenstrom steigt unmittelbar nach Öffnung des Ventils in der Vorlaufleitung stark an und zeigt danach starke zyklische Schwingungen, welche dem Beginn der Siedevorgänge entsprechen. Diese Schwingungen können dadurch erklärt werden, dass bei der ersten Verdampfung in den Wärmetauscherrohren ein starker Dichteunterschied zwischen Ein- und Austritt auftritt, was zu einem schnellen Anstieg des Massenstroms durch den Kondensator führt. Der stark ansteigende Massenfluss fördert kaltes Wasser aus dem Absetzbecken durch die Kondensatorrohre bis zum Austritt, so dass der Verdampfungsprozess abnimmt und der Dichtegradient wieder stark abfällt (siehe auch Abb. 3.84). Durch die Überhitzung der Rohrwände entlang der Rohre bilden sich erneut Dampfblasen, und der Dichtegradient steigt wieder stark an, was

wiederum einen stark ansteigenden Massenstrom zur Folge hat. Die Schwingungen sollten so lange auftreten, bis sich das Wasser im Absetzbecken aufgeheizt hat und ein stabiler Siedevorgang vorherrscht. Abb. 3.80 kann auch entnommen werden, dass während des Experiments zeitweise eine Rückströmung durch den Kondensator stattgefunden hat. Die Rückströmung ist auch in der gemessenen Eintrittstemperatur als Temperaturpeak zu erkennen.

Dagegen beginnt der vom GEKO berechnete Massenstrom erst ab ca. 75 s zu steigen, was auf die niedrigere Eintrittstemperatur des Kühlmittels in den Kondensator im Vergleich zum Experiment zurückzuführen ist. Danach strebt der berechnete Massenstrom dem im Experiment gemessenen Maximalwert zu. Aus Abb. 3.80 ist auch zu erkennen, dass der Massenstrom in der Rechnung unterschätzt wird. Die im Experiment beobachteten Schwingungen des Massenstroms können in COCOSYS bzw. im GEKO-Modell für den gerechneten Zeitraum (bis 500 s) wiedergegeben werden. Hingegen können die im Experiment aufgetretenen Rückströmungsvorgänge vom GEKO-Modell nicht berechnet werden. Die Verschiebung in der Zeitachse im Vergleich zum Experiment ist dadurch zu erklären, dass aufgrund der in der Rechnung anfänglich niedrigeren Eintrittstemperatur der Anstieg des Massenstroms langsamer abläuft als im Experiment.

In der Phase starker Schwingungen wird in der Rechnung der Bereich des vollentwickelten Blasensiedens erreicht, so dass am Austritt der Kondensatorrohre eine zweiphasige Strömung vorliegt. In dieser Phase ist die Eintrittstemperatur immer noch so niedrig, dass der Verdampfungsprozess, der entlang der Innenseite der WTR auftritt, durch das schnelle Nachströmen von Kühlwasser aus dem Absetzbecken unterbrochen wird. Dadurch fällt die Dichtedifferenz über die Kondensatorrohre ab und auch der Massenstrom nimmt damit ab. An dieser Stelle soll noch erwähnt werden, dass der maximale Massenstrom in der Rechnung nicht nur von der Wärmeaufnahme im Kondensator abhängig ist, sondern auch von der Geometrie bzw. den absoluten Höhen der Vorlauf- und Rücklaufleitungen. So haben die Angaben der absoluten Höhen einen Einfluss auf die Sättigungstemperatur in den Wärmetauscherrohren aufgrund des hydrostatischen Drucks als auch die Druckdifferenz zwischen Ein- und Austritt.

Wie aus der Abb. 3.81 zu ersehen, ist die berechnete Kühlleistung des Gebäudekondensators im Vergleich zum Experiment zu Beginn (in den ersten 5 s) stark überschätzt. Zu Beginn der Simulation ist die Wandtemperatur der WTR deutlich niedriger (85 °C) im Vergleich zum Experiment (132 °C), so dass ein deutlich höherer Wärmestrom aus der Flutbehälteratmosphäre an den Gebäudekondensator abgeführt wird. Die höhere

Wärmeabfuhr zeigt sich auch im berechneten Druck- und Temperaturabfall direkt nach dem Start der Rechnung (s. Abb. 3.78).

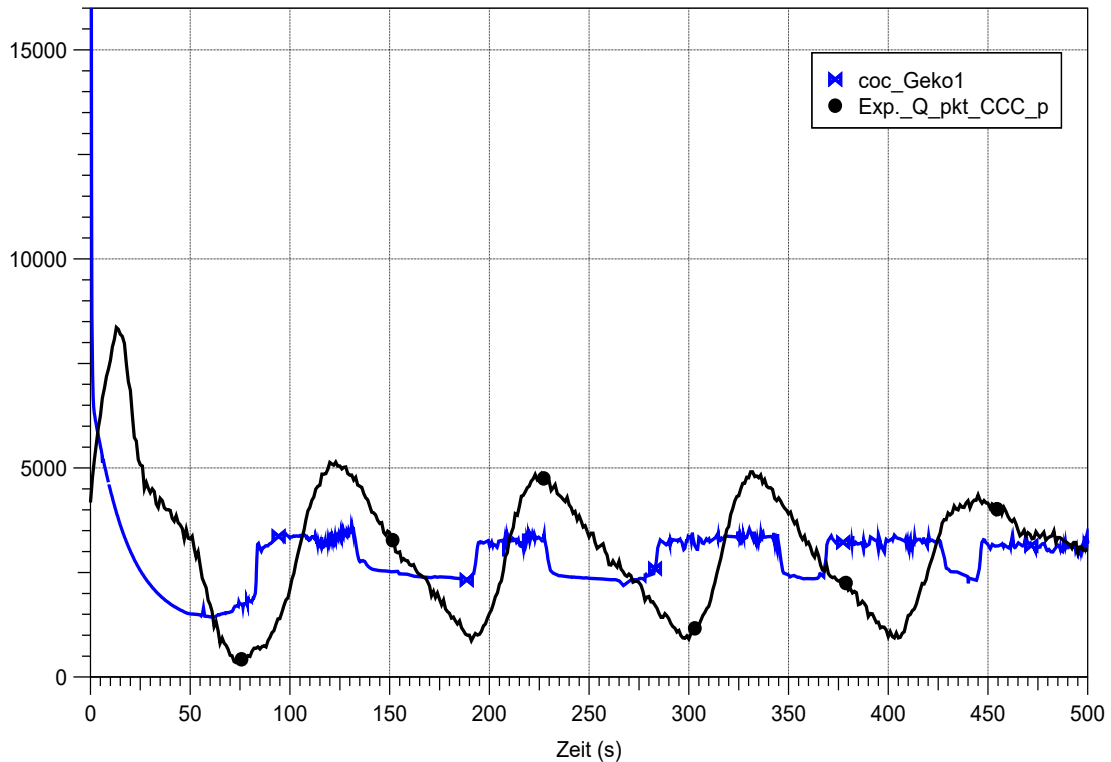


Abb. 3.81 CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators

Langfristig zeigt sich, dass die berechnete Wärmeabfuhr die experimentellen Werten unterschätzt, was die Folge der bereits diskutierten Unterschätzung des Massenstroms durch den Kondensator im Vergleich zum Experiment ist. Abb. 3.82 zeigt den Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der im Experiment ausgewerteten Kühlleistung des Gebäudekondensators. In den INKA-Versuchen wurden insgesamt drei Ansätze zur Auswertung der Kühlleistung des Gebäudekondensators verwendet. Für den Vergleich wurde hier das sogenannte „Druckmodell“ angenommen, bei dem die Veränderung des Drucks im Flutbehälter während des Experimentes betrachtet wurde. Die Leistung des Gebäudekondensators wird aus dem Dampfenthalpiestrom, der Energie in den Flutbehälter einbringt, dem Wärmeverlust, der durch die Flutbehälterwand auftritt, und der Änderung der inneren Energie, die sich aus den Parametern Druck, Temperatur und Masse im Flutbehälter bestimmen lässt, berechnet ($Q_{\text{pkt_CCC_pressure}}$). Aus dem Vergleich wird ersichtlich, dass zum Ende der Rechnung die berechnete Kühlleistung etwa 6.5 % unterhalb der im Experiment ermittelten Leistung des Kondensators liegt.

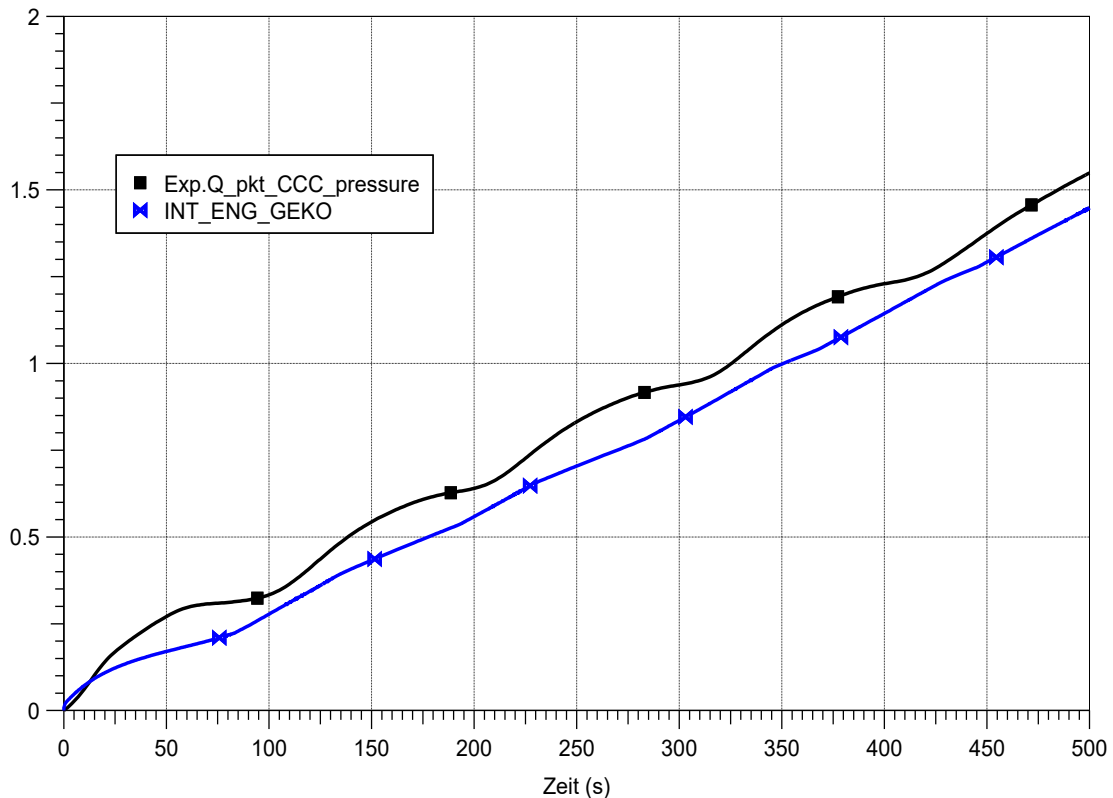


Abb. 3.82 CCC_040_025_100_01, Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der im Experiment ermittelten Kühlleistung

Kurze Zeit nach Beginn des Experimentes steigt die Kühlmitteltemperatur in den Wärmetauscherrohren des Gebäudekondensators an. Wie bereits oben erwähnt, sind in der vorliegenden Nachrechnung die WTR in 15 gleich große Segmente aufgeteilt. Abb. 3.83 zeigt den Vergleich der berechneten Kühlmitteltemperatur am Austritt (Segment 15 mit der gemessenen Kühlmitteltemperatur im Wärmetauscherrohr (JNCCT124, Position 3500 mm). Aus dem Vergleich ist deutlich zu sehen, dass die Kühlmitteltemperatur in der Simulation mit GEKO geringfügig unterschätzt wird. Da die maximale (Sättigungs-) Temperatur des Kühlmittels vom Druck im Kondensator abhängig ist, ist davon auszugehen, dass dieser vom GEKO-Modell auch unterschätzt wird. Diese Abweichungen lassen sich durch die Modellierung der Rohrleitungslängen und deren Einfluss auf die berechneten Parameter mit dem GEKO-Modell erklären. Im GEKO-Modell wird anstelle der originalen Rohrleitungslängen nur die Höhendifferenz zwischen Ein- und Austritt verwendet. Damit sind der Druck sowie die Sättigungstemperatur in den Wärmetauscherrohren von den Eingabedaten für die Höhen der Vorlauf- und Rücklaufleitungen abhängig.

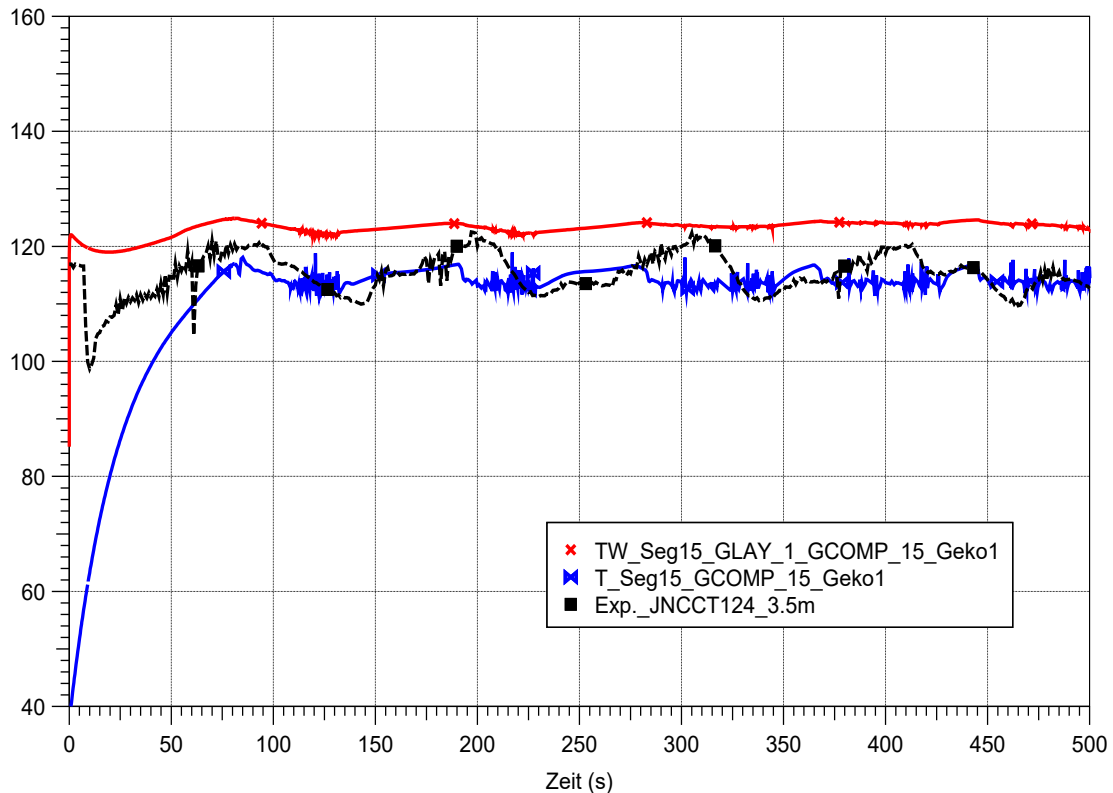


Abb. 3.83 CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Kühlmitteltemperatur (Seg_15) mit der im Experiment gemessenen Kühlmitteltemperatur im Wärmetauscherrohr sowie der Wandtemperatur

Abb. 3.83 zeigt auch die Wandtemperatur (TW) (GLAY_1, erster Temperaturknoten) des Wärmetauscherrohres. Aus der Abbildung ist zu sehen, dass nach 55 s die Wandtemperatur einen Wert von 121 °C erreicht hat, der oberhalb der Sättigungstemperatur des Kühlwassers zum Gesamtdruck (2,0 bar) liegt. Demzufolge setzt erstes Sieden in den Wärmetauscherrohren ein. Dabei bilden sich an der inneren Rohroberfläche die ersten Dampfblasen, die durch die Unterkühlung der Strömung direkt an der Wand wieder kondensieren. Somit entsteht ein partielles unterkühltes Sieden (Siedeform FLAGB = 2, Abb. 3.85), bei dem die Temperatur des Kühlmittels unter der Sättigungstemperatur (unterkühlt) liegt. Nach 78 s erreicht die Temperatur des Kühlmittels im Rohr die Sättigungstemperatur (117 °C) zum entsprechenden Gesamtdruck (1,82 bar), so dass sich im Laufe der Simulation ein gesättigtes Blasensieden (FLAGB = 4, Abb. 3.85) entlang der Kondensatorrohre (siehe Erklärung unten) ausbildet. Hier sollte noch erwähnt werden, dass die Temperatur an der inneren Rohroberfläche auch vom Massenstrom durch den Kondensator beeinflusst wird. Je geringer der Massenstrom, desto höher ist die Wandtemperatur des WTR. Primär ist aber die Wassertemperatur in den Wärmetauscherrohren, die sich von Segment 1 (Temperatur wie im Eintrittsbereich des Absetzbeckens,

Tank 2) bis Segment 15 maximal bis auf die entsprechende Sättigungstemperatur erhöht.

Abb. 3.84 stellt den volumetrischen Dampfgehalt im Inneren der Kondensatorrohre (Segment 3 bis 15) dar. Es fällt auf, dass die ersten Dampfblasen zunächst im Segment 15 am Austritt der WTR (rote Kurve) entstehen, was von der Überhitzung der Wärmetauscherrohrwand und der Unterkühlung des Wassers in den Rohren abhängig ist. Mit zunehmender Eintrittstemperatur beginnt auch die Dampfproduktion in den stromaufwärts liegenden Segmenten (s. Segment_6 bis _8). Ab ca. 55 s herrscht innerhalb der WTR eine niedrigere Temperatur vor, die zur vollständigen Kondensation der in den Wärmetauscherrohren gebildeten Dampfblasen führt, so dass ein unterkühltes Sieden vorliegt (FLAGB = 2, s. Abb. 3.85). Da die Temperatur des Kühlmittels im Innern des Segment 15 bei 78 s die Sättigungstemperatur erreicht, bildet sich eine zweiphasige Strömung, so dass ein vollentwickeltes Blasensieden (Strömungsform FLAGB = 4, s. Abb. 3.85) vorliegt. In diesem Zeitbereich liegt am Austritt (Segment 15) der Dampfgehalt bei ca. 98 %, während im Bereich am bzw. nahe dem Eintritt (Segment 3, Abb. 3.84) noch keine Dampfblasen entstehen.

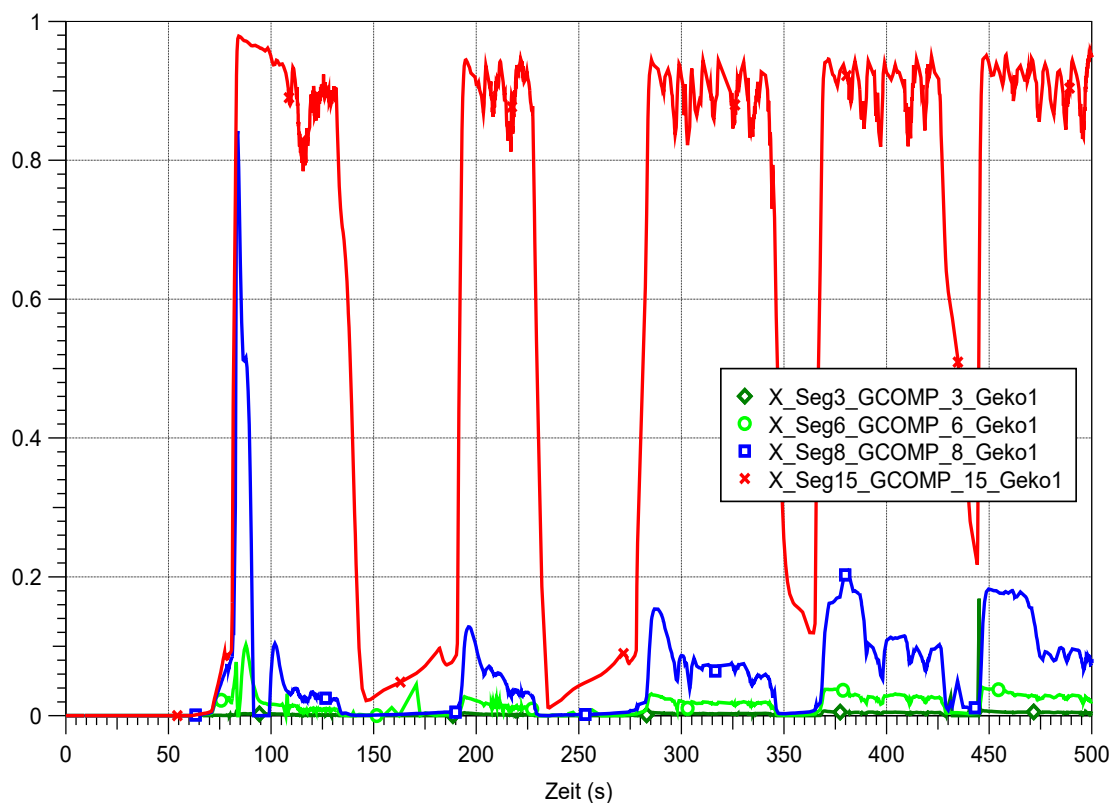


Abb. 3.84 CCC_040_025_100_01, berechneter volumetrischer Dampfgehalt entlang der WTR des Gebäudekondensators

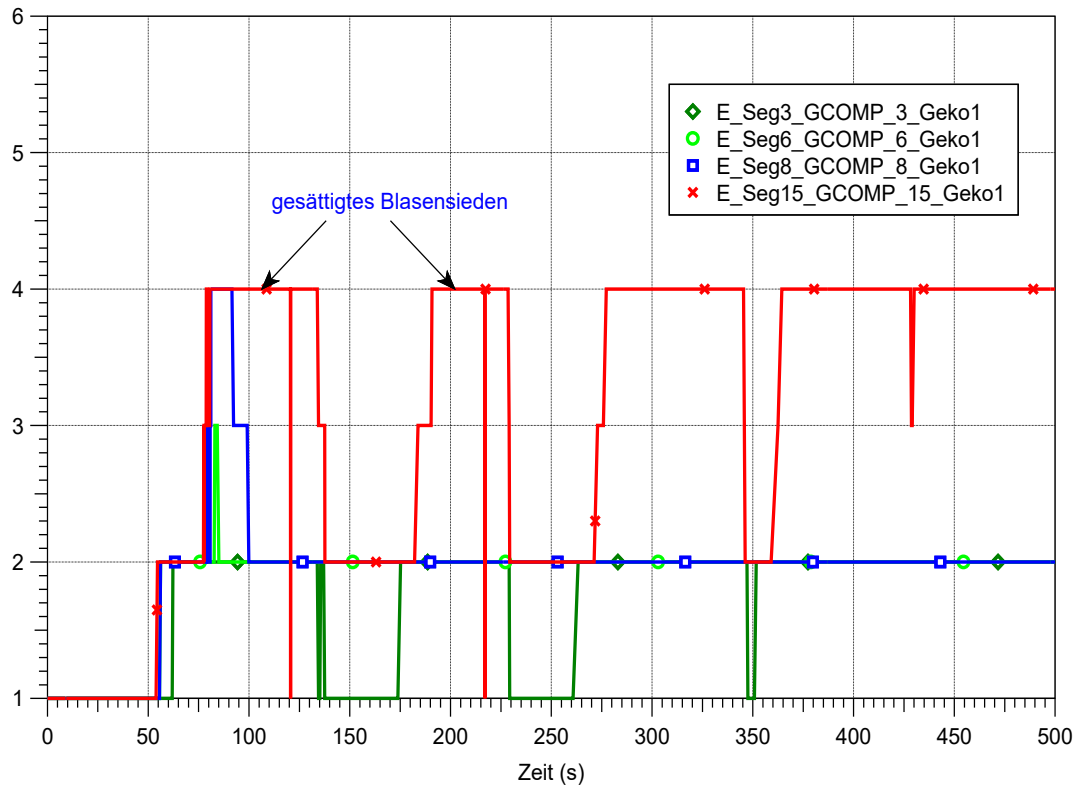


Abb. 3.85 CCC_040_025_100_01, berechnete Strömungsform (FLAGB) in den Wärmetauscherrohren des Gebäudekondensators

In Abb. 3.86 sind die vom GEKO-Modul berechneten Rücklauftemperaturen (Sektion 2 siehe Abb. 3.76) am Gebäudekondensator mit den entsprechenden im Experiment gemessenen Temperaturen in der Rücklaufleitung verglichen. Nach ca. 78 s erreicht die Rücklauftemperatur aufgrund der Abnahme des hydrostatischen Druckes entlang des Rohres die Sättigungstemperatur, und es kommt zur Dampfbildung in der Rücklaufleitung. Zu Beginn des vollentwickelten Blasensiedens (ca. 78 s) überschätzt die berechnete Rücklauftemperatur die im Rücklauf gemessene Temperatur. Danach wird eine Temperatur berechnet, die überwiegend nur minimal unter der Sättigungstemperatur zum Gesamtdruck des Kühlmittels in der Rücklaufleitung liegt.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Nachrechnung mit dem GEKO-Modul unter Berücksichtigung der angegebenen Geometrie der Vorlauf- und Rücklaufleitungen global eine akzeptable Übereinstimmung mit den experimentellen Temperaturmesswerten hinsichtlich der Rücklauftemperatur aufweist.

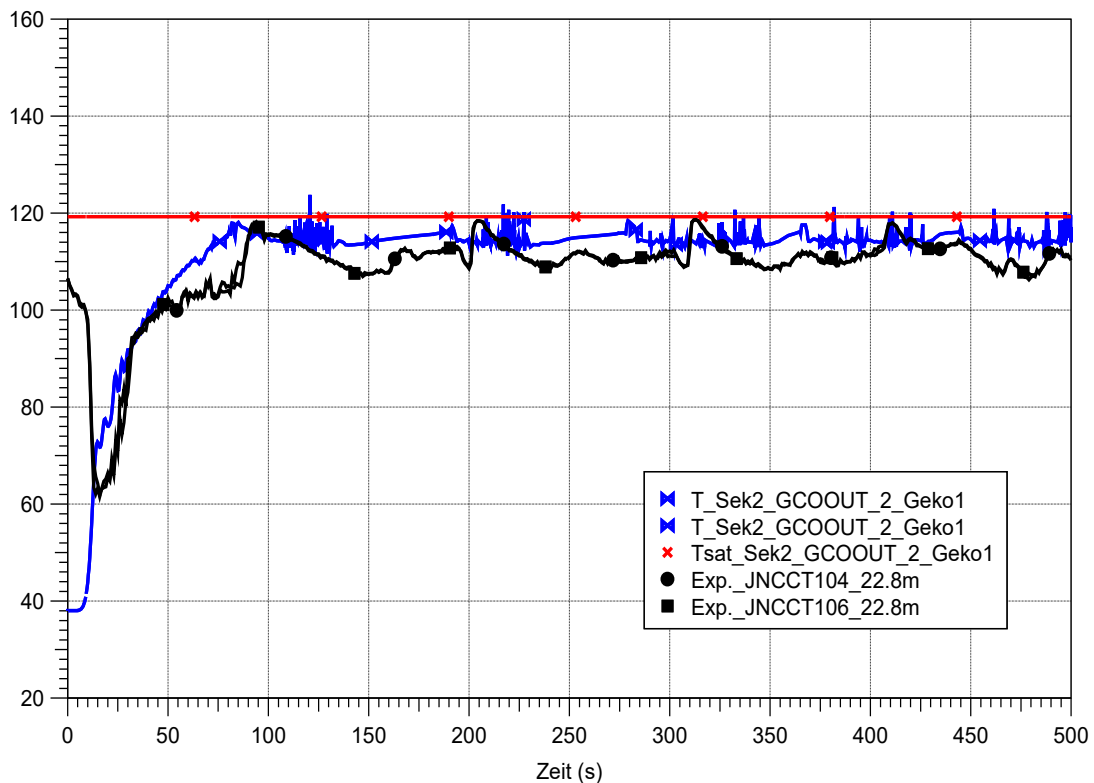


Abb. 3.86 CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Austrittstemperaturen (Sektion 2) am Rücklaufrohr mit den im Experiment gemessenen Temperaturen in der Rücklaufleitung (auf Höhe 22,8 m)

Wie bereits in Kapitel 0 erwähnt, bildet sich im Experiment eine Temperaturschichtung innerhalb des Absetzbeckens aus. Die Berücksichtigung dieser Temperaturschichtung ist wichtig, da die Eintrittstemperatur in den Kondensator im Laufe des Experiments allmählich steigt und das Wasser im Absetzbecken sich kontinuierlich aufwärmt. Die korrekte Eintrittstemperatur ist gerade für eine korrekte Berechnung der Siedevorgänge und der Zweiphasenströmung entlang der Kondensatorrohre entscheidend. Um die Temperaturschichtung im Absetzbecken simulieren zu können, wurde dieses in zwei einzelne Zonen (Tank 1 und Tank 2) unterteilt. Abb. 3.87 stellt die berechneten Wassertemperaturen in den beiden Zonen des Absetzbeckens (blaue und grüne Kurven) im Vergleich zu den im Experiment gemessenen Wassertemperaturen (schwarze Kurven) entlang der Höhe des Absetzbeckens dar (JNCCT401_25,88 m und JNCCT403_27,96 m). Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, verbleibt die Wassertemperatur in der Vorlaufzone (Tank 2) über einen längeren Zeitraum (ca. 130 s) auf einem niedrigen Wert von 38 °C, da die heiße Wasser-Dampf-Mischung am Austritt des Kondensators in die Rücklaufzone geführt wird. Diese führt dazu, dass sich das Wasser in der Rücklaufzone (Tank 1) erst ab ca. 75 s kontinuierlich aufheizt, während das Wasser in der Vorlaufzone (Tank 2) für einen bestimmten Zeitraum kühler bleibt. Während die Temperatur in Tank 2 sehr gut

nachgerechnet wird, ist die Wassertemperatur in Tank 1 (Austritt) nur tendenziell wiedergegeben. Insbesondere die mit dem zyklischen Verhalten im Kondensator verbundenen Effekte zeigen sich nicht in der berechneten Wassertemperatur im Absetzbecken.

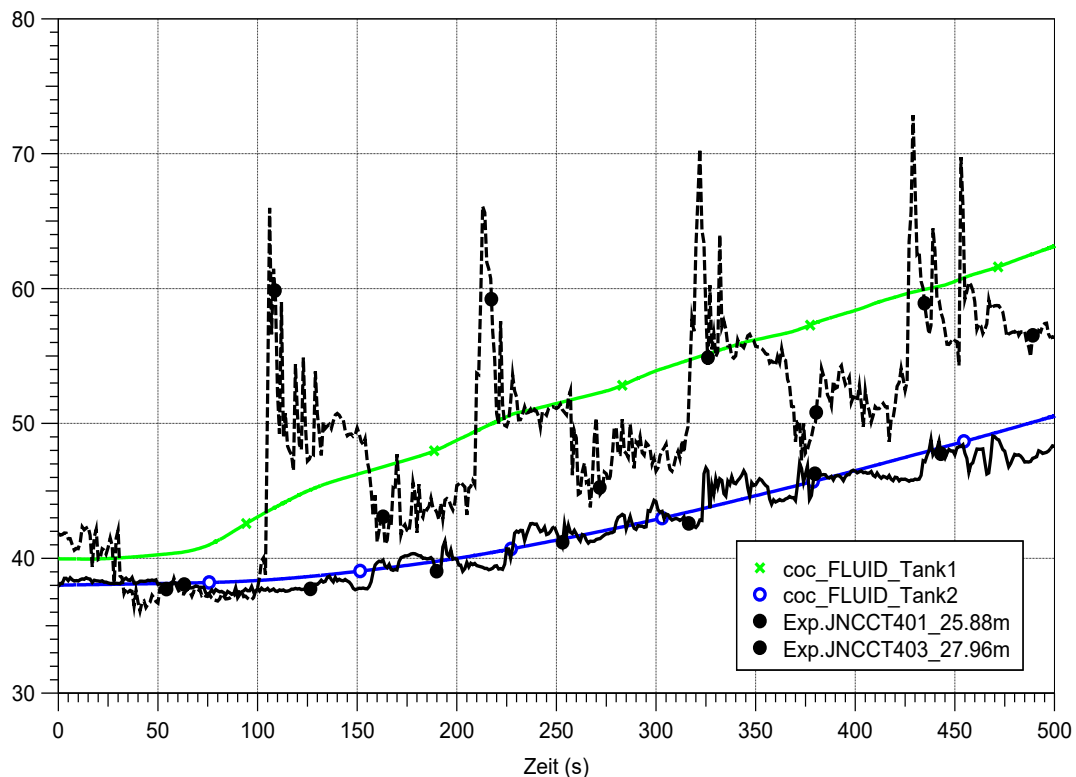


Abb. 3.87 CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen in zwei Zonen des Absetzbeckens mit den im Experiment gemessenen Wassertemperaturen entlang der Höhe des Absetzbeckens

Die Energiedifferenz zwischen der aus der Atmosphäre abgeführten Wärmeleistung und der vom GEKO in das Absetzbecken abgegebenen Wärme (Verlustwärme) ist die im Gebäudekondensator gespeicherte Energie (Wasser/Dampf in den Kondensatorrohren und Wärme in den Wänden der WTR). Abb. 3.88 zeigt für die COCOSYS-Nachrechnung einen Vergleich der im Gebäudekondensator gespeicherten Energie (BUILD_COND) mit dem berechneten Energiebilanzfehler (DIFFERENCE). Sowohl in den vorliegenden Validierungsarbeiten als auch bei der erstmaligen Anwendung des GEKO-Modells für die Simulation der passiven Wärmeabfuhr aus dem Containment eines WWER-1200 /BAK 14/ wurde festgestellt, dass ein systematischer Energiebilanzfehler vorliegt. Wie in Abb. 3.88 zu erkennen ist, liegt dieser Fehler in der Nachrechnung des INKA-Versuchs CCC_040_025_100_01 in der Größenordnung von 255 MJ (7,5 % bezogen auf die nach 500 s eingespeiste Dampfenergie in den Flutbehälter). Daraus lässt sich schließen, dass die Energiebilanz in COCOSYS hinsichtlich des GEKO-Modells noch nicht vollständig

ist. Darüber wurde schon bei der ersten Anwendung des GEKO-Modells berichtet /BAK 20b/, /BAK 14/.

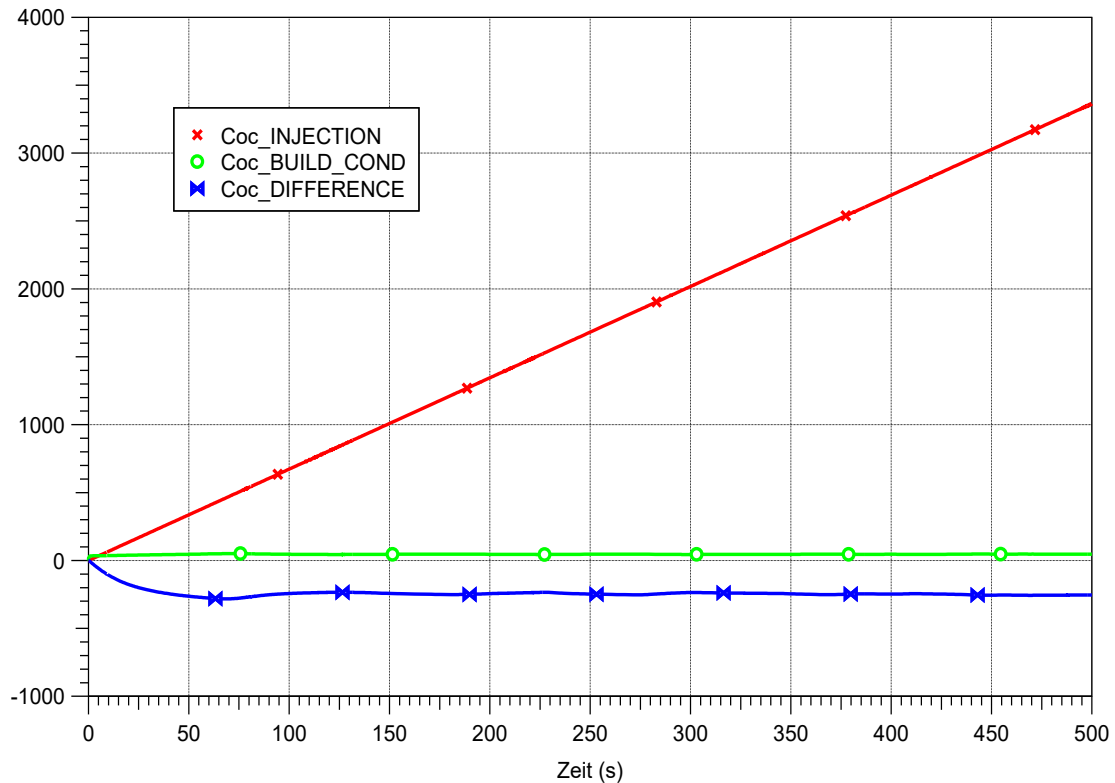


Abb. 3.88 CCC_040_025_100_01, Vergleich der in den Flutbehälter eingespeisten Dampfenergie (INJECTION) und der im Gebäudekondensator gespeicherten Energie (BUILD_COND) mit dem berechneten Energiebilanzfehler (DIFFERENCE)

Experiment CCC_050_030_20_1

In Abb. 3.89 und Abb. 3.90 sind für die Nachrechnung des zweiten Experimentes die berechneten Druck - und Temperaturverläufe mit den experimentellen Messwerten verglichen. Die Abbildungen zeigen, dass die berechneten Verläufe des Drucks und der Temperatur im Flutbehälter sowohl zu Beginn des Experimentes als auch zum Start der Rechnung ansteigen. Dies ist dadurch zu erklären, dass aufgrund der Freisetzung von gesättigtem Dampf an der Wasseroberfläche der Dampfpartialdruck steigt und somit auch der Druck und die Temperatur im Flutbehälter ansteigen. Gleichzeitig beginnt die Wärmeabgabe durch Kondensation an den WTR, welche zu einer Erwärmung des Wassers im Innern der Rohre führt, wodurch ein Dichteunterschied entlang der Kondensatorrohre entsteht. Dies hat zur Folge, dass die Kühlleistung des Kondensators ansteigt.

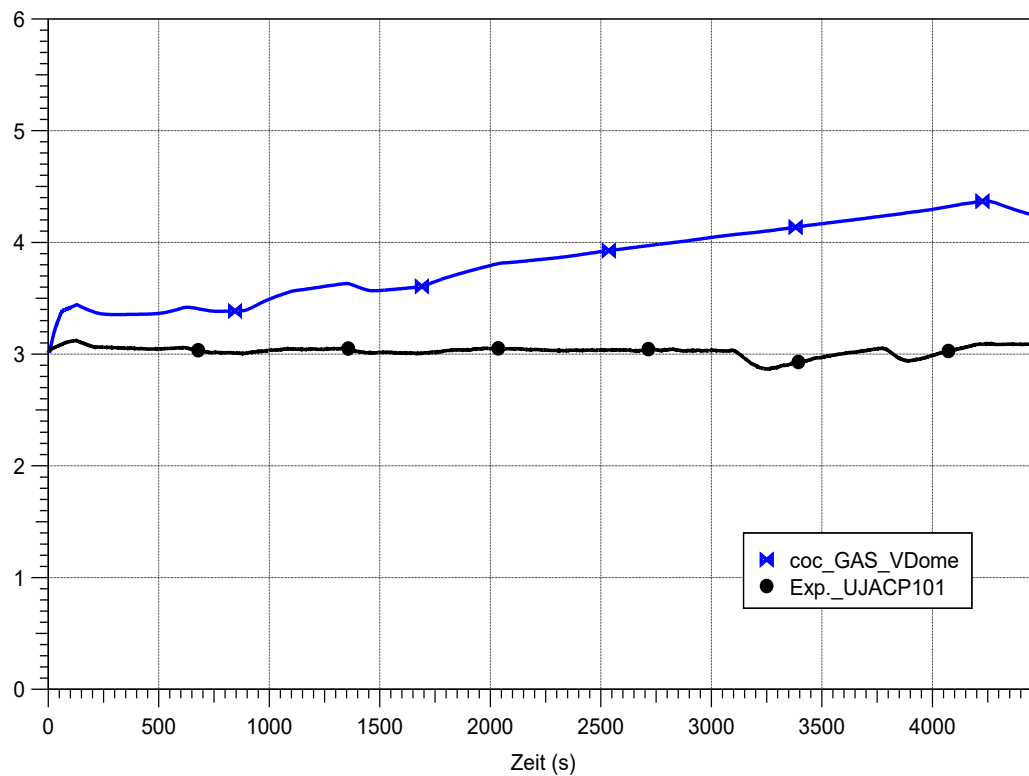


Abb. 3.89 CCC_050_030_20_1, Vergleich des berechneten Druckes mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im Dom des Flutbehälters

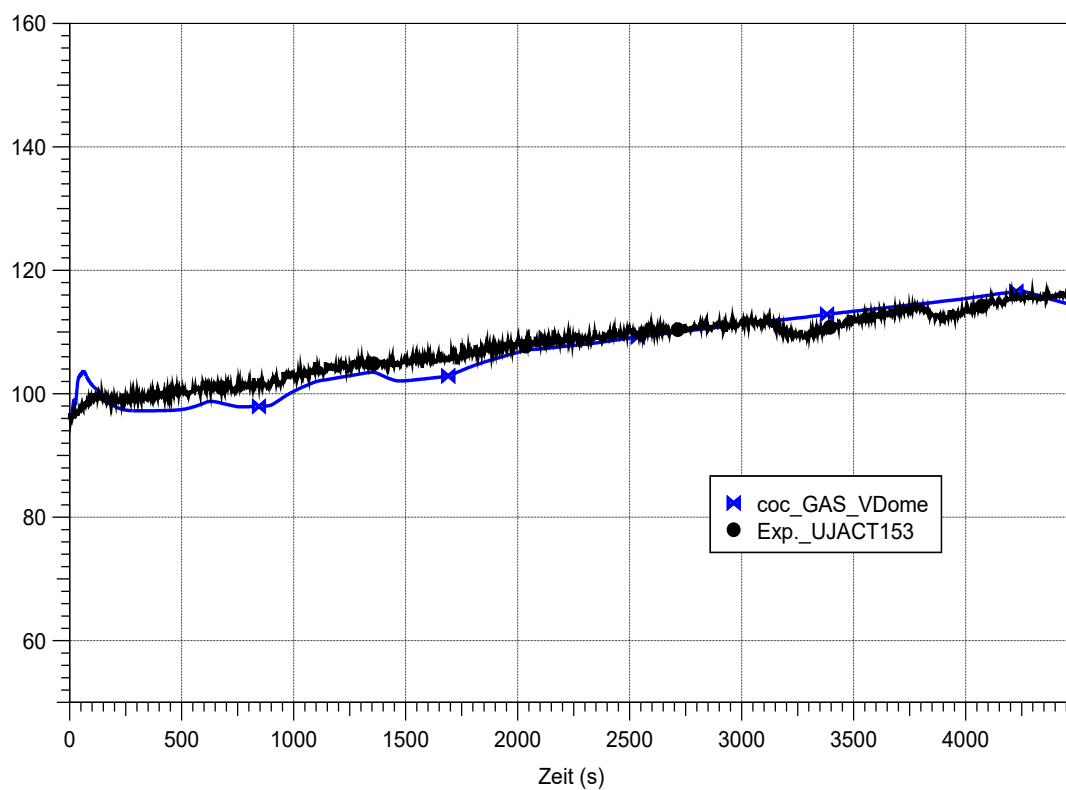


Abb. 3.90 CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten mit der im Experiment gemessenen Atmosphärentemperatur im Flutbehälter

Auffällig ist, dass die Atmosphärentemperatur in der Simulation nach einem anfänglichen Anstieg wieder abfällt und anschließend die experimentellen Temperaturwerte geringfügig unterschätzt. Hingegen bleibt der Druck in der Rechnung deutlich höher und überschätzt das Druckniveau im Experiment. Während der Temperaturverlauf in der Simulation langfristig gut mit der im Experiment gemessenen Temperatur übereinstimmt, steigt der Druck kontinuierlich an und überschätzt den gemessenen Druck bei 3.000 s um ca. 1,1 bar. Dieser Druckanstieg kann nur dadurch erklärt werden, dass in der Simulation das Druckregelventil auf dem Flutbehälter aufgrund fehlender Informationen nicht modelliert werden kann. Kurz nach 3.000 s kommt es im Gebäudekondensator zweifach zum Geysering /BUC 18b/, welches von COCOSYS bzw. vom GEKO-Modul nicht simuliert wird. Geysering zählt zu den thermohydraulischen Instabilitäten in Naturumlaufsystemen. Die Voraussetzung für das Geysering ist, dass sich zuerst Dampfblasen in den Wärmetauscherrohren bilden. Diese treten dann in das Steigrohr ein und wachsen aufgrund des hydrostatischen Druckabfalls an, wodurch die Verdampfung verstärkt wird. Der Unterschied zu einem anderen Phänomen, des sogenannten Flashings, ist, dass die Verdampfung beim Geysering zuerst in den Wärmetauscherrohren entsteht, wohingegen beim Flashing die Verdampfung zuerst im Steigrohr startet /HAA 20/. Ein weiterer Unterschied ist der, dass beim Geysering ein größerer Anteil an Wasser aus dem Absatzbecken in das Steigrohr (Rücklauf) zurückströmt. Demnach ist auch das Volumen des kondensierenden Dampfs während des Ausbruchs höher. Nach dem Ausbruch gelangt das Beckenwasser weit in das Steigrohr hinunter, so dass der minimale Massenstrom geringer ist als beim Flashing. Diese zwei Phänomene können vom GEKO-Modell nicht simuliert werden.

Wie in Abb. 3.91 zu sehen ist, wird der Massenstrom zu Beginn der Rechnung vom GEKO-Modell leicht unterschätzt. Aufgrund der anfänglich niedrigeren Eintrittstemperatur steigt der Massenstrom langsamer an als im Vergleich zum Experiment. Nach einem Anstieg verbleibt der Massenstrom durch den Gebäudekondensator bis ca. 3.000 s nahezu konstant und überschätzt die im Experiment gemessenen Werte um ca. 0,5 kg/s (ca. 25 %). Im Versuch lassen sich kurz nach 3.000 s aufgrund des Geyserings zweifach sehr hohe Massenstrompeaks beobachten, in denen der Massenstrom bis auf 18 kg/s schlagartig ansteigt. Kurz nach jedem Peak fällt der Massenstrom wieder stark ab, so dass es im Versuch zu einer kurzzeitigen Rückströmung durch den Kondensator kommt. Danach stabilisiert sich der Massenstrom auf einem im Vergleich zum ursprünglichen Wert niedrigeren Niveau. Wegen des niedrigeren Massenstroms wärmt sich das Kühlwasser in den Wärmetauscherrohren stärker auf, die Temperatur steigt weiter an und das Kühlwasser verdampft wieder teilweise in den Wärmetauscherrohren (Geysering).

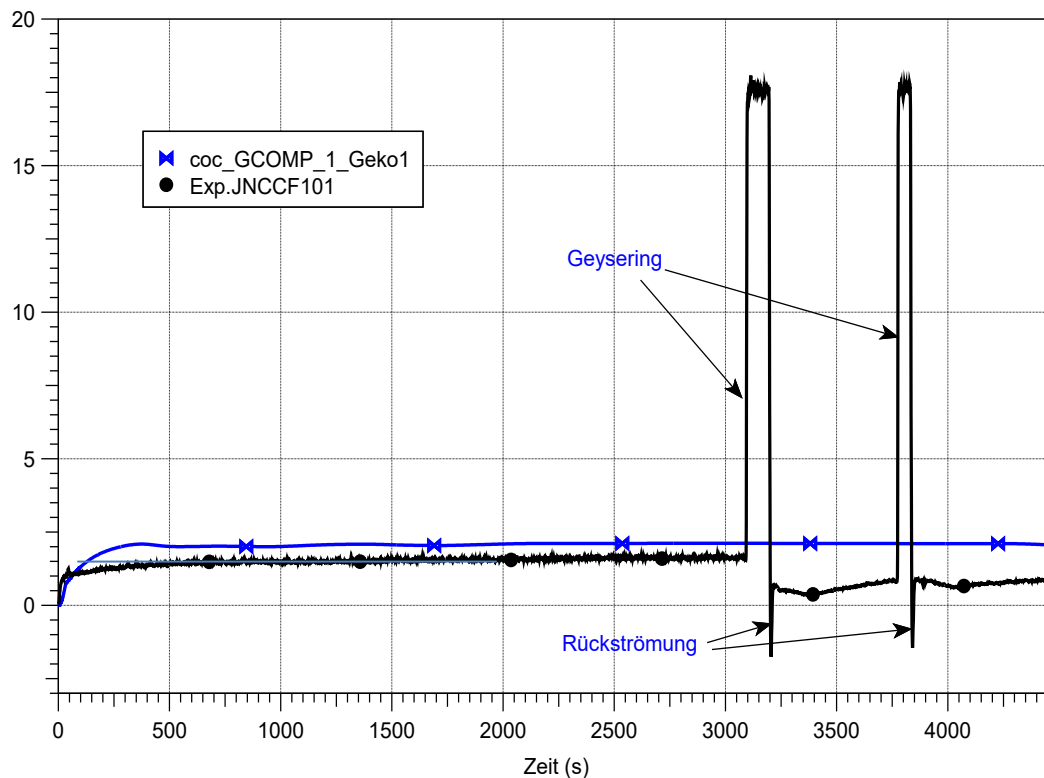


Abb. 3.91 CCC_050_030_20_1, Vergleich des berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom

In Abb. 3.92 ist die vom GEKO berechnete Kühlleistung mit der aus dem Experiment ausgewerteten Kühlleistung des Gebäudekondensators verglichen. Wie bereits erwähnt, wurden in den INKA-Versuchen drei verschiedene Ansätze zur Auswertung der Kühlleistung des Gebäudekondensators eingesetzt. Da davon ausgegangen wird, dass bei diesem Experiment bis 3.000 s keine zweiphasige Strömung innerhalb der Kondensatorrohre entsteht, wurde für den Vergleich eine einfache Gleichung für die Auswertung der Kühlleistung angesetzt. Bei der Auswertung wurde von den Experimentatoren der Massenstrom aus der Messung und die Enthalpie aus der Temperatur- und Druckmessung am Ein- und Austritt ermittelt. Hier wird noch einmal darauf hingewiesen, dass bei diesem Ansatz vereinfachend keine Zweiphasigkeit berücksichtigt wurde. Wie aus der Abbildung zu ersehen ist, ist die berechnete Kühlleistung im Vergleich zum Experiment zu Beginn stark überschätzt. Dies liegt daran, dass im GEKO-Modell die anfängliche Wandtemperatur der WTR niedriger (63 °C) ist als die Wandtemperatur zu Beginn des Experimentes. Somit stellt die Wärmetauschoberfläche eine große Wärmesenke dar, so dass zu Beginn der Rechnung deutlich mehr Wärme durch den Gebäudekondensator abgeführt wird (siehe Abb. 3.92). Im Gegensatz zur Rechnung wurden vor dem Experiment die WTR des Gebäudekondensators auf die Temperatur der angrenzenden Atmosphäre des Flutbehälters ($96,23\text{ °C}$) konditioniert. Nach 250 s wird die Kühlleistung des

Kondensators zunächst noch geringfügig überschätzt, ab 2.200 s ist die Übereinstimmung mit der aus dem Experiment ausgewerteten Leistung sehr gut (bis zum Auftreten des Geyserings kurz nach 3.000 s).

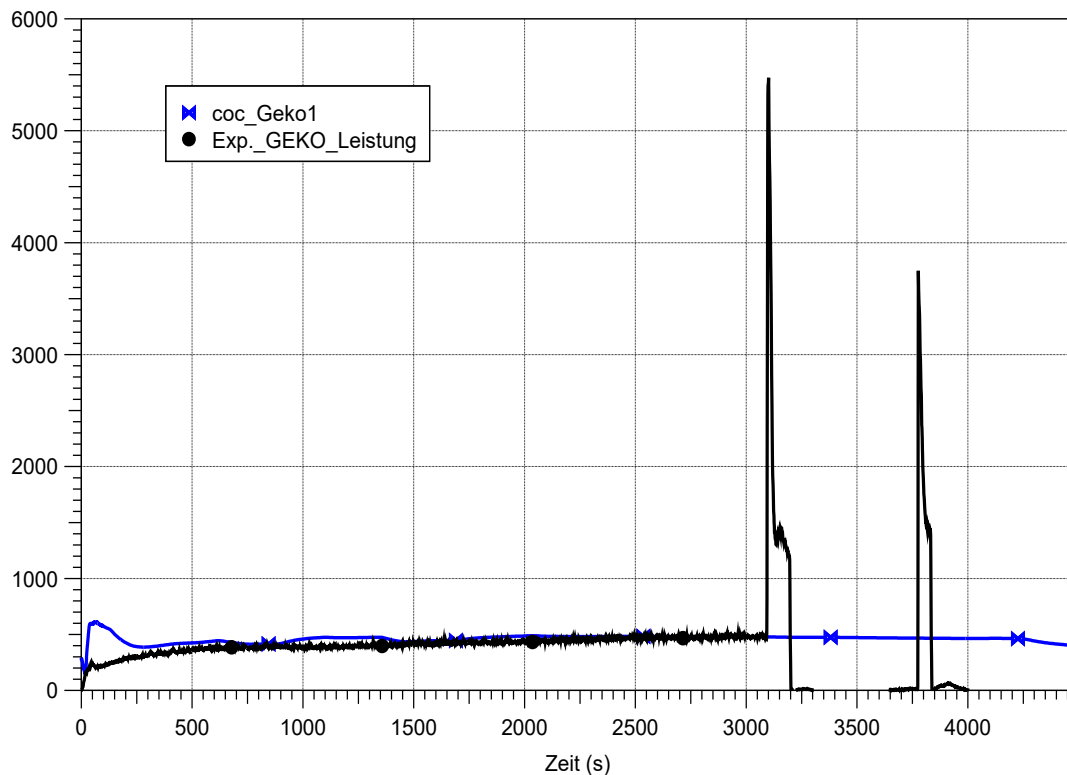


Abb. 3.92 CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators

Abb. 3.93 zeigt den Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der aus dem Experiment ausgewerteten Kühlleistung des Gebäudekondensators. Dieser Vergleich ist aussagekräftiger und zeigt, dass bis ca. 3.000 s die übertragene Kühlleistung des GEKO 19 % höher liegt als im Experiment (mit Beginn des Geyserings ist die abgeleitete experimentelle Kurve aufgrund der Zweiphasigkeit nicht mehr korrekt). Zu dem Zeitpunkt wird die im Experiment ermittelte Leistung um etwa 19 % überschätzt. Diese Abweichung ist zum einen auf die niedrigere Eintrittstemperatur und zum anderen auf einen um 25 % höheren Massendurchfluss im Vergleich zum Experiment zurückzuführen. An dieser Stelle gilt es zu beachten, dass dieses Ergebnis in direktem Widerspruch zu den Schlussfolgerungen von RWTH in /BUC 18b/ steht, die auf der Basis der in der Vergangenheit durchgeführten Nachrechnungen der INKA-Experimenten gezogen wurden. In den Simulationsrechnungen in /BUC 18b/ wurde gezeigt, dass bei Experimenten mit nicht kondensierbaren Gasen die Wärmeabfuhr insbesondere bei sehr niedrigem Dampfanteil im Flutbehälter unterschätzt wird.

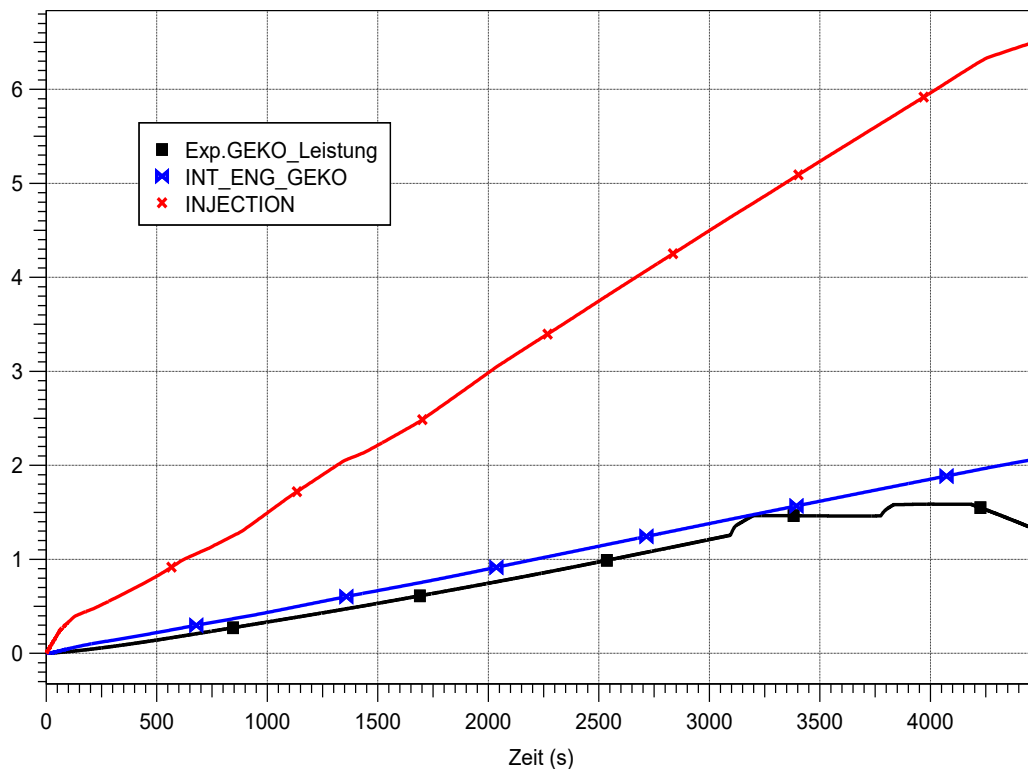


Abb. 3.93 CCC_050_030_20_1, Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators und der in den Flutbehälter eingespeisten Dampfernergie

Der Massendurchfluss beeinflusst die innere Oberflächentemperatur der Wärmetauscherrohre und damit auch die Kühlmitteltemperatur in den Wärmetauscherrohren. Je höher der Massendurchfluss ist, desto niedriger ist die Temperatur der Heizflächen der WTR und damit auch die Kühlmitteltemperatur. Da der berechnete Massenstrom etwas höher im Vergleich zum Experiment liegt, wird die Kühlmitteltemperatur (Abb. 3.94) in der Simulation etwas unterschätzt. Wie bereits erklärt, treten während des Experimentes bei ca. 3.000 s thermohydraulische Instabilitäten im Gebäudekondensator (Geysering) auf. Dabei wird kaltes Wasser aus dem Absetzbecken angesaugt und gelangt in die WTR, was zu einer sehr schnellen Abkühlung des Kühlmittels führt (Abb. 3.94). Der Abbildung ist zu entnehmen, dass der erste Massenstrompeak so groß ist, dass die Kühlmitteltemperatur am Austritt der WTR bis auf ca. 40 °C abfällt. Wie bereits erwähnt, kann dieses Phänomen vom GEKO-Modell nicht simuliert werden.

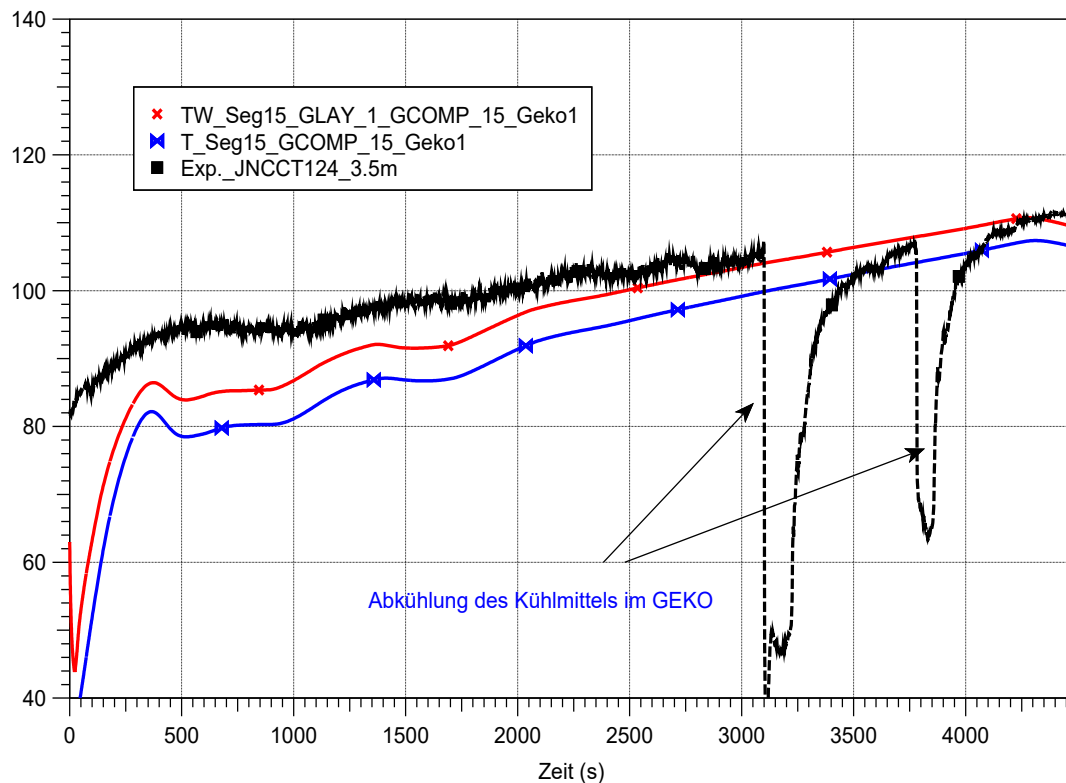


Abb. 3.94 CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Kühlmitteltemperatur (Seg_15) mit der im Experiment gemessenen Kühlmitteltemperatur im Wärmetauscherrohr

In der Simulation strömt das Kühlwasser in die WTR als unterkühltes Fluid, wobei keine Blasenbildung auftritt und das Siedebild einphasig verbleibt (FLAGB = 1). Während des Versuchs kommt es im Gebäudekondensator zweifach zum sogenannten Geysering im Steigrohr des Gebäudekondensators. Da die Voraussetzung für das Geysering die Dampfblasenbildung in den Wärmetauscherrohren ist, kann davon ausgegangen werden, dass im Versuch bis 3.000 s ein unterkühltes Blasensieden entlang der Rohre vorherrscht.

In Abb. 3.95 sind die berechnete Austrittstemperatur am Rücklaufrohr (Sektion 2) mit den entsprechenden im Experiment gemessenen Kühlmitteltemperaturen in der Rücklaufleitung verglichen. Der Vergleich zeigt, dass in der Rechnung die Austrittstemperatur zunächst unterschätzt wird. Langfristig strebt die berechnete Austrittstemperatur den im Experiment gemessenen Temperaturwerten zu. Zum Zeitpunkt des Ausbruchs im Steigrohr (Geysering bei ca. 3.000 s) steht die berechnete Austrittstemperatur in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Messwerten. Wie aus der Abbildung ersichtlich, wird bis zum Ende der Simulation die Sättigungstemperatur im Steigrohr nicht erreicht. Da im GEKO-Modell der Druck sowie die Sättigungstemperatur im Steigrohr vom

Höhenstand der einzelnen Sektionen der Rücklaufleitung abhängig sind, bleibt die Sättigungstemperatur in Sektion 2 des Rücklaufrohrs konstant (siehe rote Kurve in Abb. 3.95).

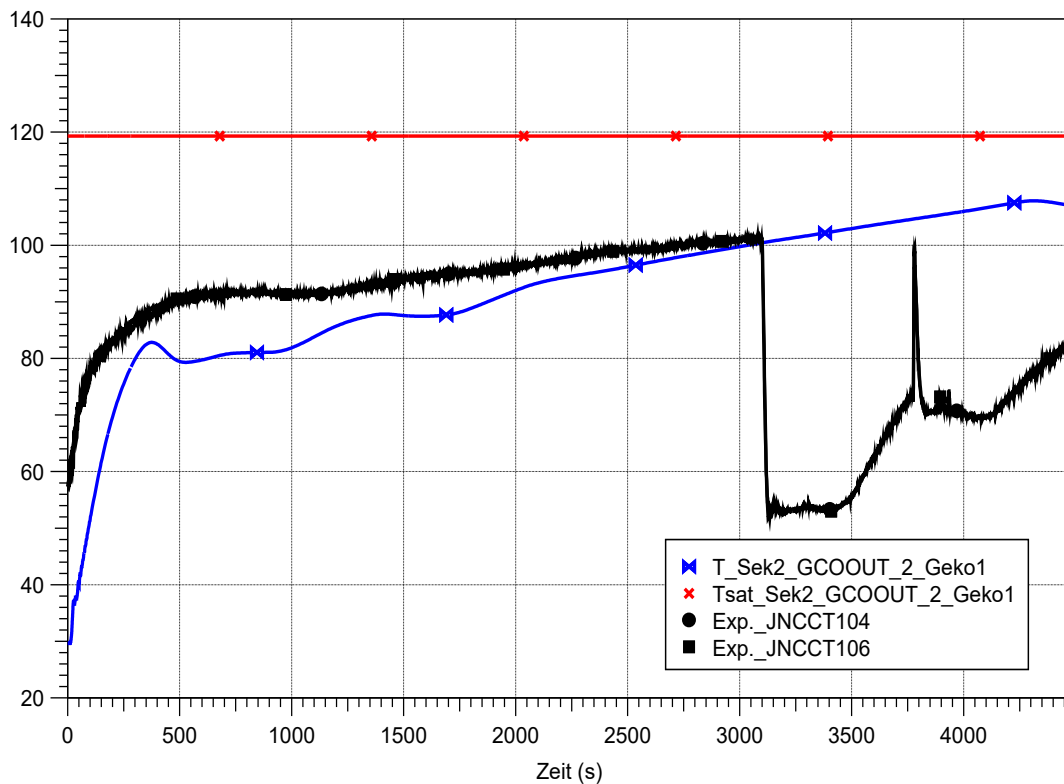


Abb. 3.95 CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Austrittstemperaturen (Sektion 2) am Rücklaufrohr mit den im Experiment gemessenen Temperaturen in der Rücklaufleitung (auf Höhe 22,8 m)

Auch bei diesem Versuch tritt ein systematischer Energiebilanzfehler in der Größenordnung von 320 MJ (5 % bezogen auf die eingespeiste Dampfenergie in den Flutbehälter) auf.

3.2.2.5 Fazit

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass bei der Nachrechnung des Experimentes mit reiner Dampfatmosfera eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment vorliegt. Die Ergebnisse zeigen, dass das GEKO-Modell in der Lage ist, die für den Gebäudekondensator typischen Phänomene, wie z. B. den zweiphasigen Naturumlauf oder die Verdampfung und die Kondensation an leicht geneigten Rohren, gut vorherzusagen. Seitens des relevanten Druckverlaufs liegen die maximalen Abweichungen bei 0,4 bar (nur zu Beginn der Simulation), während die Abweichungen im Temperaturverlauf maximal 10 °C betragen. Außerdem konnte bei den im Experiment

beobachteten Schwingungen des Massenstroms die Schwingungsfrequenz nahezu exakt wiedergegeben werden. Während die Kühlleistung des Gebäudekondensators zu Beginn der Nachrechnung überschätzt wird, was die Folge der zu niedrigen Anfangstemperatur in den WTR ist, liegt die berechnete Kühlleistung zum Ende der Rechnung etwa 6,5 % unterhalb der im Experiment ermittelten Leistung des Kondensators.

Bei der Nachrechnung des Experimentes mit Dampf-Luft-Gemisch (d. h. bei Anwesenheit nicht kondensierbarer Gase) zeigt sich, dass der Druck im Vergleich zum Experiment stark überschätzt wird. Die absoluten Druckwerte erreichen eine langfristige Abweichung, die zum Zeitpunkt des Auftretens von Geysering (3.000 s) bis zu 1,1 bar beträgt. Dieser Druckanstieg kann nur dadurch erklärt werden, dass in der Simulation das Druckregelventil auf dem Flutbehälter aufgrund fehlender Informationen nicht modelliert werden konnte. Das erklärt den Widerspruch, warum der Druck im Flutbehälter über dem Messwert liegt, obwohl im Vergleich zur Energiebilanz im Experiment in der Simulation durch das GEKO-Modell zu viel Energie abgeführt wird.

Dagegen zeigt der Temperaturverlauf in der Simulation langfristig eine gute Übereinstimmung mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter (repräsentiert die Containment-Atmosphäre). In der Nachrechnung zeigt sich allerdings, dass bis ca. 3.000 s die übertragene Kühlleistung des GEKO im Gegensatz zum ersten Versuch höher liegt als im Experiment. Zu dem Zeitpunkt wird die im Experiment ermittelte Kühlleistung des Gebäudekondensators um etwa 19 % überschätzt, was ca. 4 % der eingespeisten Energie des Dampfes entspricht. Dieses Ergebnis steht in direktem Widerspruch zu den Schlussfolgerungen, die auf der Basis der in der Vergangenheit von RWTH Aachen durchgeführten Nachrechnungen der GEKO-Experimente gezogen wurden. In diesen Nachrechnungen wurde gezeigt, dass bei Experimenten mit nicht kondensierbaren Gasen die Wärmeabfuhr insbesondere bei sehr niedrigem Dampfanteil unterschätzt wird.

Auf der Grundlage der durchgeführten Nachrechnungen lässt sich schlussfolgern, dass das GEKO-Modell für Anlagenrechnungen unter den zu erwartenden Störfallbedingungen anwendbar ist und plausible Ergebnisse liefert.

Basierend auf den Validierungsrechnungen werden folgende Aspekte zur Verbesserung/Erweiterung des GEKO-Modells in COCOSYS vorgeschlagen:

- Die Wärmeabfuhr im GEKO-Modell wird bei Anwesenheit nicht kondensierbarer Gase nach dem Stephan'schen Gesetz zur Beschreibung der Kondensation an Kondensationsrohren gerechnet. Frühere Untersuchungen weisen darauf hin, dass der

Wärmeübergang nach Stephan'schem Gesetz von der Kondensation an einer vertikalen (senkrechten) Wand abgeleitet wurde und dass keine expliziten Aussagen über die Gültigkeit dieses Gesetzes auf horizontale (waagerechte) Wände vorliegen. Aus diesem Grund wird es zukünftig als nötig gesehen, die Anwendbarkeit des Stephan'schen Gesetzes sowohl auf waagerechte als auch auf senkrechte Rohre anhand weiterer Nachrechnungen vorhandener Versuchsreihen zu überprüfen.

- Des Weiteren lässt sich festhalten, dass die Bauform eines Gebäudekondensators in COCOSYS zurzeit nur unvollständig berücksichtigt werden kann. Im GEKO-Modell wird nur ein einzelnes Kondensatorrohr berechnet und alle Werte für den Massenstrom und die Wärmeabfuhr usw. werden mit der Anzahl der Rohre multipliziert. Dadurch werden einige Phänomene, die in den Zwischenräumen der Gebäudekondensatorrohre auftreten, wie z. B. die Konzentrationsunterschiede beim Dampfgehalt in der Atmosphäre unmittelbar um jedes Rohr, nicht berücksichtigt. Weiterhin konnten auch bestimmte im Experiment aufgetretene Phänomene, wie z. B. Rückströmung durch den Kondensator oder Geysering bzw. Flashing im Steigrohr, vom GEKO-Modell nicht berechnet werden.
- Außerdem kann im GEKO-Modell nur ein Widerstandsbeiwert für die Vorlauf- und Rücklaufleitungen des Kondensators vom Nutzer vorgegeben werden. Dieser hat einen Einfluss sowohl auf den Massenstrom als auch auf die Sättigungstemperatur im Kondensator. Der Widerstandsbeiwert wird zur Berücksichtigung zusätzlicher Strömungswiderstände von z. B. Rohrkrümmern sowie senkrechten und waagerechten Rohrleitungen, deren Einlaufverluste im Modell sonst nicht berücksichtigt sind, angegeben. Beispielsweise haben die Eintritts- und Austrittsleitungen des Gebäudekondensators einer WWER-1200-Anlage mehrere Rohrkrümmen sowie senkrechte und waagerechte Rohrstücke. Die Länge der Vorlaufleitung wird zur Berechnung des statischen Drucks sowie zur Bestimmung des Trägheitsterms für die Geschwindigkeit des Fluids in der Rohrleitung verwendet. Derzeit wird empfohlen, anstelle der originalen Rohrleitungslängen die Höhendifferenz zwischen Ein- und Auslass zu verwenden, da die Druckdifferenz einen größeren Einfluss hat als der Trägheitsterm. Der Widerstandsbeiwert stellt deshalb derzeit einen großen Unsicherheitsfaktor dar und sollte in den weiteren Validierungsarbeiten gründlich untersucht werden.
- In den vorliegenden Nachrechnungen wurde auch aufgezeigt, dass die Temperaturschichtung im Absetzbecken durch Unterteilung des Absetzbeckens in zwei einzelne Zonen simuliert werden kann. Für die Einlass- und Auslassbeckenzone, die dem GEKO-Modell zugeordnet sind, wird jedoch der von COCOSYS berechnete

tatsächliche Zonenwasserstand nicht verwendet. Es kann zurzeit nur ein konstanter Wert für den Wasserstand oberhalb der Unterkante des Absetzbeckens vom Anwender vorgegeben werden. Dabei ist die Auswirkung von Wasserstandsschwankungen in den Beckenzonen aufgrund von Verdunstung, Wasserverlust durch Risse oder Wasserzufuhr durch Pumpen nicht berücksichtigt. Der Wasserstand im Absetzbecken wird im GEKO-Modul zur Berechnung des Drucks in den Kondensatorrohren verwendet. So hat die Eingabe des Wasserstandes und der Höhe der Vorlaufleitung signifikante Auswirkungen auf das Niveau der Sättigungstemperatur aufgrund des hydrostatischen Drucks sowie auch auf die Druckdifferenz zwischen Eintritt und Austritt des Gebäudekondensators.

- Im Laufe der vorliegenden Validierungsarbeiten sowie bei der erstmaligen Anwendung des GEKO-Modells für die Simulation der passiven Wärmeabfuhr im Containment eines WWER-1200 im Jahr 2014 wurde in COCOSYS ein systematischer Energiebilanzfehler hinsichtlich des GEKO-Modells festgestellt. Dieser Bilanzierungsfehler hat keinen Einfluss auf die Ergebnisse, wie z. B. die berechnete Kondensationsrate am Gebäudekondensator und die daraus resultierenden Druck- und Temperaturverläufe. Nichtsdestotrotz muss dieser Schwachpunkt des GEKO-Modells in den zukünftigen Entwicklungsvorhaben berücksichtigt werden.

Insgesamt kann festgehalten werden, dass das GEKO-Modell modifiziert bzw. erweitert werden sollte, um die Aussagegenauigkeit von COCOSYS-Analysen in Bezug auf die Containmentintegrität zu verbessern. Hierbei sind folgende konkreten Vorschläge zur Verbesserung des GEKO-Modells identifiziert worden:

- Vorgabe einer Anfangstemperatur für die WTR im Gebäudekondensator.
- Erweiterung des GEKO-Modells für Wärmetauscher mit senkrechten Rohren, wie sie in WWER-1200 installiert sind).
- Erweiterung des GEKO-Modells, um mehr als eine Zone des Containments ankopeln zu können. (die Höhe der senkrechten WTR in WWER-1200 beträgt 4,5 m).
- Berücksichtigung des von COCOSYS berechneten Füllstandes im Wasserstand oberhalb der Unterkante des Absetzbeckens.
- Angabe von Widerstandsbeiwerten für die Eintritts- und Austrittsleitungen des Gebäudekondensators zur Berücksichtigung zusätzlicher Strömungswiderstände von z. B. Rohrkrümmern sowie senkrechten und waagerechten Rohrleitungsabschnitten.

- Vervollständigung der Energiebilanz in COCOSYS hinsichtlich des GEKO-Modells.

3.2.3 INKA-Experiment EASY-4 mit gekoppelter Anwendung und Vergleich mit alter Modellierung

Insbesondere das Gebäudekondensatormodell zeigte unter den im Experiment vorherrschenden Randbedingungen deutlichen Nachbesserungsbedarf auf. Dieser wird derzeit im Entwicklungsvorhaben untersucht; die modifizierten Modelle müssen dann einer Neubewertung unterzogen werden.

An der INKA-Testanlage wurde im Rahmen des EASY-Projektes eine Reihe von Versuchen /ARE 15/ durchgeführt. Diese Versuche wurden von der GRS zur Validierung des Programmsystems AC² herangezogen. Im Rahmen dieses Validierungsvorhabens wurden mit dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Codesystem Nachrechnungen zum Versuch EASY-4 (Station blackout) aus der INKA-Versuchsreihe durchgeführt. Zielsetzung der durchgeführten Nachrechnungen war es, die Funktionsweise der Kopplung ATHLET/COCOSYS sowie des Gebäudekondensatormoduls zur Simulation des passiven Wärmeabfuhrsystems aus dem Containment mit COCOSYS unabhängig zu den GRS-Aktivitäten im EASY-Projekt zu überprüfen. Die Ergebnisse dieser Nachrechnungen sind im Folgenden dargestellt.

Für eine allgemeine Beschreibung des Versuchsaufbaus der INKA-Anlage sei auf Kap. 3.2.2.1, S. 244 sowie auf weiterführende Literatur /BUC 18b/ verwiesen.

3.2.3.1 Nachrechnungen mit dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Codesystem

ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz

Für die Validierung des AC²-Programmsystems wurde von der GRS im Rahmen des EASY-Projektes /BUC 18b/ ein gekoppelter ATHLET/COCOSYS-Datensatz (Originaldatensatz) entwickelt, wobei im COCOSYS-Datensatz zunächst nur zwei Komponenten der INKA-Versuchsanlage modelliert wurden. Dieser COCOSYS-Datensatz umfasste den Drywell-Behälter („Gasraum im Sicherheitsbehälter“ in Abb. 3.71, S. 244) und Wetwell-Behälter (Kondensationskammer in Abb. 3.71). Der DW-Behälter wurde mit insgesamt 6 Zonen abgebildet, während der WW-Behälter nur mit einer Zone modelliert wurde. Die Kopplungsschnittstellen befanden sich jeweils am Ende der Verbindungsleitungen zwischen Flutbehälter und DW-Behälter sowie am Ende der Überströmleitungen

zwischen Flutbehälter und WW-Behälter. Die Abb. 3.96 zeigt die ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage. Der mit COCOSYS modellierte Anlagenteil ist rot eingrahmt.

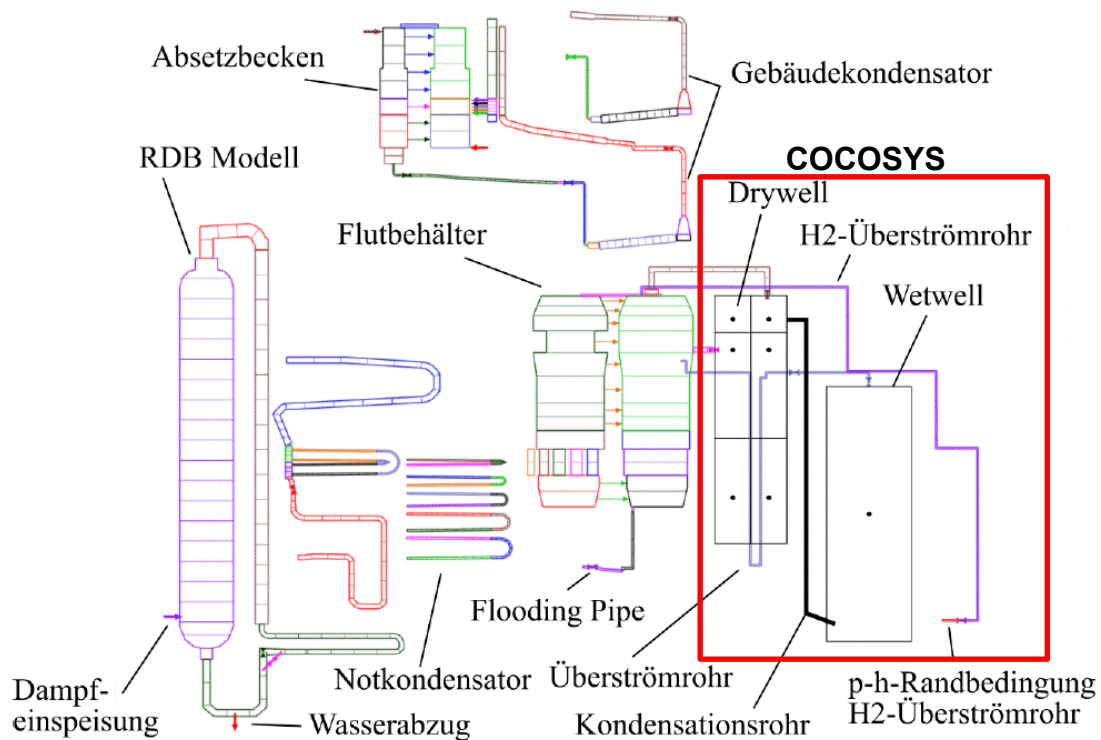


Abb. 3.96 ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage.

Mit diesem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz wurden im Rahmen des EASY-Projektes Simulationen zum SBO-Experiment (EASY-4) durchgeführt. Die Beschreibung des gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatzes sowie die mit diesem Datensatz erzielten Simulationsergebnisse sind in /BUC 18b/ im Detail dargestellt.

Modifizierter ATHLET/COCOSYS-Datensatz

Im Rahmen des Validierungsvorhabens wurde der gekoppelte ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz zum SBO-Experiment (EASY-4) dahingehend umfangreich modifiziert, dass nun vier Komponenten der INKA-Versuchsanlage im COCOSYS-Datensatz abgebildet sind. Diese sind der Flutbehälter, das Absetzbecken, der DW-Behälter sowie der WW-Behälter. Der Flutbehälter ist mit insgesamt 3 Zonen modelliert, die durch drei SB-Verbindungen miteinander verbunden sind (Abb. 3.99). Dabei wurde auch das Gebäudekondensatormodul (kurz GEKO-Modul) im COCOSYS-Datensatz simuliert. Der DW-Behälter wurde nach wie vor mit insgesamt 6 Zonen abgebildet, während der WW-Behälter nur mit einer Zone modelliert wurde. Die modifizierte ATHLET/COCOSYS-

Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage zu EASY-4 ist in Abb. 3.97 dargestellt. Der mit COCOSYS modellierte Anlagenteil ist rot eingrahmt.

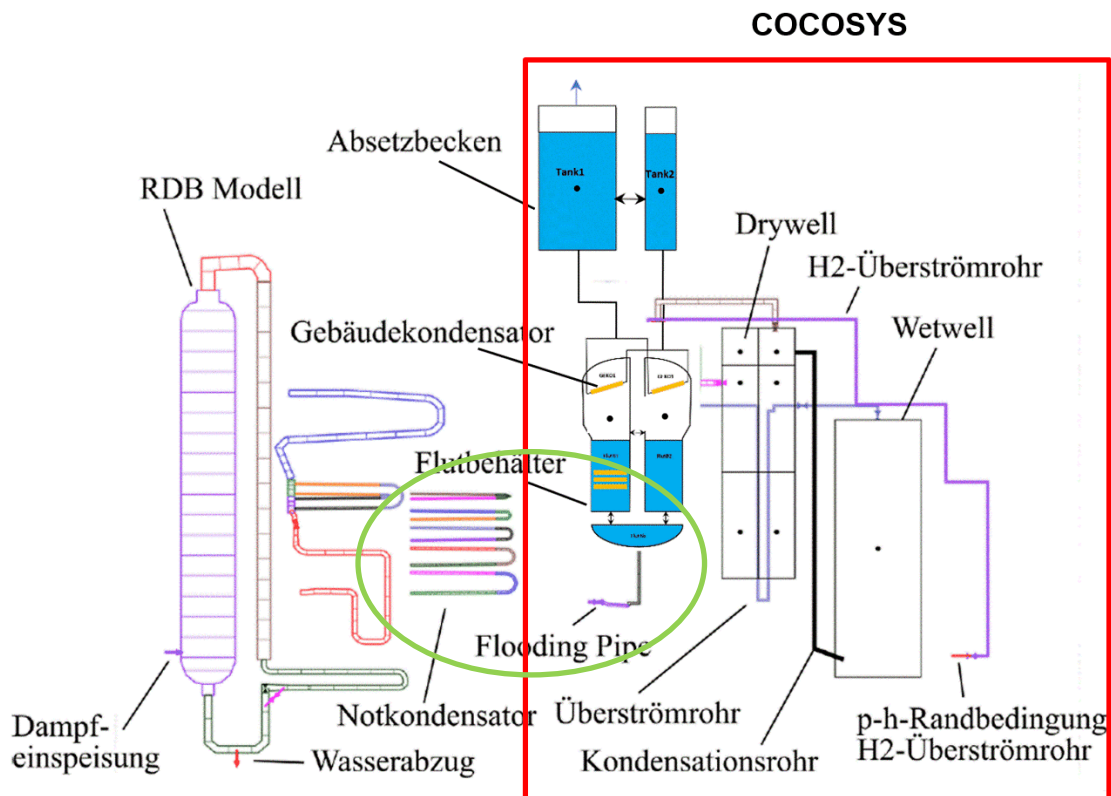


Abb. 3.97 Modifizierte ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage (EASY-4: Station blackout)

Die Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS befindet sich nun an den Notkondensatorbündeln, die durch die ATHLET-HCO-Strukturen modelliert sind, sowie dem Flutbehälter, der durch COCOSYS abgebildet wird (grün umkreist in der Abbildung). Eine schematische Darstellung der Kopplung zwischen ATHLET-HCO-Struktur und COCOSYS-Struktur ist in Abb. 3.98 gezeigt. Hier ist zu berücksichtigen, dass der Wärmeübergangskoeffizient an ATHLET Heat Conduction Objects (HCO), der Wärmestrom sowie die Wärmeleitung durch die HCO-Strukturen von ATHLET berechnet werden.

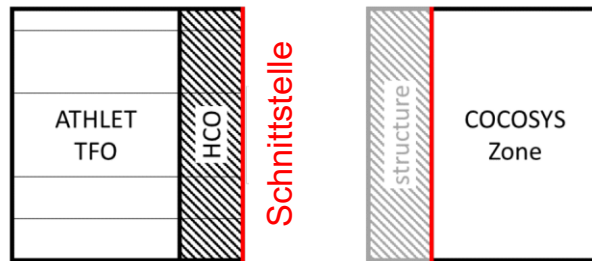


Abb. 3.98 Schematische Darstellung der Kopplung zwischen ATHLET-HCO-Struktur und COCOSYS-Struktur

Der Flutbehälter hat eine Höhe von 11,4 m (Abb. 3.72, S. 245) und einen Innendurchmesser von 5 m im unteren Bereich, in dem sich der Notkondensator befindet, und 5,5 m im oberen Bereich, in dem der Gebäudekondensator installiert ist. Das freie Gasvolumen des Flutbehälters beträgt ca. 220 m³ /BUC 18b/. Im COCOSYS-Datensatz wurden für den Flutbehälter zunächst keine wärmeleitenden Strukturen, wie Decken, Böden und Wände aus Stahl, berücksichtigt.

Für das Absetzbecken wurden zunächst keine wärmeleitenden Strukturen (Böden und Wände) im COCOSYS-Datensatz berücksichtigt. Das Wasser im Absetzbecken wurde bei dem Test EASY-4 aktiv mittels eines geschlossenen Kühlkreislaufs gekühlt. Durch eine Pumpe wurde das warme Wasser aus dem Absetzbecken durch einen Wärmetauscher gefördert und dann wieder in das Absetzbecken zurückgeführt (dieser Kühlkreislauf ist nicht in den Abbildungen dargestellt). Die Kühlung des Absetzbeckens wird durch die Kühlleistung des Wärmetauschers berücksichtigt. Diese wird in COCOSYS als Randbedingung gesetzt.

Zu Beginn der Simulation beträgt der Systemdruck im Flutbehälter 1,0 bar und die Atmosphärentemperatur entspricht der zu Beginn des Experimentes gemessenen Temperatur (20 °C) im Flutbehälter.

Der Gebäudekondensator wird im COCOSYS-Datensatz auf zwei Zonen (GEKO1 und GEKO2, Abb. 3.99) aufgeteilt. Daher sind zwei eigenständige, aber baugleiche Gebäudekondensatoren definiert, die jeweils einer Hälfte des Originalgebäudekondensators entsprechen. Jede Kondensatorhälfte besteht aus 145 Wärmetauscherrohren, die in 5 Reihen angeordnet sind. Die Wärmetauscherrohre werden in 15 Segmente eingeteilt. Der Neigungswinkel der WTR beträgt 5,7 ° /BUC 18b/. Die Modellierung des Gebäudekondensators wurde in der technischen Notiz /BAK 20c/ im Detail beschrieben.

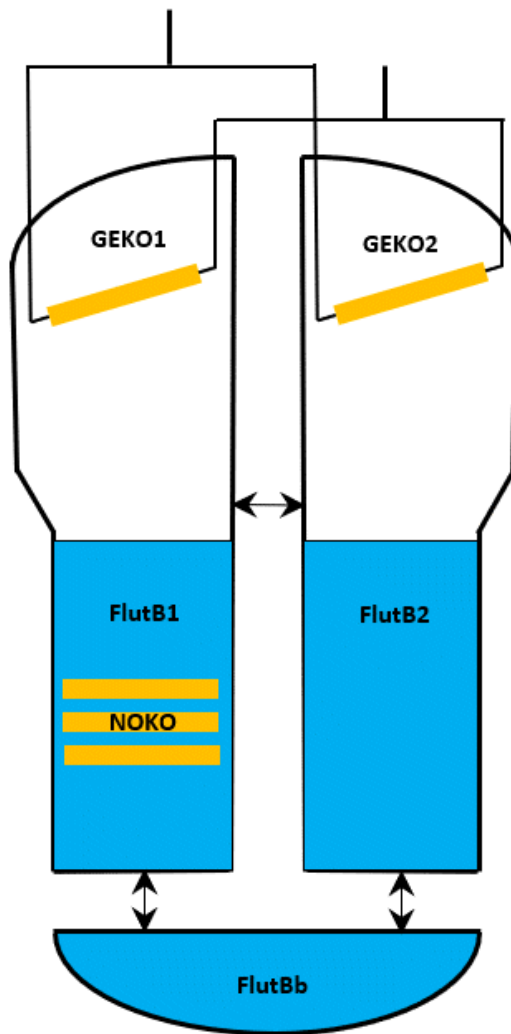


Abb. 3.99 COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters für die Nachrechnungen des Experiments EASY-4 (Station blackout)

3.2.3.2 Simulationsergebnisse

In einem ersten Schritt wurde zunächst eine Variantenrechnung ohne Anwendung des GEKO-Modells (Variante 1) durchgeführt, um zu prüfen, inwieweit die experimentellen Daten und insbesondere der Druckverlauf im DW-Behälter innerhalb der ersten 9.000 s wiedergegeben werden können. Zu Beginn des Störfalls wird die Wasservorlage im Flutbehälter durch den Notkondensator (NOKO) aufgeheizt. Innerhalb der ersten 3.000 s steigt der im Experiment gemessene Druck im DW-Behälter infolge der Verdunstung des Wassers langsam an. Ab ca. 3.500 s erhöht sich der Energieeintrag durch den Notkondensator in die Wasservorlage des Flutbehälters und das Wasser im Flutbehälter beginnt zu sieden. Dadurch steigt der Druck im Flutbehälter sowie im DW-Behälter auf ca. 2 bar schnell an. In Abb. 3.100 ist der von ATHLET/COCOSYS berechnete Druck im DW-Behälter (gekennzeichnet mit „VAR1“ in den nachfolgenden Abbildungen) mit dem im

Experiment gemessenen Druck verglichen. In der Abbildung ist der im Versuch gemessene Druck im DW-Behälter zusätzlich auch mit den Ergebnissen der ursprünglichen Simulation (gekennzeichnet mit „ORG“ in den Abbildungen) mit dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz /BUC 18b/ verglichen. Der Vergleich zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der ursprünglichen Simulation und den experimentellen Daten. Im Gegensatz dazu beginnt der mit dem modifizierten ATHLET/COCOSYS-Datensatz berechnete Druck erst ab ca. 4.800 s zu steigen, wobei der Druckanstieg im Vergleich zum Experiment nachfolgend auch deutlich niedriger (etwa 1.65 bar) ausfällt.

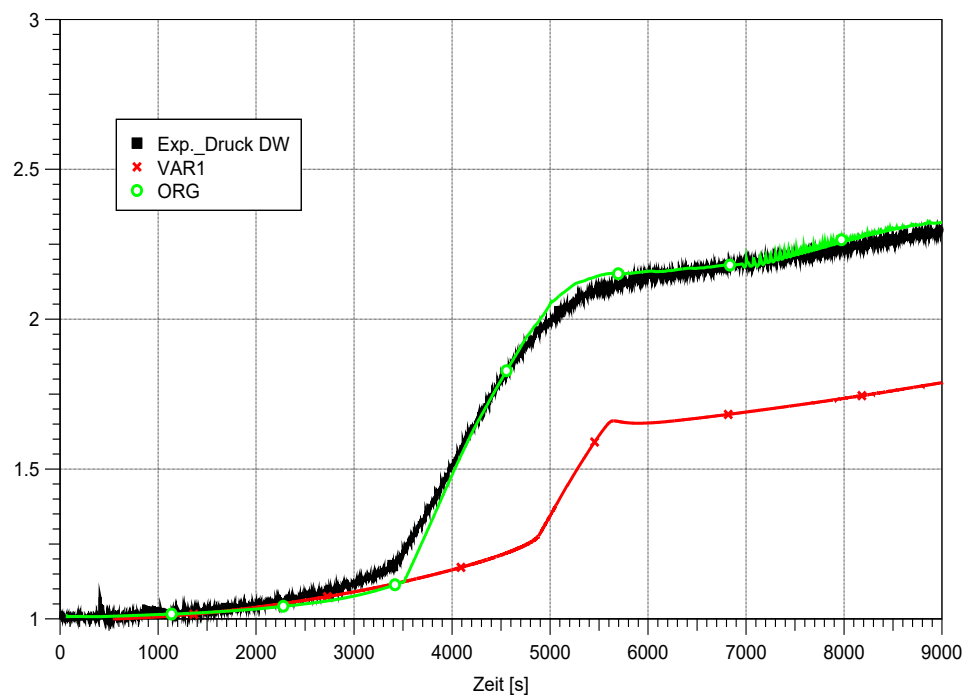


Abb. 3.100 EASY-4, Vergleich des berechneten Druckes für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im DW-Behälter

Aufgrund der Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS wurde hier vermutet, dass der Energieeintrag durch die gekoppelten HCO-Strukturen (Notkondensatorfläche) nicht in vollem Umfang an COCOSYS weitergegeben wird, so dass der Druckanstieg in der Variantenrechnung (VAR1) verzögert einsetzt. In Abb. 3.101 sind die über den NOKO übertragene Gesamtenergie in der ursprünglichen Simulation und die mit dem Energieeintrag durch die gekoppelten HCO-Strukturen (Notkondensatorfläche) in der modifizierten ATHLET/COCOSYS-Variantenrechnung (VAR1) miteinander verglichen. In der Abbildung ist deutlich zu erkennen, dass in der Variantenrechnung die Energie durch die gekoppelten HCO-Strukturen niedriger ist als die in der ursprünglichen

ATHLET/COCOSYS-Simulation. Dies führt dazu, dass die Wasservorlage im Flutbehälter langsamer bis auf Sättigung aufgeheizt wird, so dass der Druckanstieg im DW-Behälter 1.300 s später erfolgt.

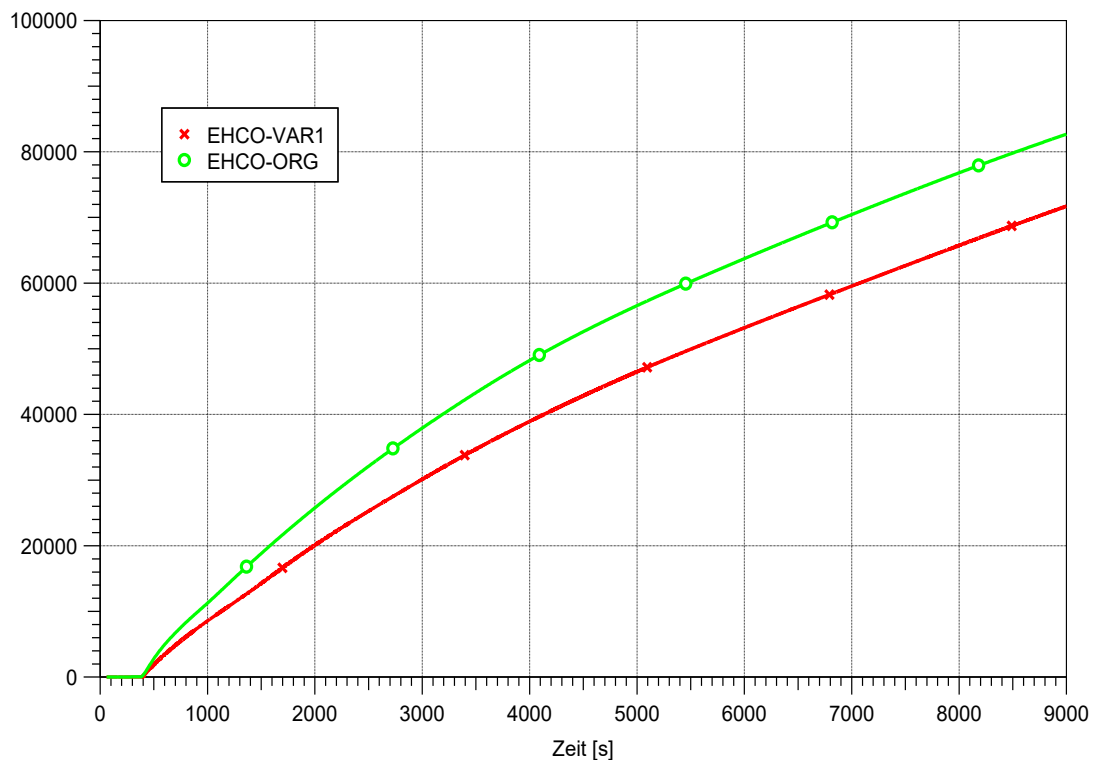


Abb. 3.101 EASY-4, Vergleich der über den NOKO übertragenen Wärme für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)

In Abb. 3.102 sind die Wassertemperaturen im Flutbehälter für die beiden Rechenfälle im Vergleich zum Experiment dargestellt. Bei der Nachrechnung mit dem ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz (ORG) wird die Wassertemperatur im Flutbehälter in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, während die in der ATHLET/COCOSYS-Variantenrechnung (VAR1) berechnete Wassertemperatur zunehmend unterschätzt wird.

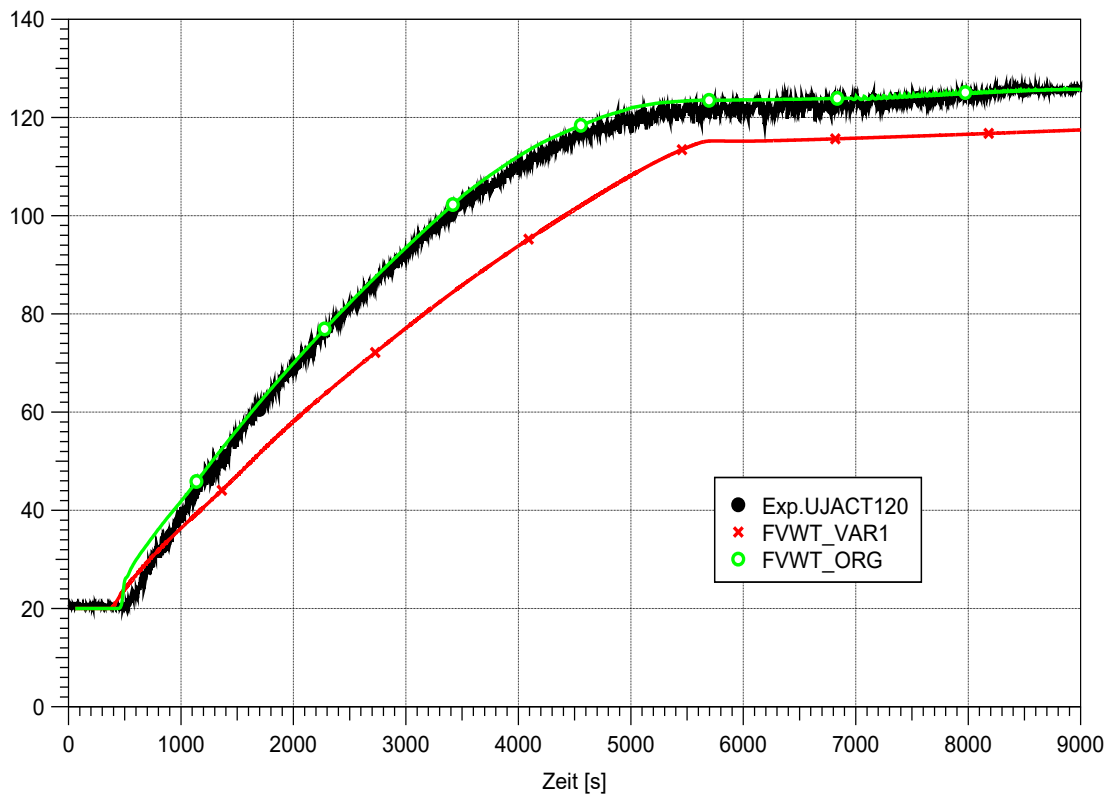


Abb. 3.102 EASY-4, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter

Um den Einfluss der gekoppelten ATHLET-HCO-Strukturen auf die Wärmeübertragung durch den NOKO an COCOSYS zu untersuchen, wurden weitere Variantenrechnungen durchgeführt, in denen einzelne COCOSYS-Parameter wie Wärmeübertragungsfläche und charakteristische Länge der HCO-Strukturen variiert wurden. Dabei wurde festgestellt, dass diese Parametervariation keine Auswirkung auf den durch den NOKO übertragenen Energieeintrag in COCOSYS hat, da der Wärmestrom sowie die Wärmeleitung durch die HCO-Strukturen von ATHLET dominiert werden.

Während des Druckanstiegs im DW-Behälter, werden nicht kondensierbare Gase im Gasraum des Flutbehälters sowie im oberen Bereich des DW-Behälters über die Kondensationsleitung und die Wasserstoffüberströmleitung in den WW-Behälter gedrückt. Dieser Vorgang ist im Experiment sowie in der ursprünglichen Simulation mit ATHLET/COCOSYS im Zeitbereich 5.000 – 5.500 s abgeschlossen. Abb. 3.103 zeigt den Vergleich der Luftanteile im Flutbehälter für die durchgeführten Variantenrechnungen und die ursprüngliche Simulation mit dem ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz.

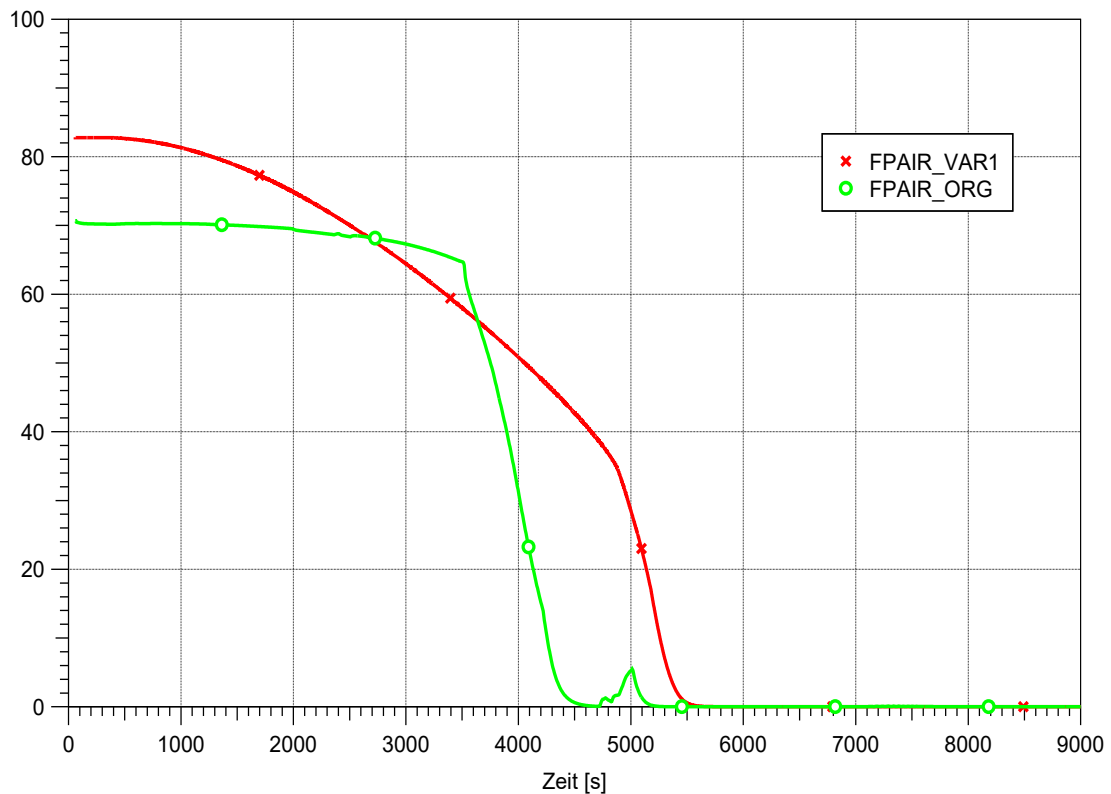


Abb. 3.103 EASY-4, Vergleich der berechneten Luftanteile im Flutbehälter für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)

Bei diesem Vergleich zeigten sich zunächst Unterschiede bei dem anfänglichen Luftanteil im Flutbehälter für die beiden Rechenfälle. Aus dem Vergleich ergibt sich auch, dass in der durchgeführten ATHLET/COCOSYS-Variantenrechnung (VAR1) die Abnahme der nicht kondensierbaren Gase im Flutbehälter deutlich schneller erfolgt als in der ursprünglichen Simulation. Allerdings dauert dieser Vorgang aufgrund der höheren Luftanteile im DW-Behälter deutlich länger als in der ursprünglichen Simulation (s. Abb. 3.103 rote Kurve). Dadurch fällt der Druckanstieg im DW-Behälter in der gekoppelten Variantenrechnung geringer aus, verglichen mit der ursprünglichen Simulation (s. Abb. 3.100 rote Kurve).

Weiterhin ist zu bemerken, dass in der ursprünglichen Simulation mit dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Originaldatensatz die Fläche des Notkondensators künstlich um den Faktor 1,3 erhöht wurde, um die Übereinstimmung zwischen Versuch und Simulation hinsichtlich des Druck- und Temperaturanstiegs im Flutbehälter zu optimieren. In Anbetracht dieser Anpassung wurde hier beschlossen, eine weitere gekoppelte Variantenrechnung (VAR2) durchzuführen, in der der Skalierungsfaktor der Notkondensatorfläche in ATHLET von 1.3 auf 2.0 gesetzt wurde. Außerdem wurde in dieser Variantenrechnung

der anfängliche Luftanteil im Flutbehälter angepasst, so dass dieser nun mit dem anfänglichen Luftanteil in der ursprünglichen Simulation übereinstimmt. Ziel dieser Variantenrechnung war es, den Einfluss auf den Energieeintrag durch den NOKO (ATHLET-HCO) in die Wasservorlage des Flutbehälters zu untersuchen. In Abb. 3.104 sind die experimentellen Daten zusätzlich zur ursprünglichen Simulation (ORG) auch mit der zweiten Variantenrechnung (VAR2) miteinander verglichen.

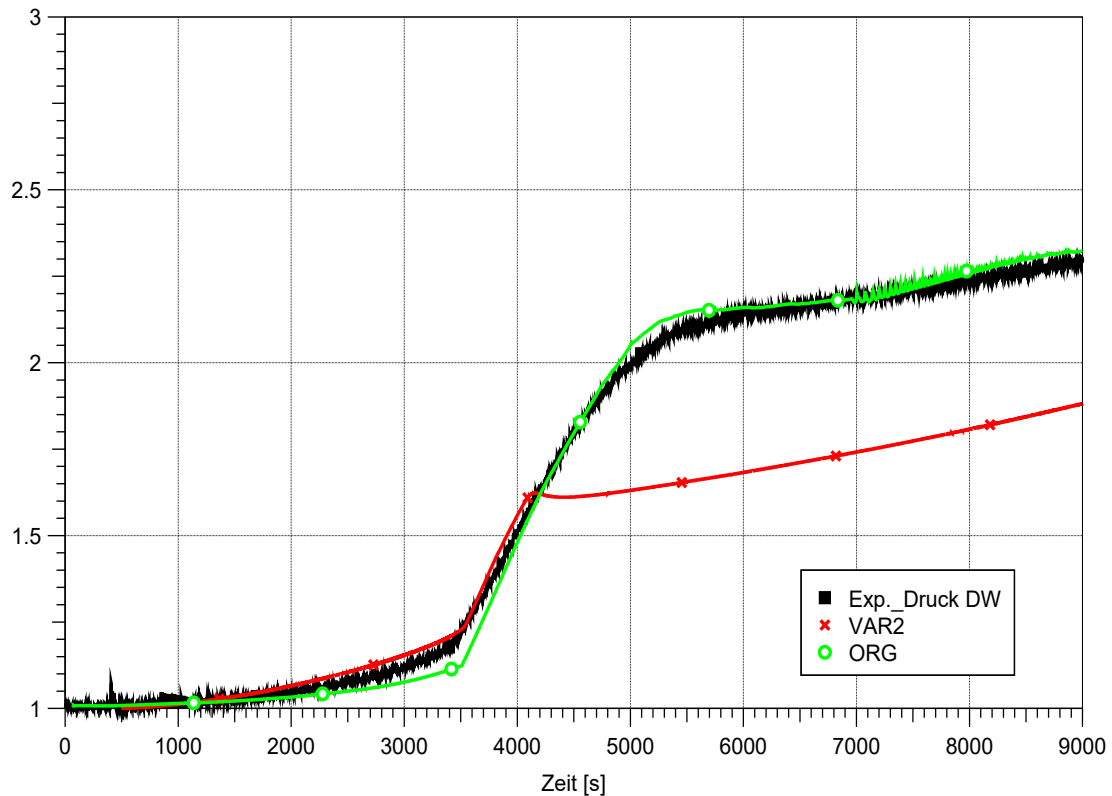


Abb. 3.104 EASY-4, Vergleich des berechneten Druckes für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR2) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im DW-Behälter

Der Vergleich zeigt, dass eine weitere Erhöhung der im ATHLET modellierten Notkondensatorfläche um einen Faktor 2,0 einen großen Einfluss auf den Druck im DW-Behälter hat. Wird die Notkondensatorfläche weiter erhöht, so kann der Zeitpunkt des Druckanstiegs sowohl im Flutbehälter als auch im DW-Behälter gut wiedergegeben werden. Auch die in der zweiten Variantenrechnung (VAR2) berechnete Wassertemperatur im Flutbehälter stimmt mit dem Experiment sowie mit der ursprünglichen Simulation gut überein (s. Abb. 3.105).

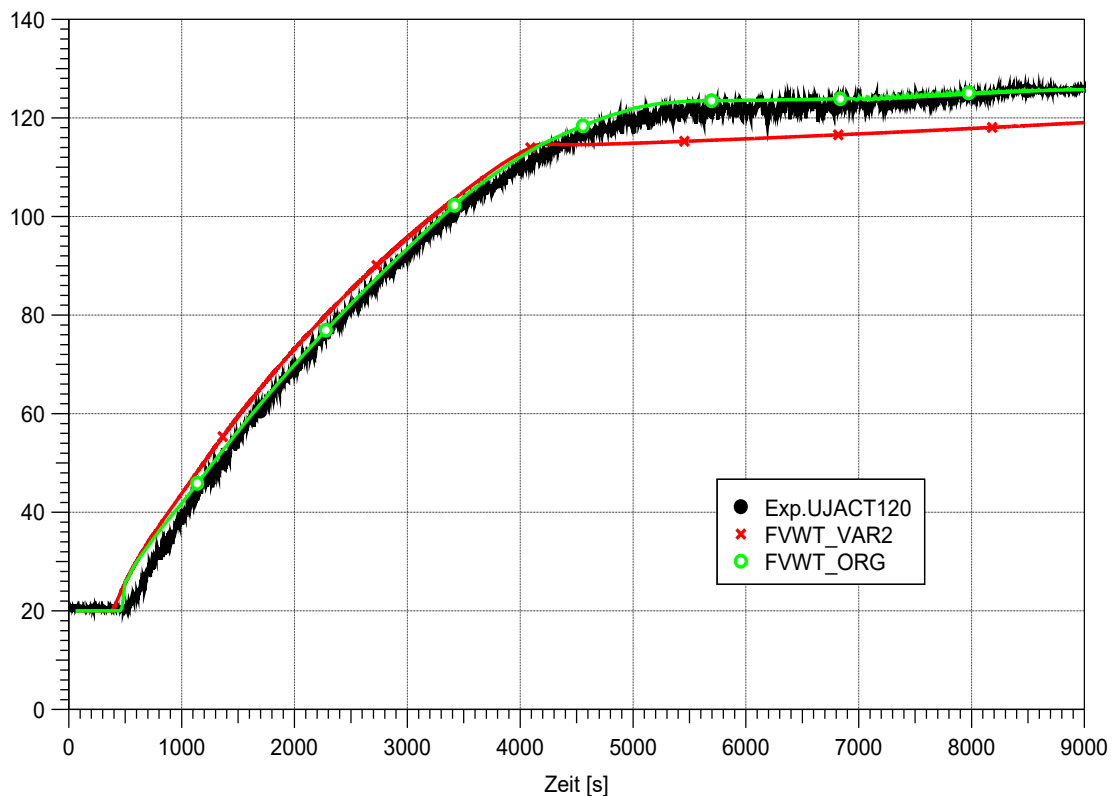


Abb. 3.105 EASY-4, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter

In Abb. 3.106 ist die über den NOKO übertragene Gesamtenergie in der ursprünglichen Simulation dem Energieeintrag durch die gekoppelten HCO-Strukturen (Notkondensatorfläche) in der gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Variantenrechnung (VAR2) gegenübergestellt. Der Abbildung lässt sich entnehmen, dass der Energieeintrag durch die gekoppelten HCO-Strukturen in der Variantenrechnung (VAR2) nun in guter Übereinstimmung mit der NOKO-Leistung in der ursprünglichen Simulation steht. Aus der Abb. 3.104 ist ersichtlich, dass der Druckanstieg im DW-Behälter im Vergleich zum Experiment nach wie vor niedriger ausfällt. Wie bereits erwähnt, lässt sich das auf die Tatsache zurückführen, dass in der Variantenrechnung (VAR2) sämtliche Luft im Gasraum des Flutbehälters sowie im oberen Bereich des DW-Behälters deutlich schneller im Vergleich zu der ursprünglichen Simulation (ORG) gespült wird. An dieser Stelle scheint die grobe Nodalisierung des Flutbehälters in dem modifizierten, gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatz für die Nachrechnung des SBO nicht ausreichend zu sein. Daher soll noch geprüft werden, ob eine feinere Nodalisierung des Flutbehälters zu einem höheren Druckanstieg führen kann.

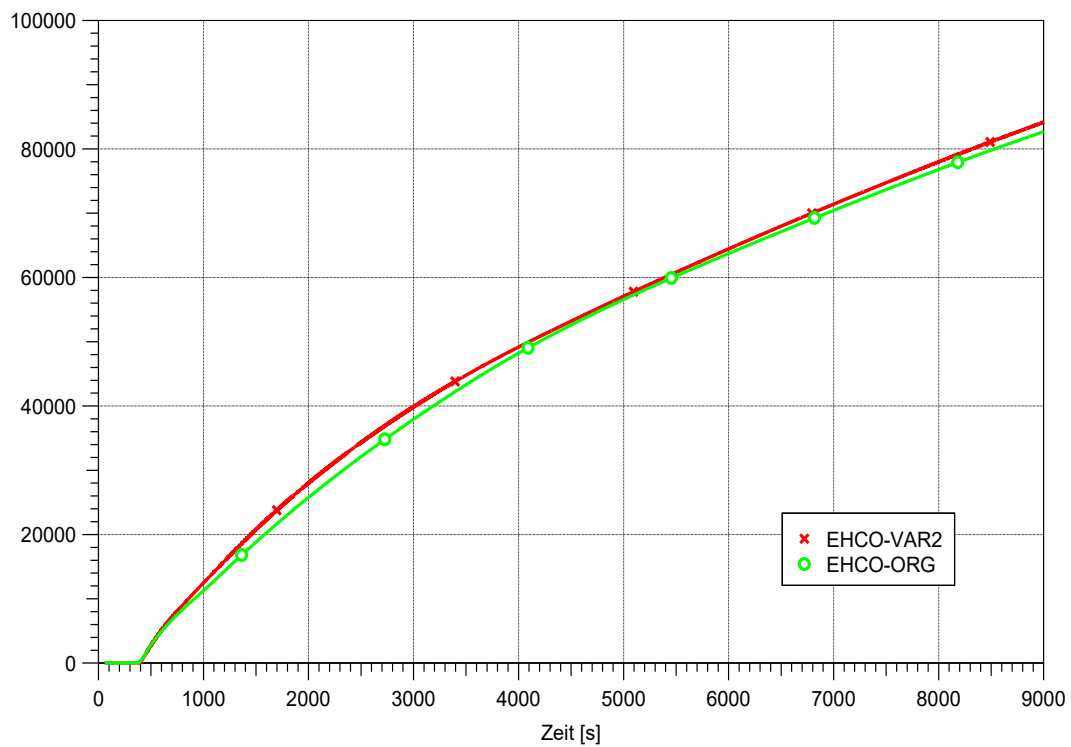


Abb. 3.106 EASY-4, Vergleich der über den NOKO übertragenen Wärme für die gekoppelte Rechnung (VAR2) und die ursprüngliche Simulation (ORG)

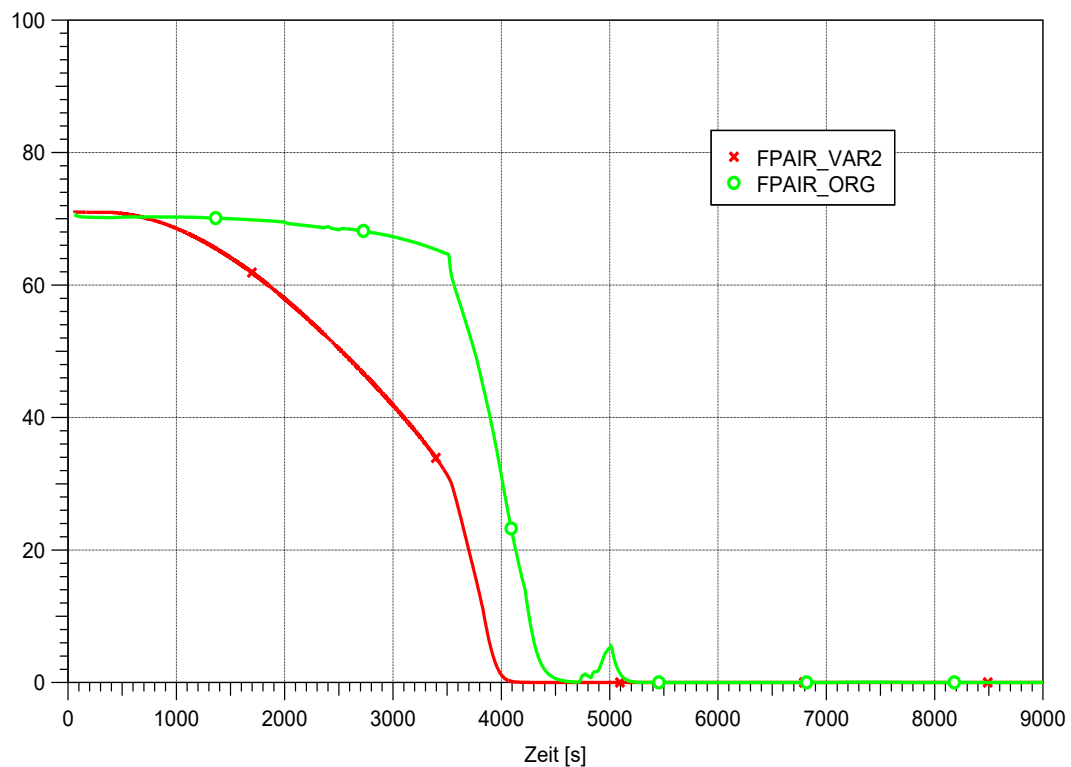


Abb. 3.107 EASY-4, Vergleich der berechneten Luftanteile im Flutbehälter für die vorliegende, gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)

Ferner wurde der bereits modifizierte ATHLET-COCOSYS-Datensatz (VAR2) weiterentwickelt, indem das GEKO-Modul im COCOSYS-Datensatz wieder aktiviert wurde. Zusätzlich sind den Zonen des Flutbehälters insgesamt 6 wärmeleitende Strukturen zugeordnet. Beim Absetzbecken wurden die Wände und der Boden mit 3 wärmeleitenden Strukturen abgebildet. Die Strukturen des Flutbehälters sowie des Absetzbeckens sind mit 3 Schichten unterschiedlicher Materialien modelliert. Dabei ist jede einzelne Materialschicht in mehrere Temperaturnodes unterteilt. Für alle wärmeleitenden Strukturen wird das neue kombinierte CO1-Wärmeübertragungsmodell angewendet.

Zur Simulation der Aufheizung und der Temperaturschichtung wurde das Absetzbecken in zwei einzelne nebeneinander liegende COCOSYS-Zonen (Tank 1 und Tank 2, s. Abb. 3.97) unterteilt. Diese sind mit einer ATM_FULL-Verbindung verknüpft, die zum einen den Ausgleich des Wasserspiegels, zum anderen aber auch den Energieaustausch zwischen den Wasserbereichen der Zonen ermöglicht. Für diese Verbindung kann ein Vorfaktor angegeben werden, der die Simulation der thermischen Wasserkonvektion innerhalb des Absetzbeckens ermöglicht. Auf diese Weise ist es möglich, einen verzögerten Temperaturanstieg des Zulaufwassers aufgrund der Temperaturschichtung im Absetzbecken abzubilden.

Mit dem hier weiterentwickelten ATHLET-COCOSYS-Datensatz wurde eine weitere gekoppelte ATHLET-COCOSYS-Variantenrechnung (VAR3) durchgeführt, um die Funktionsweise des Gebäudekondensatormoduls in COCOSYS auszutesten. Ab 3.500 s beginnt die Wärmeabfuhr über den Gebäudekondensator. Auf der Innenseite der WTR erwärmt sich das Kühlwasser, so dass aufgrund der Dichtereducierung eine aufwärts gerichtete Strömung entsteht. Durch den Naturumlauf steigt die Wassertemperatur im Absetzbecken langsam an und somit auch die Eintrittstemperatur des Gebäudekondensators.

Bis ca. 4.500 s gleichen sich die Atmosphärentemperatur und die Wandtemperatur der WTR an (Abb. 3.108). Ab diesem Zeitpunkt liegt im Flutbehälter eine reine Dampfatmosfera vor. Im Fall reiner Dampfatmosfera im Flutbehälter wird in COCOSYS ein entsprechendes Unterprogramm zur Berechnung des Wärmeübergangs an der äußeren Oberfläche der Wärmetauscherrohre bei reiner Dampfatmosfera basierend auf der Wasserfilmtheorie nach Nusselt eingesetzt.

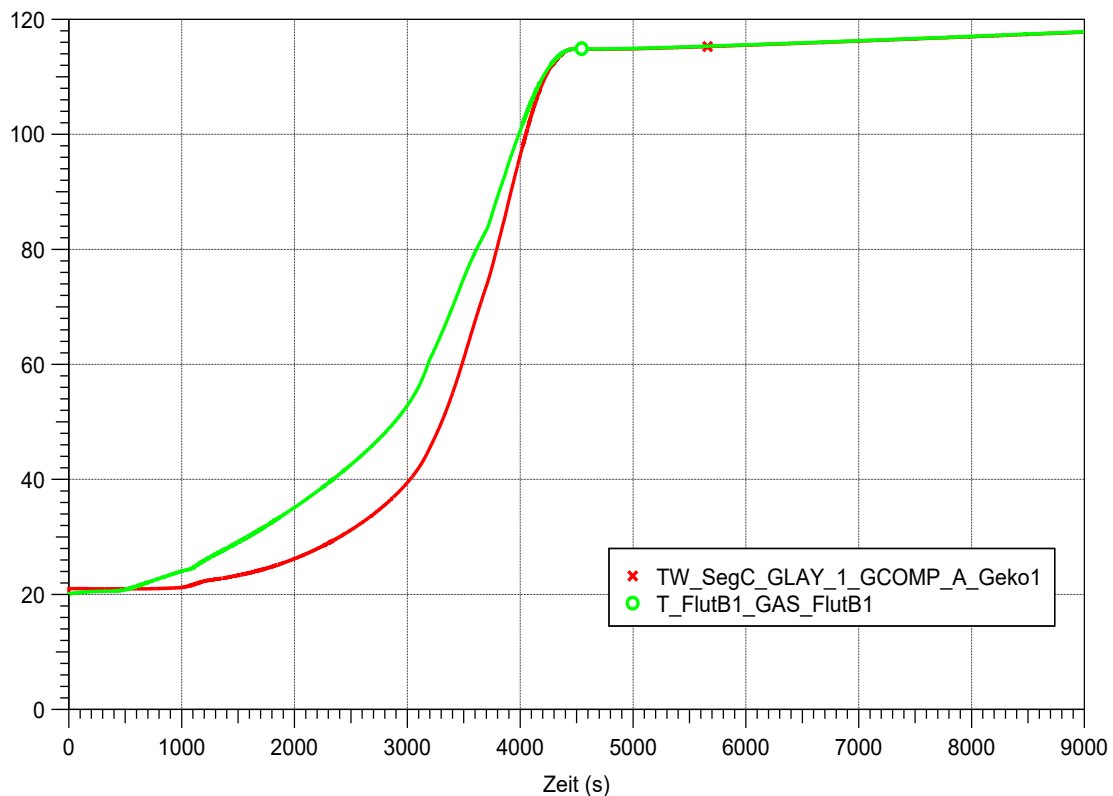


Abb. 3.108 EASY-4, Vergleich der vom GEKO-Modul berechneten Wandtemperatur der WTR mit der von COCOSYS berechneten Zonentemperatur (Flutbehälter)

An dieser Stelle wurde ein Fehler in der Berechnung des Wärmeübergangs an der Außenseite der Wärmetauscherrohre identifiziert. Es stellte sich heraus, dass die Gleichung für den Wärmeübergangskoeffizienten an der Außenseite des Gebäudekondensators nicht gelöst werden kann, wenn die Differenz zwischen der Zonentemperatur (T_0) und der Wandtemperatur (T_{surface}) der Wärmetauscherrohre gleich bzw. kleiner Null ausfällt. Um die numerische Stabilität zu verbessern, war es erforderlich, eine Begrenzung dieser Temperaturdifferenz auf einen Wert von mindestens 10^{-6} K zu setzen. Weiterhin wurde eine neue Ausgabegröße hinzugefügt, um den Wärmeübergangskoeffizienten an der Außenseite der Wärmetauscherrohre überprüfen zu können. Nach dieser Korrektur bzw. Erweiterung konnte die Rechnung bis zum Ende durchgeführt werden. Allerdings wurde festgestellt, dass das Gebäudekondensatormodul in COCOSYS auch jetzt keine glaubwürdigen Ergebnisse liefert, wenn im Flutbehälter eine reine Dampfatmosfera vorliegt. Abb. 3.109 zeigt, dass nach ca. 4.200 s der Wärmeübergangskoeffizient an der Innenseite der Wärmetauscherrohre des GEKO absinkt (rote Kurve in der oberen Abbildung). Nach kurzem Einschwingverhalten bleibt er nahezu konstant, während der Wärmeübergangskoeffizient an der Außenseite der Wärmetauscherrohre schlagartig ansteigt (grüne

Kurve in der oberen Abbildung). Dies hat zur Folge, dass ab ca. 4.500 s eine sehr geringe Leistungsabfuhr über den Gebäudekondensator in das Absetzbecken einsetzt.

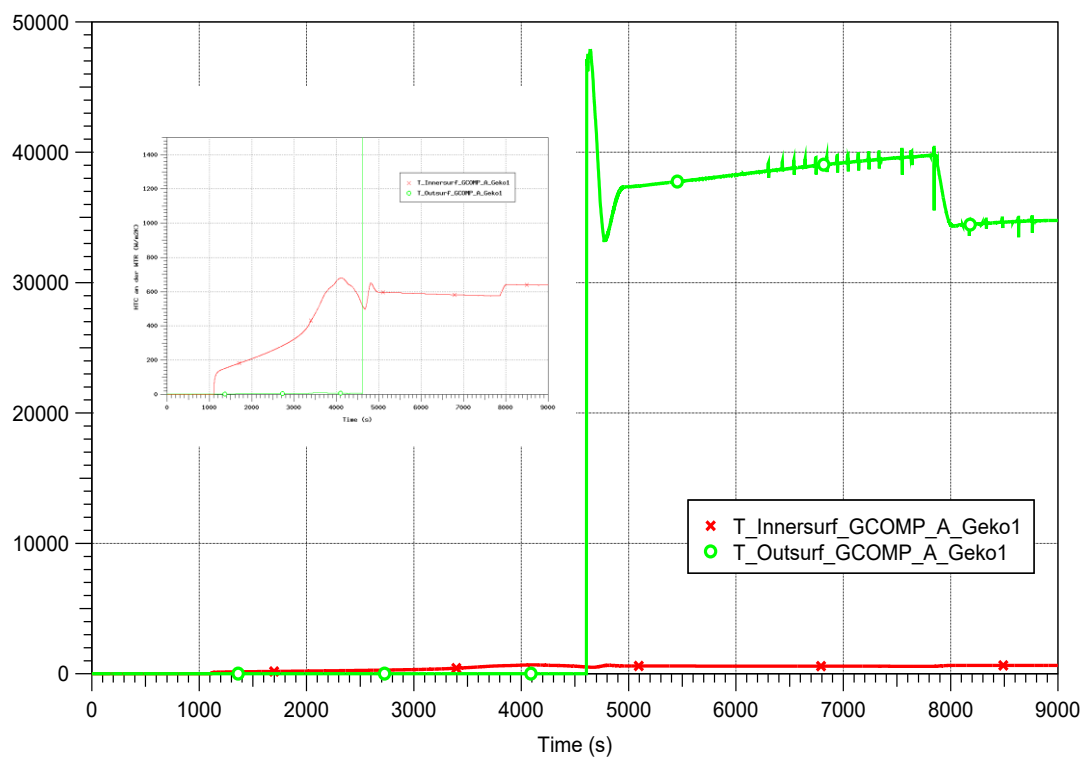
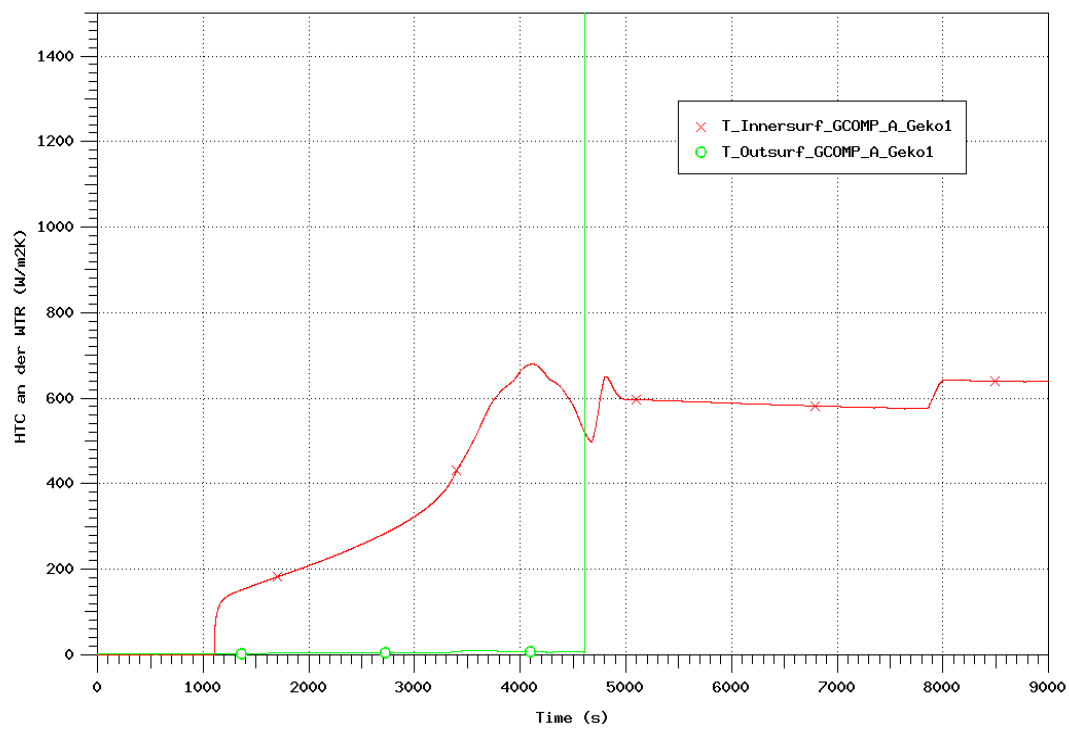


Abb. 3.109 EASY-4, Vergleich des vom GEKO-Modul berechneten Wärmeübergangskoeffizienten an der Außenseite (ALPHA_A) und an der Innenseite (ALPHA) der Wärmetauscherrohre

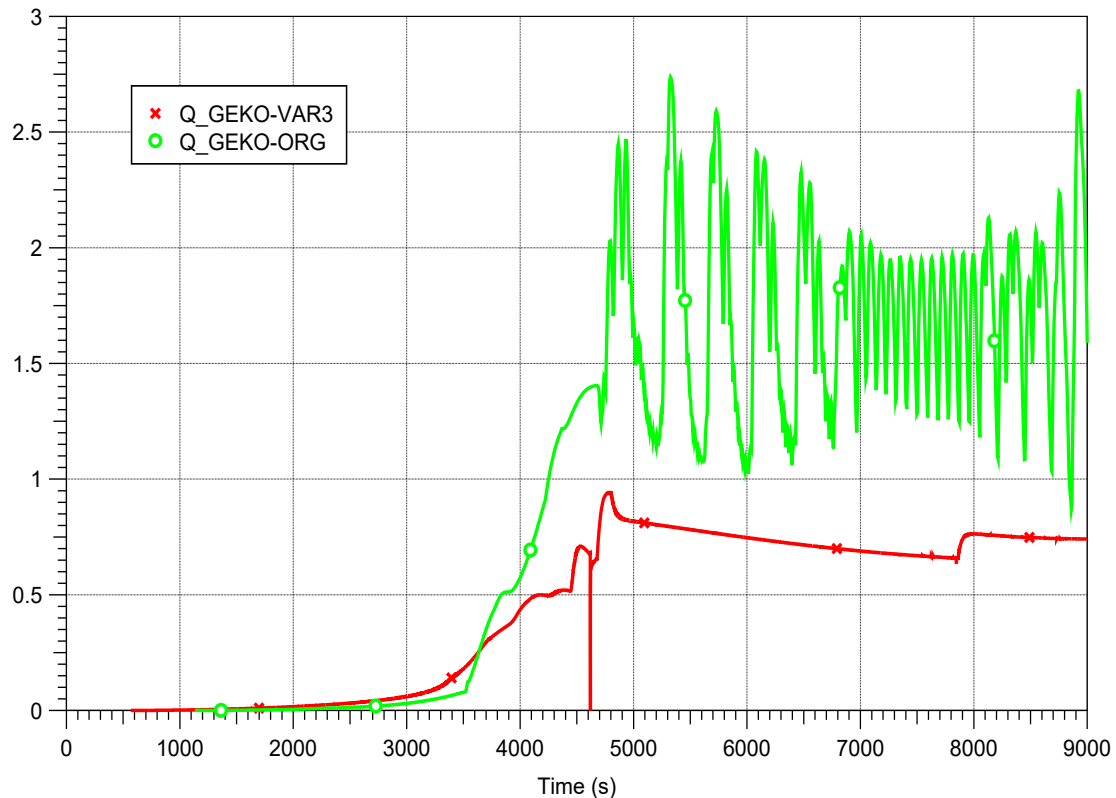


Abb. 3.110 EASY-4, Vergleich der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit der in der ursprünglichen ATHLET/COCOSYS-Simulation (ORG) ermittelten Kühlleistung

3.2.3.3 Fazit

Im Rahmen der Validierungsarbeiten wurde mit dem gekoppelten Codesystem ATHLET/COCOSYS ein Integralversuch EASY-4 („Station blackout“ ohne KMV) aus der INKA-Versuchsreihe nachgerechnet. Zielsetzung der durchgeführten Nachrechnungen war es, die Funktionsweise der Kopplung ATHLET/COCOSYS sowie des Gebäudekondensatormoduls zur Simulation des passiven Wärmeabfuhrsystems aus dem Containment mit COCOSYS auszutesten.

Auf der Grundlage der durchgeführten Nachrechnungen wurde festgestellt, dass an der Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und COCOSYS der Energieeintrag durch die gekoppelten HCO-Strukturen (Notkondensatorfläche) nicht in vollem Umfang an COCOSYS weitergegeben wird, so dass der Druckanstieg im Vergleich zum Experiment zeitlich verzögert beginnt. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Anwendung der in COCOSYS gekoppelten HCO-Strukturen derzeit nur auf bestimmte Wärmeübergangsmodelle (FOC und FRC) beschränkt ist. Hier ist eine Modellerweiterung geplant, um die Berücksichtigung von mehreren COCOSYS-Wärmeübergangsmodellen (z. B. CO1) zu

ermöglichen. Durch die Wärmeübertragung vom Notkondensator in die Wasservorlage des Flutbehälters kommt es zum Sieden und der Druck im Flutbehälter (und im DW-Behälter) steigt schnell an. Dabei wird sämtliche Luft im Gasraum des Flutbehälters sowie des DW-Behälters über das Kondensationsrohr in den WW-Behälter gedrückt. Nachdem dieser Vorgang abgeschlossen ist, strömt nur noch Dampf durch die Überströmleitungen in den WW-Behälter. Dieser kondensiert im WW-Behälter sofort, so dass der Druckanstieg im DW-Behälter deutlich begrenzt wird. In der gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Rechnung zeigte sich, dass der berechnete Druckanstieg im Flutbehälter bzw. im DW-Behälter im Vergleich zum Experiment stark unterschätzt wird. Hierbei wird vermutet, dass durch die grobe Nodalisierung des Flutbehälters in dem gekoppelten ATHLET/COCOSYS-Datensatz sämtliche Luft aus dem Flutbehälter in den WW-Behälter schneller im Vergleich zur ursprünglichen Simulation bzw. zum Experiment gedrückt wird. Hier soll noch geprüft werden, ob eine feinere Nodalisierung des Flutbehälters zu einem höheren Druckanstieg führen kann. Die Arbeiten sollen im Rahmen zukünftiger Entwicklungen fortgeführt werden.

4 Qualifizierung von AC²/COCOSYS anhand beispielhafter Analysen von Stör- oder Unfallabläufen in DWR

Die nachfolgend dokumentierten Arbeiten konzentrieren sich auf die Anwendung und Bewertung von COCOSYS auf typische Anlagenszenarien, da neben der gezielten Validierung der Einzelprogramme die Qualifizierung anhand der Nachrechnung von Anlagenszenarien für DWR notwendig ist.

4.1 Generischer DWR-KONVOI

In COCOSYS sind mehrere Wärmeübergangsmodelle implementiert, um verschiedene Prozesse zu simulieren (z. B. freie bzw. erzwungene Konvektion oder Kondensation). Einige der älteren Modelle basieren allerdings auf empirisch abgeleiteten und an Experimente angepassten Ansätzen /KLE 19/ anstatt auf ingenieurwissenschaftlich hergeleiteten Korrelationen z. B. des VDI-Wärmeatlas. Jetzt steht mit dem CO1-Modell ein neues konsistentes Modell zur Verfügung, das Kondensation sowie freie und erzwungene Konvektion abdeckt. Erweiterungen, wie zum Beispiel eine Segmentierung von Strukturen bei steigendem Flüssigkeitsspiegel oder ein Modell zum Blasensieden, werden zukünftig nur noch für das CO1-Modell entwickelt.

Neben dem codetechnischen Aspekt ist auch die Nutzung aus Anwendersicht zu beurteilen: Bei der Eingabe der Daten für Strukturen selbst sind abhängig von der Wahl der zu aktivierenden Wärmeübergangsmodelle üblicherweise auch charakteristische Längen, wie bspw. die Höhe, zu spezifizieren, die in den Korrelationen Eingang finden. Während bei Verwendung der älteren Wärmeübergangsmodelle nach umfangreichen Parameterstudien dieser Wert empirisch auf 0,05 m festgelegt wurde, muss bei der Verwendung von CO1 die Länge der real auftretenden Konvektionsschleife bzw. des Strömungspfadens an einer Struktur definiert werden.

Das Problem für den Anwender besteht dann darin, die Konvektionsschleifenlänge zu definieren bzw. abzuschätzen. Dabei sind spezifische Einflussfaktoren zu beachten, die die Ausbildung einer ungestörten Konvektionsschleife behindern können:

- Vorsprünge wie Kabel oder Rohre.
- Vorsprünge und verschiedene Geometrien können die feinere Unterteilung von Strukturen notwendig machen, da Konvektionsschleifen durch Vorsprünge an einer

Wand unterschiedlich lang ausfallen können; dies würde die Rechenzeit erheblich erhöhen.

- Sollten Schichtungen auftreten, könnte eine Entkopplung der oberen und unteren Konvektionsschleife auftreten.
- Darüber hinaus muss die Form der Wand, an der sich die Schleife ausbildet, berücksichtigt werden, da z. B. in einer Kugelschale die Konvektionsschleife nicht mehr so einfach definiert werden kann bzw. von den genauen Zuständen im SHB abhängt; so würde ein heißes Gas an einer gekrümmten Fläche dichtegetrieben aufwärts strömen, ein kaltes Gas entsprechend nach unten.

Im Folgenden soll der Einfluss der Konvektionsschleifenlänge auf die Ergebnisse anhand einiger Beispielrechnungen diskutiert werden, um zu klären, wie groß der Einfluss der Wahl der charakteristischen Länge auf globale und lokale Größen ist.

Folgende Datensätze wurden für die Untersuchungen zugrunde gelegt:

- Der generische DWR-KONVOI-Datensatz, da es sich beim KONVOI SHB um einen in Teilen sehr offenes und in Teilen stark unterteiltes Gebäude handelt, und da es einer der detailliertesten SHB-Datensätze in der GRS ist.
- Ein Datensatz für die THAI-Anlage zur Nachrechnung des PAR-Verhaltens; dieser Datensatz wurde schon für CO1 entwickelt und die Strukturen sind allesamt deutlich kleiner als im KONVOI SHB, so dass sich möglicherweise Aussagen bzgl. der Relevanz des CO1-Einsatzes bei verschiedenen Strukturgrößen ermitteln lassen.

Für den KONVOI-Datensatz wurden zwei Szenarien ausgewählt, die auch in der Vergangenheit schon gerechnet wurden (siehe /BAN 12/). Bei beiden Szenarien handelt es sich um Ergebnisse einer MELCOR-Rechnung, wobei die Freisetzungen aus dem MELCOR-Primärkreislauf am Leck in den COCOSYS-Datensatz eingespeist werden, der Energiefluss aus den heißen PKL-Strukturen in den SHB wird ebenfalls als Einspeisungstabelle berücksichtigt:

- MBL-Fall (Medium Break LOCA – **Loss Of Cooling Accident**): Leckstörfall, mit einer Leckgröße, dass die im Kern freiwerdende Energie mit dem ausströmenden Medium in den SHB abgeführt werden kann, aber der Druck erst nach mehr als 30 s auf unter 9 bar abfällt. In dem Szenario wurde unterstellt, dass die Not- und Nachkühlsysteme bis zur Umschaltung auf Sumpfbetrieb laufen.

- ND*-Fall¹⁰: Transiente infolge Totalausfalls der Dampferzeugerbespeisung; unterstelltes Versagen sämtlicher aktiver Not- und Nachkühlsysteme; Vermeidung eines potenziellen Hochdruckversagens des RDB durch primärseitige Druckentlastung. Hier erfolgt die Freisetzung in den SHB erst, nachdem die Berstscheiben am Druckhalter-Abblasetank versagt haben, und dann auch an einer deutlich höheren Stelle im SHB (ca. 18,6 m); frühere Rechnungen haben gezeigt, dass sich in diesem Szenario eine Temperaturschichtung im SHB ergibt.

Um auch in diesem Szenario das Spaltproduktverhalten zu analysieren, wurde die Freisetzung des MBL-Falls übernommen, aber entsprechend der H₂-Freisetzung zeitlich verschoben.

Für beide Szenarien wurde die Rechnung kurz vor dem RDB-Versagen beendet.

Dazu wurde der KONVOI-Datensatz auf CO1 umgestellt, d. h., dass

- Strukturen nicht feiner unterteilt wurden. Nur wenn die gesamte Wand nach oben ungehindert überströmt werden kann, wurde die Konvektionsschleifenlänge nach oben verlängert.

Bisher wurde in den meisten Räumen die gesamte Wand – aus Gründen der geringeren Rechenzeit – mittels einer Struktur, deren Dicke der halben mittleren Wandstärke entspricht, simuliert, wobei die rechte Seite dann adiabat gesetzt wurde. Falls eine hohe Temperaturdifferenz über eine Struktur möglich wäre (z. B. in der Reaktorgrube während MCCI) wurde selbstverständlich eine feinere Nodalisierung gewählt.

- für die meisten Räume die Strukturhöhe und die Konvektionsschleifenlänge auf die Raumhöhe gesetzt wurde.
- im Dombereich bzw. im Ringraum aufgrund der uneindeutigen Definition der Konvektionsschleifenlänge diese auf 32 m gesetzt wurde. Es ist auch nicht klar, ob die Konvektionsschleife an der Struktur entlanglaufen muss, damit wäre die Struktur deutlich länger (ca. 42 m). Die eigentliche Höhe vom Beckenflur in den Dombereich beträgt etwa 29,6 m (zum höchsten Punkt).

¹⁰ ND*-Kernschmelzfall: niedriger Druck im Primärkreis nach später Druckentlastung durch anlageninterne Notfallmaßnahmen, im Gegensatz zum ND-Kernschmelzfall: niedriger Druck im Primärkreis nach früher Druckentlastung durch das auslösende Ereignis (z. B. großes Leck in Hauptkühlmittelleitung).

Im Fall der KONVOI-Analysen wurden für jedes der Szenarien drei Rechnungen durchgeführt. In einer wird der Eingabeparameter HLENG auf die Strukturhöhe, die als charakteristische Länge der Konvektionsschleife angenommen wird, gesetzt (zh+000 %), in einer anderen Rechnung wird die Konvektionsschleife auf ihre Maximallänge gesetzt (zh+100 %) und zwischen diesen beiden Fällen wurde noch ein Fall „zh+050%“ gerechnet, d. h., hier wurde die Konvektionsschleifenlänge auf die Strukturhöhe plus 50 % (Konvektionsschleifenlänge – Strukturhöhe) gesetzt.

Im Fall der THAI-Anlage wurden nur die beiden „extremen“ Fälle – Konvektionsschleifenlänge entspricht der Strukturhöhe bzw. der maximalen Länge – berechnet. Wie schon beim KONVOI-Datensatz stellt auch bei der THAI-Anlage die obere und untere Kalotte infolge ihrer gekrümmten Form eine Unbekannte bei der Definition der Konvektionsschleifenlänge aus Anwendersicht dar.

4.1.1 Simulationsergebnisse

In diesem Abschnitt sollen nur die Unterschiede zwischen den verschiedenen Eingaben der Konvektionsschleifenlänge in den Ergebnissen diskutiert werden, die Beschreibung der Ergebnisse mit Hinblick auf die Szenarien ist nicht Teil der hier durchgeführten Arbeiten.

4.1.1.1 MBL-Szenario

In den folgenden Abbildungen (Abb. 4.1 – Abb. 4.6) sind charakteristische Thermohydraulik-Parameter (z. B. Druck, Temperatur) für die Rechnungen mit Variation der charakteristischen Länge dargestellt. Im Druckverlauf ist kein nennenswerter Unterschied zu sehen. Nur bei den Temperaturen im Dombereich können geringe Unterschiede zwischen den verschiedenen in den Strukturdefinitionen angegebenen Längen der Konvektionsschleifen festgestellt werden (3 – 4 °C), auch in der Dampfkonzentration in der äußeren Peripherie in der obersten Ebene unterhalb des Beckenflurs fiel in der „zh+000 %“-Rechnung ein höherer Wert auf.

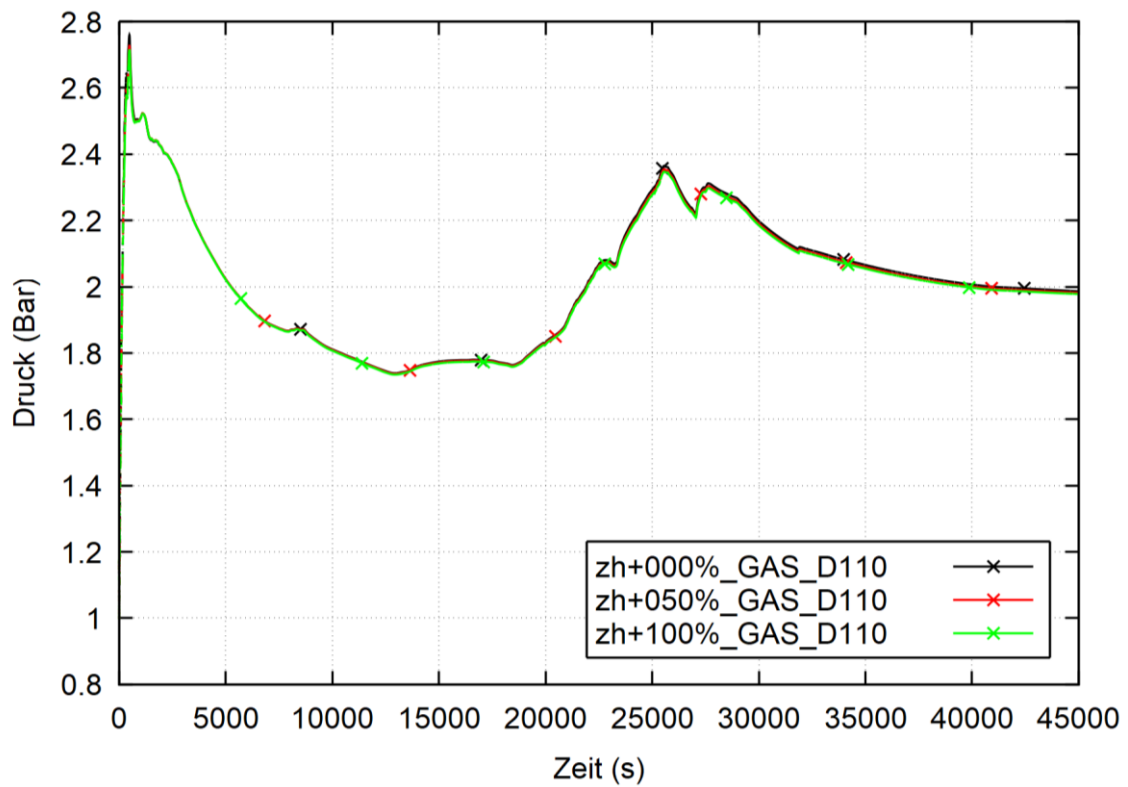


Abb. 4.1 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: zeitlicher Verlauf des SHB-Drucks (MBL-Fall)

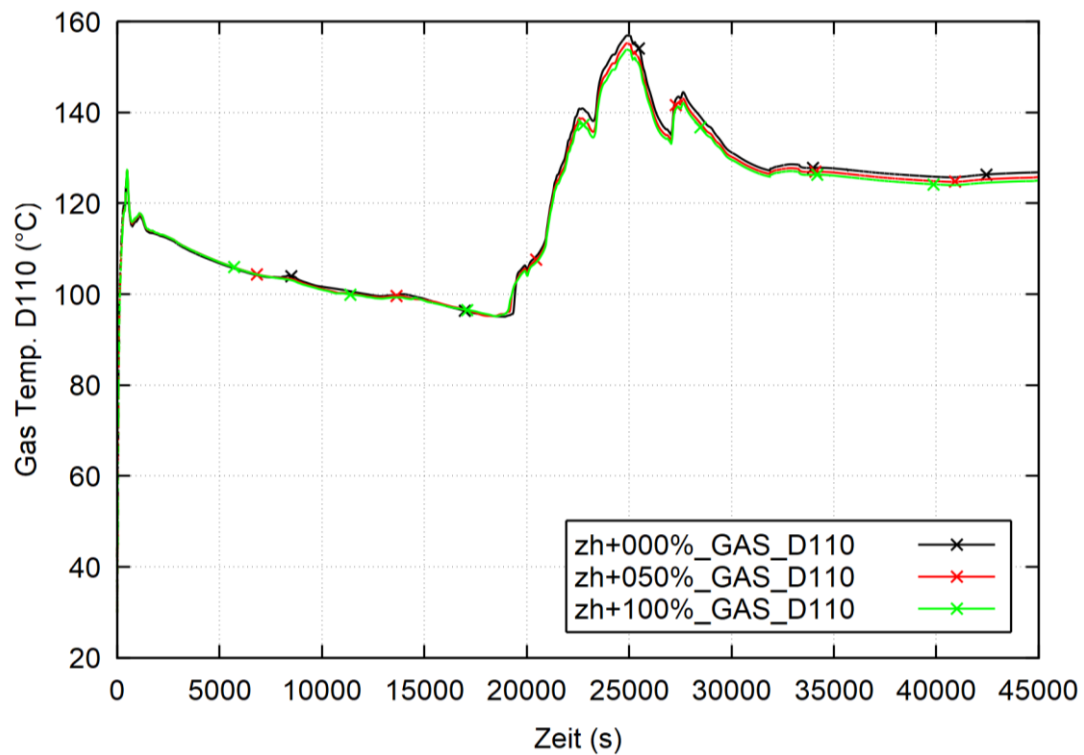


Abb. 4.2 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Gastemperatur im Dombereich (MBL-Fall)

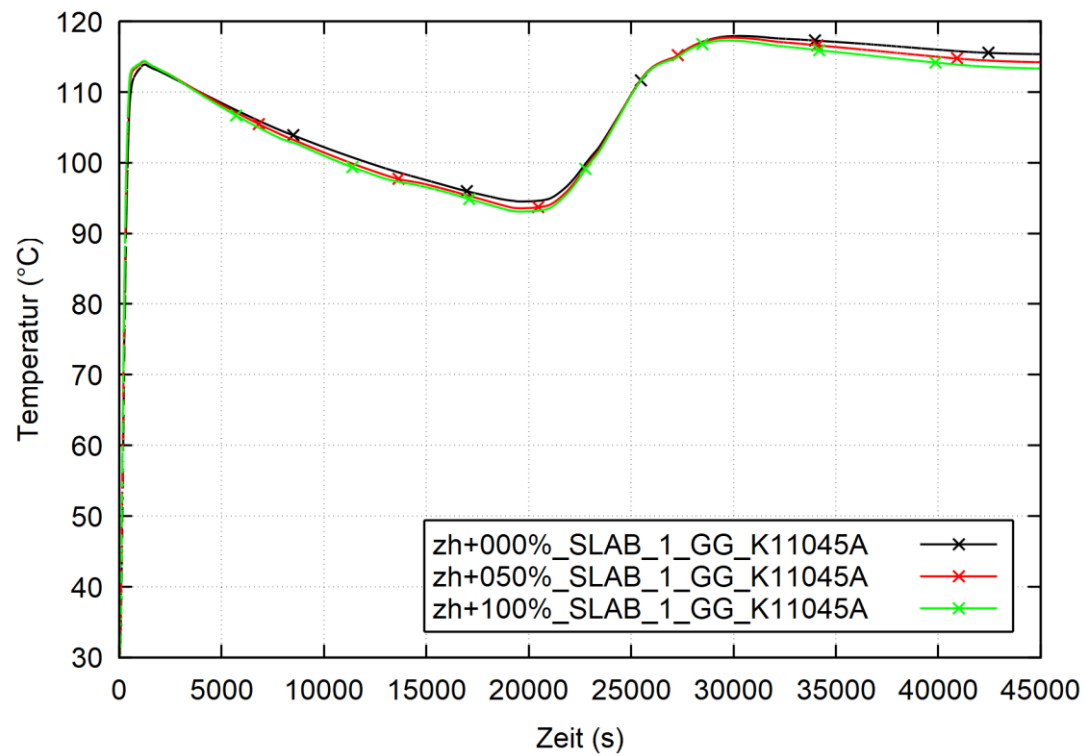


Abb. 4.3 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Temperatur der Stahlschale im Dom-Bereich (MBL-Fall)

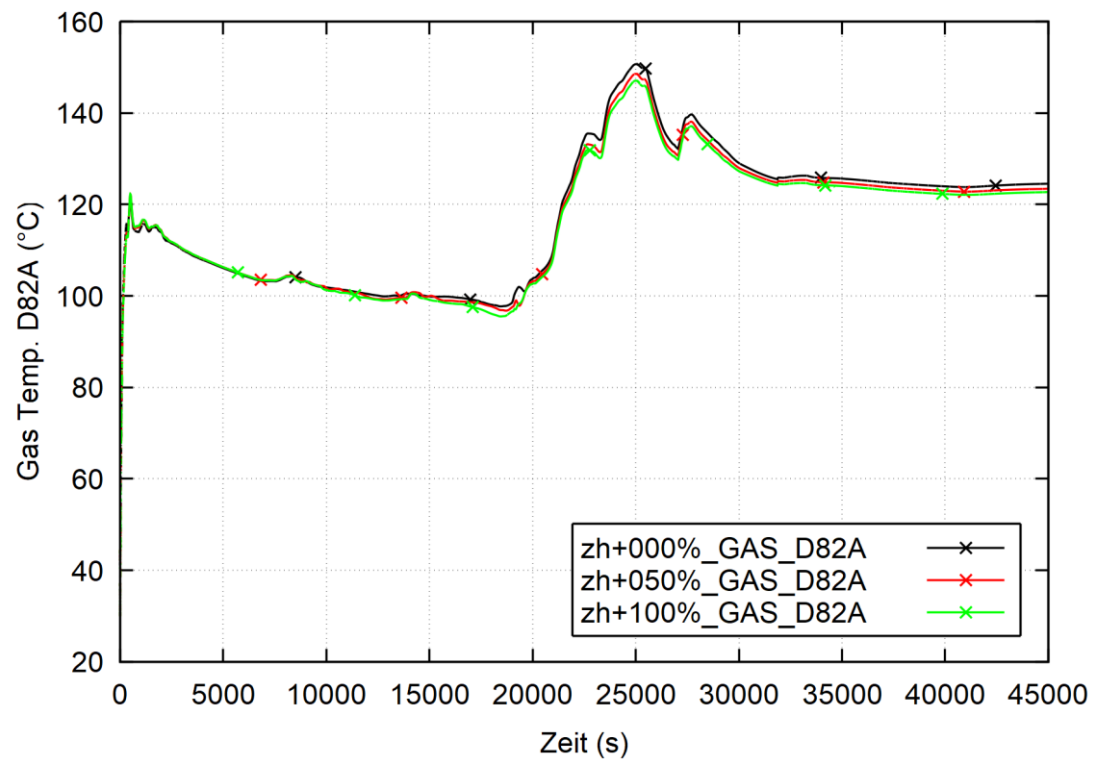


Abb. 4.4 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Gastemperatur im Dom bei 41 m

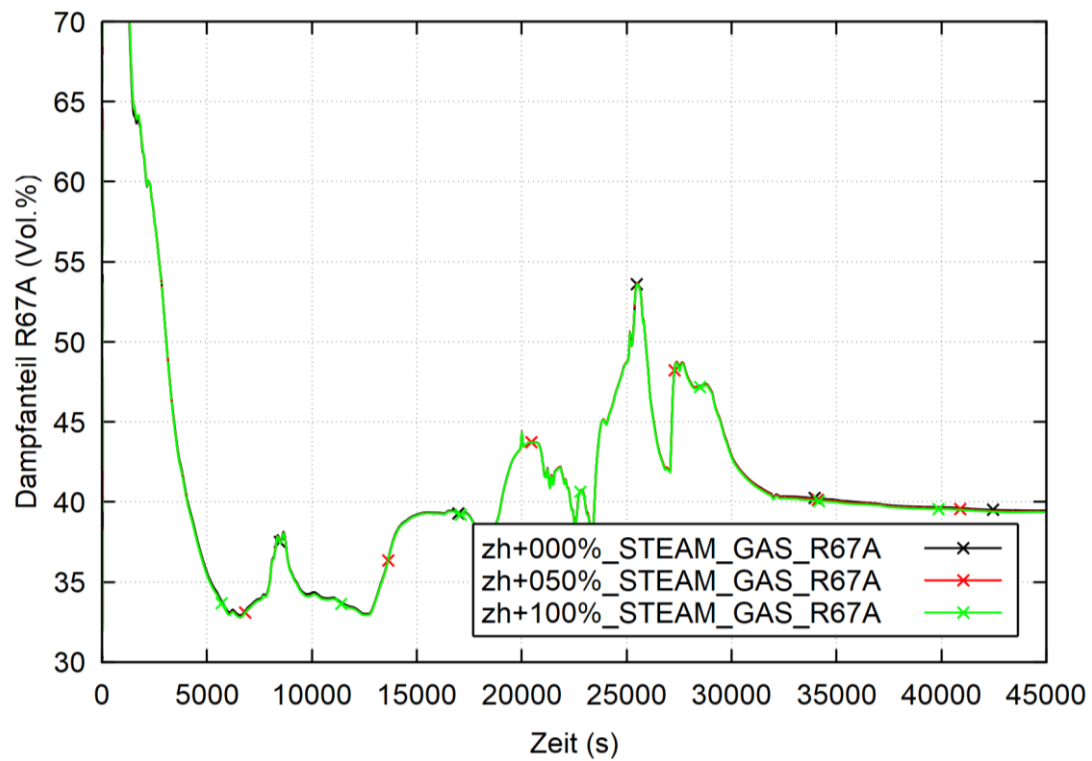


Abb. 4.5 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: zeitlicher Verlauf der Dampfkonzentration in den Anlagenräumen (MBL-Fall)

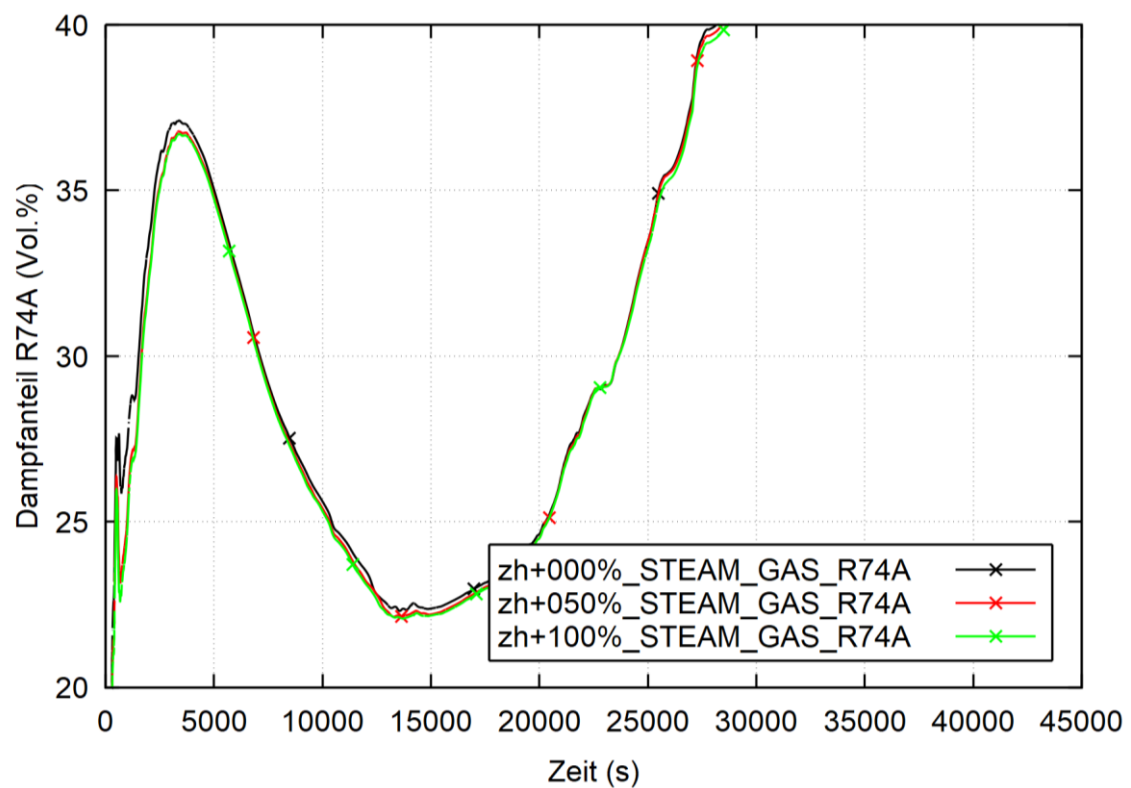


Abb. 4.6 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Dampfanteil in der äußeren Peripherie unterhalb Beckenflur (MBL-Fall)

Eine weitere Möglichkeit, den Einfluss thermohydraulischer Vorgänge bis zu einem gewissen Grad zu erfassen, kann in den abgelagerten Spaltproduktmassen gesehen werden, da verschiedene Ablagerungsprozesse durch Kondensation, Konvektion und Temperaturdifferenzen bestimmt werden. Auch hier zeigt sich, dass die abgelagerte Spaltproduktmasse im Sumpf nahezu unbeeinflusst von der Wahl der charakteristischen Länge ist.

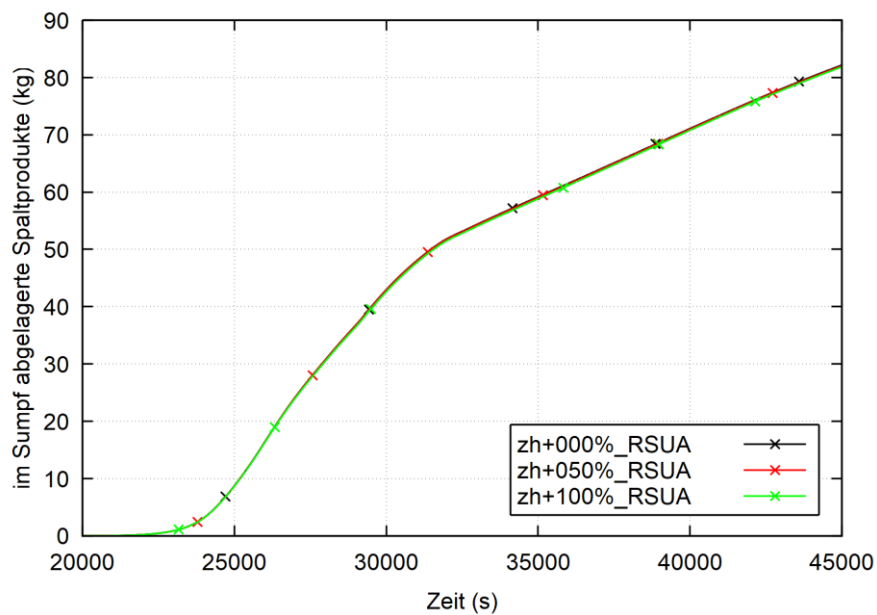


Abb. 4.7 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Masse abgelagerter Spaltprodukte im Sumpf (MBL-Fall)

Abb. 4.8 und Abb. 4.9 zeigen nochmals anschaulich die Problematik, die bei der Definition der Konvektionsschleifenlänge durch den Nutzer auftreten kann: Der obere Teil (angedeutet durch grünen Bogen in Abb. 4.8) der insgesamt kugelförmigen Stahlschale des Sicherheitsbehälters (SHB) stellt eine Struktur dar, die sich über dem untersten Bereich des Rohrkanals bis in den obersten Dombereich und dann wieder auf der anderen Seite nach unten in den Rohrkanal erstreckt. Aufgrund der Temperaturschichtung in der Containmentatmosphäre steigt zunächst die erhitzte Luft über den Dampferzeugertürmen auf, teilt sich bei Erreichen der Stahlschale in einen stagnierenden Bereich direkt unter der Kuppel und einen abströmenden Bereich entlang der kühleren Stahlschale. Es stellt sich kein einheitlich gerichteter Strömungsverlauf entlang der Stahlschale ein. Für diese zeitlich und räumlich veränderlichen Strömungsverläufe wäre eine zeitlich variable Wahl der Länge denkbar, geht aber weit über den Anspruch eines Lumped-Parameter-Programms wie COCOSYS hinaus. Die Beispielrechnungen zeigen zudem, dass der Effekt offensichtlich keinen dominanten Einfluss hat.

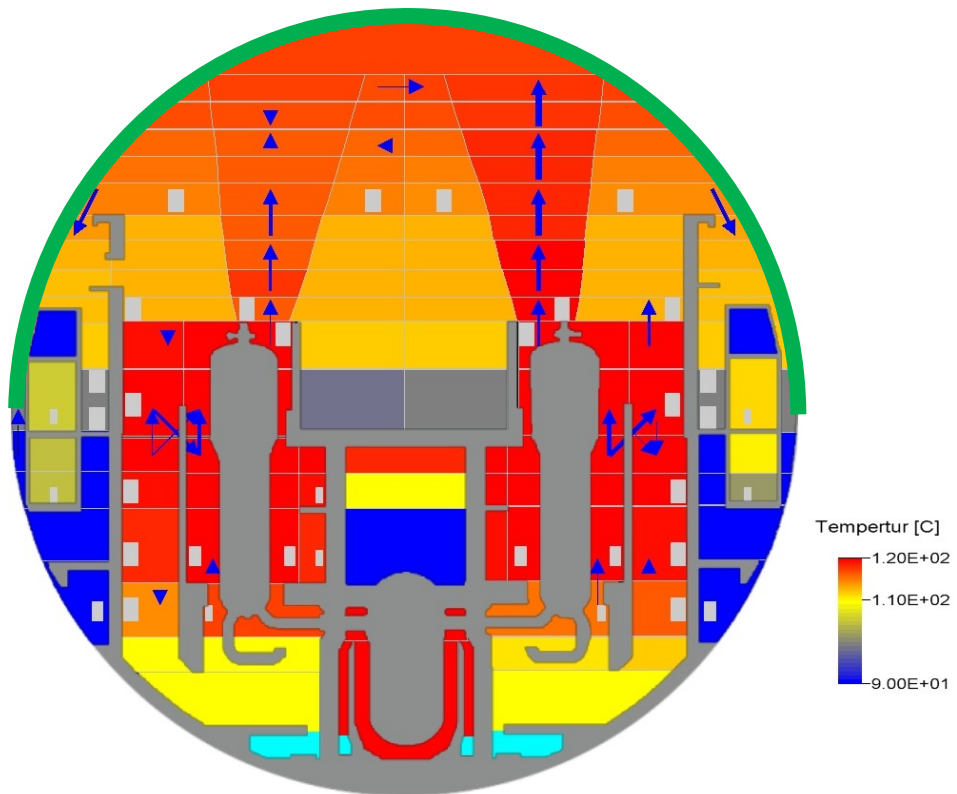


Abb. 4.8 Temperaturverteilung innerhalb des SHB bei 1.000 s (MBL-Fall)

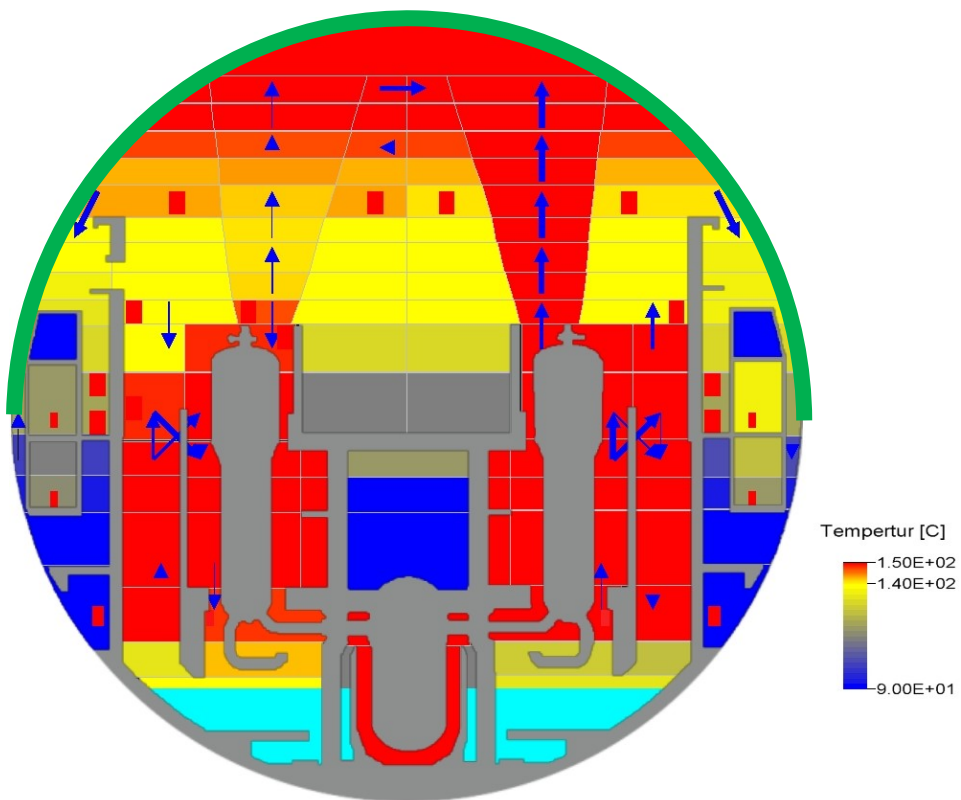


Abb. 4.9 Temperaturverteilung innerhalb des SHB bei 25.000 s (MBL-Fall)

4.1.1.2 ND*-Szenario

Beim ND*-Kernschmelzfall-Szenario : niedriger Druck im Primärkreis nach später Druckentlastung durch anlageninterne Notfallmaßnahmen, im Gegensatz zum ND-Kernschmelzfall: niedriger Druck im Primärkreis nach früher Druckentlastung durch das auslösende Ereignis (z. B. großes Leck in Hauptkühlmittelleitung). Für den ND*-Fall lassen sich die Aussagen aus dem MBL-Fall übertragen, weshalb nachfolgend nur die charakteristischen Größen Druck in Abb. 4.10 und Temperatur in Abb. 4.11 im Containment dargestellt werden.

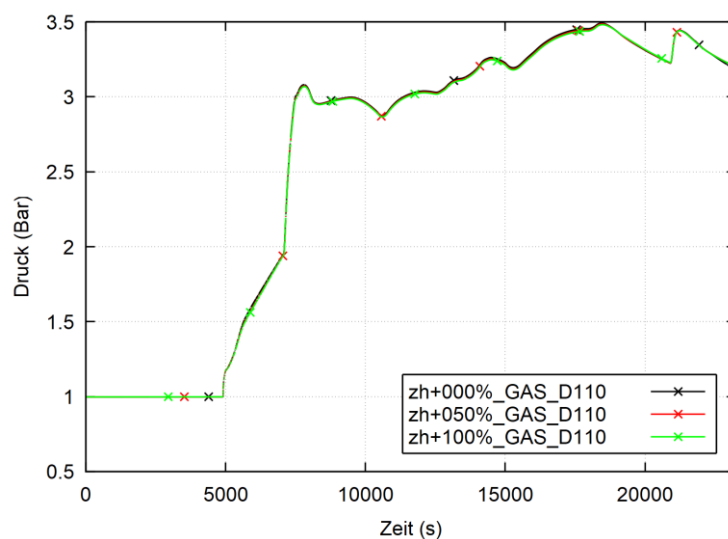


Abb. 4.10 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Zeitlicher Verlauf des SHB-Drucks

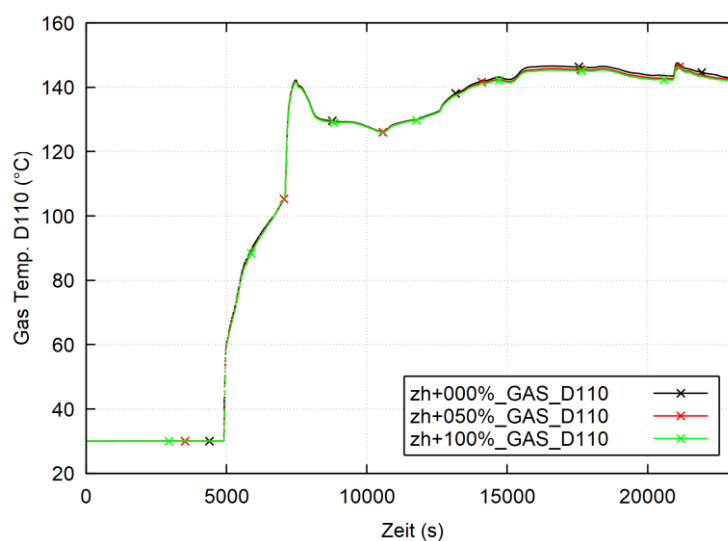


Abb. 4.11 DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Temperaturen im SHB-Dom

4.2 THAI-Detailstudien zum Wärmeübertragungsmodell CO1

Der größte Unterschied zwischen Strukturen in einem SHB und denen in der THAI-Anlage aus der Sicht des Erstellers eines Datensatzes ist sicherlich die absolute Größe bzw. die Höhe. In dem verwendeten THAI-Datensatz sind die Zonen zwischen 30 und 50 cm hoch, während im KONVOI-Datensatz die typische Zone höher als 2 m ist. Gerade bei den kleinen Strukturen wäre ein besonders großer Unterschied zwischen der korrekt spezifizierten Konvektionsschleifenlänge und der Strukturhöhe zu erwarten, die Simulationsergebnisse zeichnen aber ein gegenteiliges Bild. Wie auch bei den KONVOI-Rechnungen ist der Druck der beiden Rechnungen nahezu identisch (siehe Abb. 4.12), weshalb auf eine eingehende Darstellung der Rechnungsdaten verzichtet wird. Der größte Temperaturunterschied zwischen den beiden Rechnungen ist in Abb. 4.13 zu sehen und liegt bei etwas mehr als 0,5 °C.

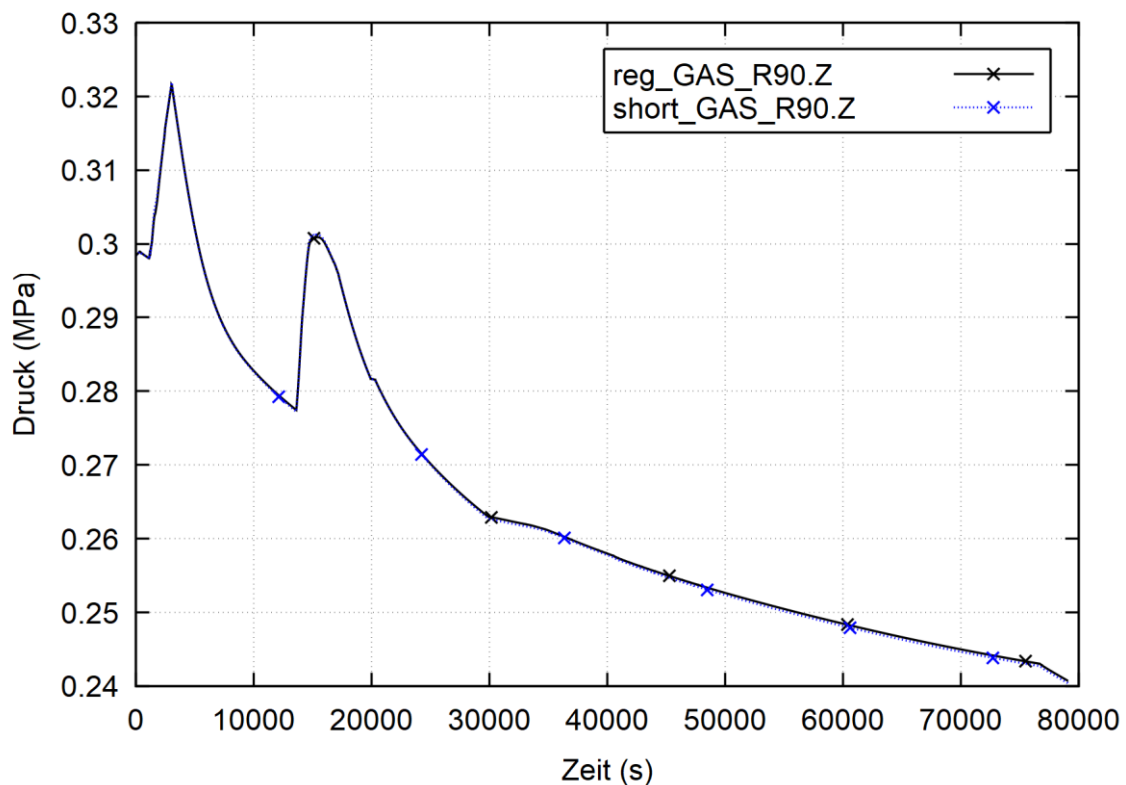


Abb. 4.12 Druck im PAR-Versuch (TTV)

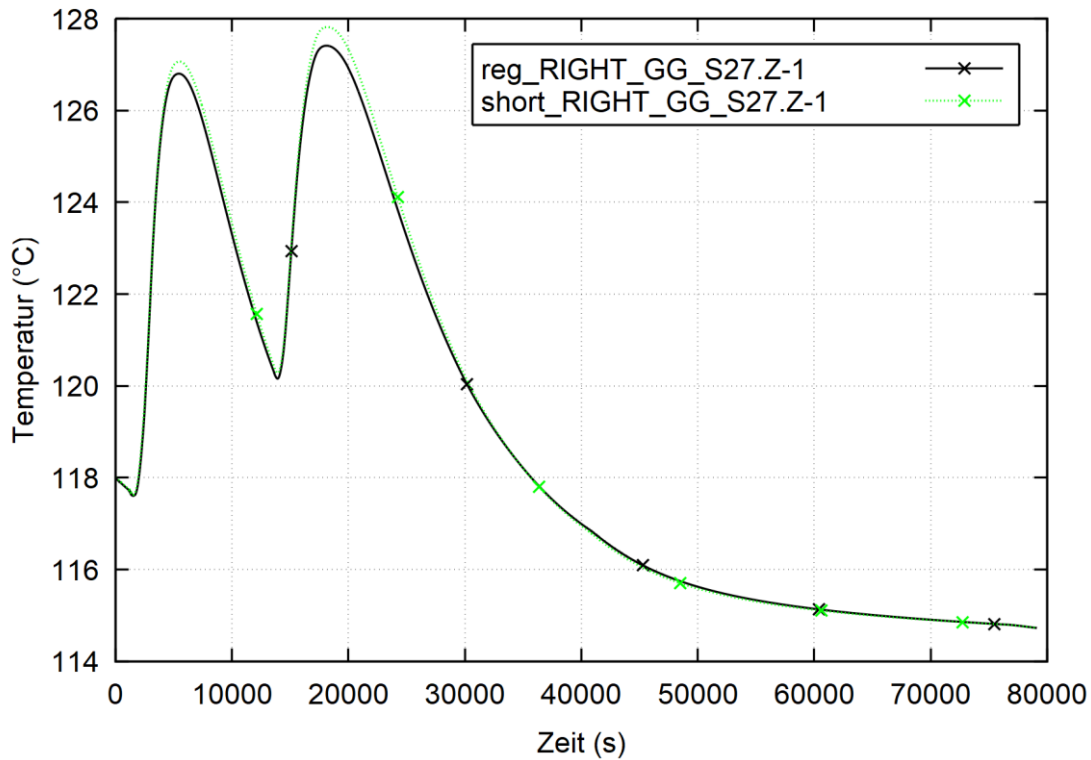


Abb. 4.13 Beispiel für die Temperaturunterschiede in THAI (am Innenzylinder)

4.3 Fazit

Resümierend kann festgehalten werden, dass die vom Anwender zu definierende charakteristische Länge in diesem Fall keine nennenswerten Auswirkungen auf die Thermohydraulik und damit auch auf nachgelagerte Prozesse wie Kondensation und Abwaschen von Spaltprodukten von benetzten Flächen hat. Gleichwohl sollten dem Anwender Empfehlungen für die Wahl der charakteristischen Länge gegeben werden, da, auch abhängig von der Nodalisierung, ein gewisser Interpretationsspielraum gegeben ist. Die in COCOSYS im CO1-Modell verwendeten Korrelationen aus dem VDI-Wärmeatlas sind im Allgemeinen für ideale Randbedingungen (stationäre Strömung, ungestörte Anströmung) hergeleitet.

Ausgehend von den hier durchgeführten Rechnungen kann aber festgehalten werden, dass der Einfluss der Konvektionsschleifenlänge nur lokal und über kurze Zeiträume auftritt und dann der Einfluss auf z. B. die Temperatur mit unter 5 K zwar sichtbar und auch bei einigen Simulationen möglicherweise nicht zu vernachlässigen ist, aber kleiner als die normalerweise bei der Verwendung eines Lumped-Parameter-Codes akzeptablen Toleranzen ausfällt.

5 Querschnittsaktivitäten

5.1 Begleitung nationaler und internationaler experimenteller Programme

Durch vom BMUV geförderte Vorhaben wird sowohl eine kontinuierliche Beteiligung Deutschlands an experimentellen Forschungsvorhaben der OECD/NEA ermöglicht (z. B. THAI, THEMIS, BIP, STEM, CCI u. a.), als auch eine Förderung nationaler Programme (THAI, PKL) vorgenommen. Zudem wird erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch gezogen.

Die fachliche Begleitung erfolgt in vielen Fällen durch die GRS und im Rahmen ihrer Forschungsvorhaben zur Codeentwicklung und -validierung. Zielsetzung ist die Fortführung der Beteiligung an nationalen und internationalen Aktivitäten, insbesondere durch die Begleitung laufender oder in Planung befindlicher experimenteller Programme wie THAI oder dem Nachfolger von OECD/NEA THEMIS. Darüber hinaus ist eine Mitarbeit in fachlich relevanten Arbeitsgruppen der OECD/CSNI oder der IAEA vorgesehen. Durch die enge Verzahnung der Arbeiten bei der GRS mit entsprechenden nationalen wie internationalen Projekten ist ein steter Wissensaustausch und ein Beitrag zum Kompetenzerhalt gewährleistet. Nachfolgend werden die Schwerpunkte der Aktivitäten aufgeschlüsselt.

5.1.1 OECD/NEA THAI

Im Rahmen des vom BMUV geförderten Projekts THAI VII sind Gegenströmungsversuche (THAI TH-35) durchgeführt worden. Um Becker Technologies in der Versuchsplanungsphase zu unterstützen, wurde ein COCOSYS-Datensatz zu den geplanten Versuchen erstellt. In den Auslegungsrechnungen wurden Strömungs- und Temperaturprofile untersucht, um die Randbedingungen zu spezifizieren. Die einzelnen Versuchsphasen wurden detailliert simuliert und analysiert. Die Ergebnisse von COCOSYS-Simulationen wurden regelmäßig in engem Austausch mit Becker Technologies präsentiert und diskutiert. Die COCOSYS-Rechnungen für den Benchmark sind in Kap. 2.1.5, dokumentiert.

5.1.2 OECD/NEA STEM/BIP und ESTER

Auf dem Abschlusstreffen zum Projekt OECD/NEA STEM2 stellte die GRS aktuelle COCOSYS-Analysen zur Zersetzung eines Multikomponenten-Iodaerosols (Agl) und Freisetzung von gasförmigem I₂ unter Strahlungseinfluss auf Basis neu implementierter Reaktionsgleichungen vor. Die Ergebnisse zeigen, dass das Modell sehr sensitiv auf die empirisch bestimmte Abbaurate reagiert. Auch im Nachfolgeprojekt OECD/NEA ESTER wird sich die GRS in der Analytical Working Group (AWG) beteiligen, die experimentellen Arbeiten begleiten und wichtige Themen bzgl. der Modell- und Programmentwicklung in die Diskussion einbringen.

5.1.3 OECD/NEA PRISME-3

Im Rahmen des OECD/NEA-Projekts PRISME-3 wurden zweimal jährlich PRG-Sitzungen durchgeführt. Vorab finden die sogenannten Sitzungen der Analytical Working Group statt. Die GRS beteiligte sich aktiv an den Sitzungen sowie insbesondere an der Ausgestaltung und Durchführung des OECD/NEA-Benchmarks FIRE/PRISME, welcher in Kap. 2.4, ausführlich dokumentiert ist. Die Mitwirkung an den PRG- und AWG-Sitzungen trägt wesentlich zum Erfolg der durchgeführten Arbeiten bei.

Weitere Aktivitäten umfassten dabei auch die aktive Teilnahme an dem OECD/NEA-Benchmark FIRE/PRISME. Um einige grundlegende Schwächen des vereinfachten Kabelbrandmodells zu beseitigen, wurde das Modell anhand eines erweiterten FLASH-CAT-Ansatzes verbessert. Zur Qualifizierung des Modells wurde dieses anhand mehrerer Versuche validiert. Diese umfassen unterschiedliche Kabelmaterialien und Lüftungsbedingungen. Insbesondere für die spätere Phase des Szenarios wurden deutlich bessere Ergebnisse erzielt. Noch bestehende Einschränkungen, wie z. B. die Simulation der Brandentstehung, werden in diesem Bericht erläutert.

5.2 Koordination AC²/COCOSYS-Anwendungsgruppe und Support

Zum Gesamtpaket Programmentwicklung und -validierung gehören auch die Dokumentation und die Anwenderunterstützung. Dazu werden die entsprechenden Dokumente kontinuierlich aktualisiert und vervollständigt und bei kommunizierten Problemen externer Anwender Unterstützung bei der Fehlersuche bereitgestellt. Zum Dokumentationspaket gehören das Handbuch zur Modellbeschreibung, das User Manual sowie die Dokumentation zum Regressionstesten. Letztere Dokumente sind insbesondere im

Rahmen der Freigabe neuer Versionen im Sinne einer qualitätsgesicherten Programmentwicklung Bestandteil von Validierungsaktivitäten.

Mit der Arbeitsgruppe Plant Simulation and Safety (PSS) der Ruhr-Uni-Bochum wurde auf bilateralen Arbeitstreffen der Informationsaustausch intensiviert. Geplant ist eine engere Verknüpfung der Arbeiten von GRS und PSS.

6 Qualitätssicherung und Projektmanagement

6.1 Qualitätssicherung

Zur fachlichen Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen hat das Managementsystem der GRS eine neue, übergeordnete Richtlinie für die Entwicklung, Verifizierung und Validierung von Computerprogrammen in der GRS erstellt. Details der Umsetzung dieser Richtlinie sind im QS-Plan des jeweiligen Softwareentwicklungsprojektes festgelegt. An ihr orientieren sich die jeweiligen Arbeiten im Rahmen der Entwicklung und Validierung. Das dazu erstellte Qualitätshandbuch vervollständigt die codebegleitende Dokumentation. Nachfolgend werden beispielhaft einige Arbeiten aufgezählt:

- Im Rahmen des Regressionstests für die im Verlaufe des Vorhabens freigegebenen Versionen AC2-2019 Patch 1, AC2-2020.0, AC2-2020.1 wurden Unterschiede zu früheren COCOSYS-Versionen festgestellt. Die stärksten Unterschiede traten in Containmentanalysen für russische Druckröhrenreaktoren des Typs RBMK-1500 auf. Um den genauen Grund für die Unterschiede festzustellen, wurden zahlreiche Zwischenversionen von COCOSYS (sog. Commits im GIT-Versionskontrollsystem) untersucht. Modifikationen zur Optimierung der Zeitschrittsteuerung und Korrekturen im Wärmestrahlungsmodell (WWR und WGR) wurden als Gründe für die Unterschiede im RBMK-1500 identifiziert. Diese Codeänderungen stellen eine Verbesserung hinsichtlich der numerischen Stabilität und der physikalischen Modellierung sicher; die Unterschiede in den hochdynamischen Systemen in RBMK-1500 wurden als nicht kritisch eingestuft. Die Studie wurde in einer technischen Notiz dokumentiert.
- Inkonsistenzen in Modellbeschreibungen von autokatalytischen Rekombinatoren wurden im COCOSYS-Nutzerhandbuch (User Manual – UM /ARN 21a/) festgestellt und korrigiert. Weiterhin wurde das Fehlen einer Beschreibung des Bragg-Benedict-Modells zu kurzzeitigen Reibungsverlusten bei schnellen Strömungen im COCOSYS UM festgestellt. Eine kurze Beschreibung des Modells mit relevanten Literaturhinweisen wurde im COCOSYS UM ergänzt. Die Beschreibung der Wärmeübertragungsmodelle mit segmentierten Strukturen wurde erweitert und neue Nutzerempfehlungen wurden im COCOSYS UM dokumentiert.
- Qualitätssicherungsmaßnahmen im Rahmen des Projektmanagements wurden kontinuierlich verfolgt. Im Vorhabenszeitraum wurden monatliche Abstimmungen im Rahmen der Entwicklung, Validierung und Anwendung von COCOSYS auf den

COCOSYS Jour Fixe (JF) durchgeführt und die Arbeiten abgestimmt und priorisiert. Des Weiteren wurden in regelmäßigen Abständen AC²-JF durchgeführt, die alle maßgeblichen Arbeiten in der GRS zu AC² (ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS) betreffen.

- Im Januar 2020 wurde ein interner Strategie-Workshop zu AC² in der GRS durchgeführt. Dabei wurden Themenpunkte entsprechend ihrer Priorität und des Aufwandes diskutiert und in einem Strategiedokument festgehalten. Die Strategie soll kontinuierlich überprüft und an aktuelle Erfordernisse angepasst werden.

Regressionstest zur Unterstützung der Validierung

Neue bzw. geänderte Modelle können aufgrund der gegenseitigen Wechselwirkung und der zunehmenden Komplexität der Modellentwicklung auch eine unbeabsichtigte Auswirkung auf Rechenergebnisse von nicht unmittelbar betroffenen Modellen bzw. Phänomenen haben. Insbesondere ist auch eine verstärkte Anwendungserprobung auf realistische Situationen erforderlich, insbesondere für Modelle, bei denen eine Validierung im klassischen Sinn gegenüber Experimenten nicht durchgeführt werden kann.

Durch Regressionstests werden ausgewählte Experimente und exemplarische Anlagenrechnungen mit demselben Datensatz aber unterschiedlichen Programmversionen wiederholt nachgerechnet. Dadurch kann auch der Entwicklungsfortschritt nachvollziehbar dokumentiert werden oder ungewollte Änderungen werden sichtbar.

Vor der Freigabe werden die neuen AC²-Versionen in mehreren Zyklen wiederholt dem Regressionstesten unterworfen. Dies bedeutet insbesondere das zeitnahe Testen der in kurzer Folge erstellten sog. Release-Kandidaten, die aktuelle, letzte Änderungen beinhalten. Die Ergebnisse wurden jeweils analysiert, Abweichungen diskutiert und dokumentiert. Die Ergebnisse wurden dann in separaten Berichten dokumentiert /ARN 21c/, /ARN 22/ und in den AC²-Installationspaketen beigelegt.

Dokumentation – Nutzerempfehlungen – Veröffentlichungen

In der Projektlaufzeit wurden die Arbeiten entsprechend ihrer erzielten Ergebnisse in internen technischen Notizen, offiziellen Publikationen in Zeitschriften oder Konferenzen sowie in Form von Präsentationen auf nationalen wie internationalen Workshops präsentiert (/FRE 21a/, /ARN 21c/, /ARN 22/, /FRE 19/, /REI 19b/, /SPE 12b/, /BAK 20b/, /BAK 20d/, /ILI 22d/, /ILI 22b/, /ILI 22c/, /ILI 22a/).

7 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die Arbeiten zum BMUV geförderten Projekt RS1579 mit dem Titel „Validierung von COCOSYS im Programmsystem AC²“ und beinhaltet die fortgeführte Qualifizierung bzw. Validierung des weiterentwickelten und an den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik sowie an internationale Entwicklungen neuer Reaktorkonzepte angepassten Rechenprogramms COCOSYS und seiner Modelle.

7.1 Validierung von Einzelmodellen in COCOSYS

Die Validierung von Einzelmodellen konzentrierte sich auf die Analyse und Bewertung neuer oder überarbeiteter Modelle in COCOSYS sowie die analytische Begleitung von experimentellen Programmen national wie international (z. B. THAI). In diesem Arbeitspunkt wurden unterschiedliche Themengebiete innerhalb dieses Vorhabens bearbeitet.

Validierung neuer und aktualisierter thermohydraulischer Modelle

- Leichtgasschichtungen

Die mit dem GRS-Code COCOSYS für den Test THAI TH-29 durchgeführten Analysen zeigen deutlich die Anwendbarkeit von COCOSYS zur Modellierung bestimmter Phänomene, die für Sicherheitsanalysen in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken wichtig sind. In Bezug auf die Testserie THAI TH-29 umfassen die Phänomene das thermohydraulische Verhalten von nicht kondensierbaren Gasen unter besonderer Berücksichtigung von Dampf und dessen Kondensation, die zu einer lokalen Anreicherung von Helium (oder Wasserstoff im realen Fall) führen kann. Der Vergleich mit den Experimenten bestätigt die Modellgüte in COCOSYS. Um alle relevanten thermohydraulischen Phänomene wie Wärmeübergang und Kondensation an Bauwerken zu erfassen, ist eine detaillierte Anlagenkenntnis notwendig.

- Rekombinatorverhalten in H₂/CO-Atmosphäre

Sowohl die blinde als auch die offene COCOSYS-Simulation im Rahmen der Beteiligung am Benchmark THAI HR-57 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung hinsichtlich der integralen Rekombinationsmassen von H₂ und CO als Hauptuntersuchungsziel dieses Tests. Die wesentlichen Phänomene im Versuch, wie Aktivität des PAR und komplexe Randbedingungen, sind sehr genau simuliert. Das Anlauf- und Auslaufverhalten im PAR

ist derzeit durch feste Parameter definiert. Diese können, allerdings nur in geringem Maße, das Rekombinationsverhalten in diesen Phasen beeinflussen und sind auch integral betrachtet eher von untergeordneter Bedeutung.

- Simulation vollständig gefüllter Zonen

Anhand der Simulation des Tests THAI Iod-31 wurde der Modellfortschritt bei einer Unterteilung einer Wasservorlage in einzelne COCOSYS-Zonen, die mit ATM_FULL-Verbindungen verbunden sind, aufgezeigt: die Genauigkeit der Simulationsergebnisse konnte verbessert werden. Die Unterteilung einer Wasservorlage auf mehrere Zonen ist insbesondere dann zu empfehlen, wenn Temperaturstratifikation im Wasser stattfinden kann. Die numerische Stabilität bei der Anwendung von ATM_FULL-Verbindungen mit Sprühsystemen und Pumpen ist sehr gut.

- Sprühmodellierung

Für die Simulation des Tests PANDA ST3_2 für Containment-Sprühsysteme wurde das von der Ruhr-Universität Bochum entwickelte und von der GRS in COCOSYS implementierte Entrainment-Modell verwendet, um den Spray-induzierten Atmosphärenmitriss (Entrainment) zu berücksichtigen. Die Entrainmentströmung wurde auf der Grundlage von drei verschiedenen experimentellen Korrelationen (MacGregor, McQuaid und Benatt-Eisenklam) berechnet, die wiederum aus Experimenten mit einzelnen Sprühstrahlen abgeleitet wurden. Die Anwendung des RUB-Entrainment-Modells zeigt keine Unterschiede in der von den drei experimentellen Entrainment-Korrelationen vorhergesagten Druckabbauraten während des Tests PANDA ST3_2. Die Ergebnisse der Nachrechnungen zeigen zudem, dass die Anwendung des kombinierten freien, erzwungenen konvektiven und Kondensationsmodells (CO1) für den Wärmetransport an Strukturen in COCOSYS zu niedrigeren atmosphärischen Temperaturen in der Kuppel führt, verglichen mit denen, die mit dem bisher verwendeten Wärmetransportmodell berechnet wurden. Die korrekte Implementierung und Anwendbarkeit konnten somit nachgewiesen werden.

- Modellerweiterungen bei Gegenströmung

Ein einfacher korrelativer Ansatz ist in COCOSYS verfügbar, der in engen Geometrien das Phänomen von Gegenströmungen (z. B. durch Türen) abbilden kann. Die turbulenten Reibungsverluste an der Grenzschicht zweier entgegengesetzter Strömungen gasförmiger Fluide werden dabei durch einen Parameter bestimmt, der aus CFD-Analysen

abgeleitet wurde und sich am Test THAI TH-35 im Rahmen eines blinden Benchmarks seine Anwendbarkeit in COCOSYS bestätigte.

Validierung von NewAFP in COCOSYS

- Umsetzen der Regressionsdatensätze auf NewAFP

Die Umsetzung der AFP-Eingabedatensätze auf NewAFP im Regressionstesten ist erfolgreich durchgeführt worden. Dies betrifft im Wesentlichen die Aerosolveruche. Auch mit NewAFP konnten die experimentellen Ergebnisse in gleicher Güte wie mit AFP reproduziert werden. Da NewAFP im Gegensatz zu AFP jetzt dieselben Strukturinformationen aus der Eingabe verwendet wie das COCOSYS-Thermohydraulikmodul THY – was eine Kritik am AFP war – ist der Eingabedatensatz jetzt deutlich konsistenter, d. h., es müssen nun keine separaten Daten für Strukturen eingegeben werden. Es zeigte sich aber auch, dass der realitätsnahen Umsetzung der Geometrie eine hohe Aufmerksamkeit zukommen muss. Auch sind die Rechenzeiten teils deutlich höher als bei Anwendung von AFP.

- Iod-Freisetzung aus siedendem Sumpf

Der Test THAI Iod-32 ist durchgeführt worden, um den Einfluss eines siedenden Sumpfes auf die Freisetzung von gasförmigem I_2 über den Massentransfer an der Sumpfoberfläche zu bestimmen. Nach der ersten Versuchsphase ohne Sieden nimmt die I_2 -Konzentration in der Atmosphäre des PAD auch um 2 Größenordnungen zu, womit dieser Effekt bestätigt worden ist. Die Rechnung mit NewAFP gibt diesen Verlauf qualitativ richtig wieder. Allerdings wird insbesondere die erste Versuchsphase nicht gut berechnet und der Massentransfer über die Wasseroberfläche stark überschätzt. Der verwendete wasserseitige Massentransferkoeffizient für bewegte Pools scheint für diese Versuchsphase nicht geeignet zu sein, obwohl der Pool durch eine externe Pumpe umgewälzt wird. Der Standardwert in COCOSYS ist deutlich niedriger und bezieht sich auf ruhende Pools.

- THAI AW-4 zu Kondensationsvorgängen an Containmentstrukturen

In dem Test THAI AW-4 wurde in Wasser gelöstes Csl zusammen mit Luft über ein Sprühsystem in den THAI-Behälter eingebracht. Die Atmosphäre in dem Behälter ist dabei so weit überhitzt, dass das Wasser verdampft und das Csl als Aerosol in der Atmosphäre verbleibt. Danach wird mittels eines zweiten Sprühsystems zweimal kurz hintereinander gesprüht, um Aerosole aus der Atmosphäre auszuwaschen. Über die

Heizmäntel und elektrischen Heizmatten werden dabei die Randbedingungen stabil gehalten. Ein Vergleich der Ergebnisse von AFP und NewAFP zeigt, dass hinsichtlich der Thermohydraulik (z. B. Druck) die experimentellen Werte besser getroffen werden, charakteristische Ergebnisse z. B. zum Aerosolverhalten zeigen deutlich verschlechterte Ergebnisse zwischen AFP und NewAFP. Tiefergehende Analysen ergaben, dass sowohl AFP als auch NewAFP in das Sprühmodell eingreifen, um Vorgänge an der Tropfenoberfläche zu simulieren. Dieses Modell wurde überarbeitet und ändert die Depositionsrates der Nebeltröpfchen an der Wasseroberfläche.

Da noch nicht alle Ergebnisse freigegeben wurden, sind die Arbeiten und Analysen derzeit noch als vorläufig einzuschätzen. Die Ergebnisse zeigen zwar, dass alle maßgeblichen Phänomene berücksichtigt und Tendenzen teilweise besser getroffen werden, aber die Abweichungen teilweise noch erheblich sind und weiterer Untersuchungen bedürfen.

Validierung des CCI-Moduls in COCOSYS

Ziel der Validierungsarbeiten zum CCI-Modul in COCOSYS war es, den aktuellen Stand der Modellierung hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung unabhängig zu Aktivitäten der Ruhr-Universität Bochum zu überprüfen. Dazu wurden mit dem CCI-Modul Nachrechnungen ausgewählter Versuche aus der ACE-Versuchsreihe durchgeführt. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die Nachrechnungen unter Verwendung des von der GRS empfohlenen universellen Ansatzes für die Wahl der unsicheren Eingabeparameter (effektive Wärmetransferkoeffizienten und Betonzerstörungstemperatur und -enthalpie) im CCI-Modul akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen zeigen. Dabei stellt sich heraus, dass für die hier ausgewählten ACE-Versuche die Simulation mit dem empfohlenen Wert von $300 \text{ W/m}^2\text{K}$ für den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten an der Schnittstelle Schmelze/Beton sowie an der Schnittstelle Schmelze/Atmosphäre die experimentellen Werte des Erosionsfortschritts zufriedenstellend wiedergibt.

Für die Simulation der Rückhaltung und der langfristigen Schmelzekühlung im Kernfänger einer EPR™-Anlage steht dem COCOSYS-Nutzer das von der GRS entwickelte Kernfänger-Modell zur Verfügung. Dieses Modell kombiniert das Aufschmelzmodell (im CCI-Hauptmodul) zur Berechnung der Interaktion zwischen Kernschmelze und Opfermaterial sowie das CCV-Modell für den Wärmeübergang von der heißen Kernschmelze an die gekühlten Kernfängerplatten. Zielsetzung der durchgeführten Arbeiten war es, das Kernfänger-Modell sowie das CCI-Hauptmodul (CCI) in COCOSYS, speziell in

Bezug auf deren Anwendung auf das EPRTM-Design, auszutesten. Zur Überprüfung der Anwendbarkeit des Kernfänger-Modells wurden COCOSYS-Testrechnungen mit einem vereinfachten Datensatz für das EPRTM-Containment durchgeführt. Dabei wurden die passive Schmelzekühlung durch Wasserüberflutung der Kernschmelze sowie die aktive Langzeitkühlung der Kernschmelze mit geschlossenem Kreislauf im Fall eines Unfalls mit RDB-Versagen untersucht. Die Anwendbarkeit konnte erfolgreich nachgewiesen werden.

Validierung des Kabelbrandmodells

Im Rahmen des OECD/NEA-Projekts PRISME beteiligte sich die GRS erfolgreich an dem Benchmark zum Thema Kabelbrand, der in mehreren Schritten durchgeführt worden ist. Mit der Implementierung eines erweiterten FLASH-CAT-Modells in COCOSYS wurden verschiedene Defizite erfolgreich behoben. Das verbesserte Modell wurde anhand mehrerer PRISME-Experimente mit verschiedenen Kabeltypen und Lüftungsbedingungen validiert und lieferte gute Ergebnisse.

7.2 Erprobung von AC²/COCOSYS auf fortschrittliche und innovative Anlagenkonzepte/passive Systeme

Passive Containmentwärmeabfuhr für fortschrittliche Anlagekonzepte

Im diesem Arbeitspunkt sollte untersucht werden, ob und wie sich CoPool für die Berechnung des Wärmetransportes eines typischen SMR-Containments an den umgebenden Wasserpool eignet. Dazu wurden sowohl CoPool-Stand-alone- als auch gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnungen mit einer vereinfachten, generischen SMR-Geometrie durchgeführt.

Die Ergebnisse von gekoppelten COCOSYS-CoPool-Berechnungen zeigen qualitativ korrekt die Bildung von Konvektionsschleifen und die erwartete Temperaturschichtung.

Zwei wichtige Beschränkungen von CoPool für Simulationen von Unfällen in SMR sind, dass CoPool nur für die einphasige Simulation von Wasser ausgelegt ist und dünne Strukturen in der Größenordnung einiger Zentimeter nur in einzelnen Fällen realisiert werden können. Für eine genaue Abbildung von lokalem sowie stark ausgeprägtem Sieden in Wasserpools wären weitere, sehr umfangreiche Entwicklungen nötig.

Mit den Erfahrungen dieser Studie muss die Anwendung von CoPool als untypisch und anspruchsvoll eingestuft werden. CoPool ermöglicht im Vergleich zu COCOSYS eine detaillierte Berechnung von lokalen Effekten in große Wassertanks, solange die Strömung einphasig ist. Die CoPool-Rechnungen und die Kopplung mit COCOSYS sind sehr zeitaufwändig und zudem auch fehleranfällig. Sollen nur mittlere Temperaturen im Containment oder Wassertank betrachtet werden, so lohnt sich dieser Aufwand kaum, da sich die Ergebnisse für die mittleren Werte lediglich in geringem Maße unterscheiden. In kritischen Grenzfällen kann aber nur mit Hilfe von CFD-Simulationen beurteilt werden, ob lokal schon Siedetemperaturen an der Containment-Oberfläche auftreten.

Passive Wärmeabfuhrsysteme fortschrittlicher Anlagenkonzepte

Passive Wärmeabfuhrsysteme sind durch komplexe Strömungs- und Wärmetransportmechanismen (freie Konvektion, Sieden) charakterisiert. Durch die oftmals enge physische Kopplung von Primärkühlkreislauf und Containment ist demzufolge auch eine rechen-technische Kopplung für die Simulation solcher Systeme sinnvoll. Entsprechende Experimente zur Bewertung der AC²-Rechenkette bzw. der Einzelprogramme stehen z. B. aus der INKA-Anlage oder auch aus PASI zur Verfügung. Im Rahmen der Nachrechnung jeweils eines Experimentes jeder Versuchsanlage konnten gezielt die Modell-erweiterungen in AC² und COCOSYS getestet und bewertet werden. Für das Naturumlaufexperiment in PASI wurde das in COCOSYS verfügbare und weiterentwickelte GEKO-Modell eines Gebäudekondensators getestet. Die Ergebnisse sind vielversprechend hinsichtlich integraler und der meisten lokalen Messdaten. Einzelne Werte zeigen jedoch noch Nachbesserungs- bzw. Weiterentwicklungsbedarf.

Im Rahmen der Analysen zum Test INKA EASY-4 wurde die neue Kopplungsstrategie von Kühlkreislaufkomponenten, simuliert mit ATHLET, und Containmentbereichen, simuliert mit COCOSYS, getestet. Der Ansatz beinhaltet die Möglichkeit, die Wärmeübergangsmodelle von COCOSYS an der Außenseite von Strukturen, die von ATHLET simuliert werden, mit Randbedingungen aus ATHLET zu koppeln, wodurch eine wesentlich engere und konsistente Simulation möglich ist. Dementsprechend durchgeführte erste Analysen zeigen die prinzipielle Anwendbarkeit auf und bilden die Basis für eine weitere Entwicklung. Allerdings sind noch gezielt Modellverbesserungen einzupflegen, die insbesondere die Vollständigkeit der Wärmeübergangsmodelle (Sieden und Kondensation) auf der COCOSYS-Seite betreffen. Auch die numerische Stabilität hinsichtlich Laufzeitverhalten bedarf noch weiterer Analysen und Entwicklungen.

7.3 Qualifizierung von AC²/COCOSYS anhand beispielhafter Analysen von Stör- oder Unfallabläufen für DWR

Mit dem Wärmeübergangsmodell CO1 in COCOSYS steht ein konsistentes und aus Ingenieurwissenschaften abgeleitetes Modell für den Wärmetransport von Strukturen an die umgebende Atmosphäre oder Wasser zur Verfügung. Für den korrekten Einsatz sind vom Anwender Eingaben, wie z. B. die charakteristische Länge, zu definieren, die im Allgemeinen gut aus der Spezifikation klein- und mittelskaliger Experimente herausgearbeitet werden können. Für reale Anlagensimulationen jedoch können diese Werte nicht unmittelbar aus Konstruktionszeichnungen abgeleitet werden oder sind schlechthin nicht verfügbar. Je nach Strömungsbild, das zudem örtlich und zeitlich veränderlich sein kann, unterliegen die Werte einem gewissen Interpretationsspielraum. Zur Klärung dieser Fragestellung sind eingehende Analysen sowohl für ein generisches KONVOI-Containment als auch für einen Versuch der THAI-Anlage durchgeführt worden.

Bei der Simulation der THAI-Anlage zeigt sich ein deutlich geringerer Einfluss als ursprünglich erwartet, obwohl der Unterschied zwischen der Strukturbhöhe und der Konvektionsschleifenlänge in diesem Fall mit einem Faktor von über 30 deutlich größer ist als in dem SHB eines KONVOI, andererseits wird die THAI-Anlage auch über den Heißmantel beheizt, wodurch die Mechanismen des thermischen Energietransfers andere sind als unter Störfallbedingungen in einem SHB. Als Ergebnis sind entsprechende Anmerkungen und Hinweise in das COCOSYS-Anwender-Handbuch aufgenommen worden, die eine Hilfestellung bezüglich der Wahl der charakteristischen Länge geben.

7.4 Querschnittsaktivitäten

Mitarbeit in nationalen und internationalen Arbeitsgruppen

Ein erheblicher Nutzen für die Unterstützung der Arbeiten zu COCOSYS wird aus dem intensiven Informations- und Erfahrungsaustausch im Rahmen nationaler und internationaler Kooperationen und aus weiteren Aktivitäten gezogen. Dazu zählen insbesondere Aktivitäten der OECD/NEA wie bspw. THEMIS, BIP und STEM sowie PRISME.

Regressionstesten für COCOSYS

Die Arbeiten zum Regressionstesten und zur Validierungsmatrix sind eng verknüpft. Üblicherweise stellen die Experimente für das Regressionstesten einen Teilbereich der

gesamten Validierungsmatrix dar. Das Regressionstesten wird weitestgehend automatisiert mit Fortgang der Entwicklung wiederholt durchlaufen, die Ergebnisse zweier aufeinanderfolgender Codeversionen werden miteinander und mit den experimentellen Daten verglichen, um schon während der Entwicklungsphase Inkonsistenzen und mögliche unbeabsichtigte Wechselwirkungen der Modelle zu identifizieren und frühzeitig die Qualität der Modellentwicklung zu bewerten. Die Einbindung von Datensätzen mit NewAFP schreitet voran und zeigt den guten Entwicklungsstand auf. Komplexe Experimente mit einer Vielzahl von wechselwirkenden chemischen/physikalischen Reaktionen zeigen aber noch Sensitivität auf und bedürfen weiterer Analysen. Die Ergebnisse werden zu jeder Freigabe einer neuen AC²-Version in einem separaten Bericht dokumentiert.

Anwenderunterstützung & Qualitätssicherung COCOSYS

Das Gesamtpaket einer qualifizierten Programmentwicklung und -validierung beinhaltet auch die Dokumentation und Anwenderunterstützung. Zum Dokumentationspaket gehören die COCOSYS-Kurzbeschreibung, das User Manual, das Handbuch zur Modellbeschreibung sowie die Dokumentation zum Regressionstesten. Die entsprechenden Dokumente werden kontinuierlich aktualisiert und vervollständigt und im Zuge der Veröffentlichungen neuer AC²-Versionen bereitgestellt.

Zur fachlichen Qualitätssicherung von Arbeitsergebnissen hat das Managementsystem der GRS eine neue, übergeordnete Richtlinie für die Entwicklung, Verifizierung und Validierung von Computerprogrammen in der GRS erstellt. Details der Umsetzung dieser Richtlinie sind im QS-Plan des jeweiligen Softwareentwicklungsprojektes festgelegt. An ihr orientieren sich die jeweiligen Arbeiten im Rahmen der Entwicklung und Validierung. Das dazu erstellte Qualitätshandbuch vervollständigt die codebegleitende Dokumentation.

7.5 Abschließendes Fazit

Die im Rahmen des Forschungsvorhabens durchgeführten Validierungs- und Anwendungsrechnungen mit COCOSYS haben einen signifikanten Beitrag zur weiteren Qualifizierung geleistet. Es zeigt sich, dass mit COCOSYS ein international als führend angesehenes Werkzeug für die Simulation von Stör- und Unfällen im Sicherheitseinschluss zur Verfügung steht. Dies betrifft insbesondere auch die Modellierung des Spalt- und Aerosolverhaltens und hier speziell der Iodchemie. Letztere stellt im internationalen Vergleich ein Alleinstellungsmerkmal von COCOSYS dar. Hier ist die Entwicklung von

NewAFP so weit fortgeschritten, dass die Validierung einzelner Modelle an entsprechenden Experimenten fortgeführt werden konnte. Aufgrund der Komplexität der Vielzahl wechselwirkender Reaktionen sind weitere Arbeiten zur Feinabstimmung z. B. der Reaktionskonstanten anhand verfügbarer Experimente notwendig. Ebenso ist die Validierung neuer oder verbesserter Ansätze zur Modellierung thermohydraulischer Phänomene fortgeführt worden, sie entspricht dem aktuellen Stand der Technik und wurde z. B. bei der Beteiligung an Benchmark-Aktivitäten unter Beweis gestellt. Spezielle Modelle für Sicherheitssysteme wie PAR und Sprühsysteme wurden an anspruchsvollen Experimenten getestet und validiert.

Die Anwendungsrechnungen mit CoPool, allein oder gekoppelt mit COCOSYS, zeigten deutlich die Grenzen des Programms auf. Insbesondere ist nach dem Auslaufen der Entwicklung bei ITWM keine Anlaufstelle für Entwicklungsfragen mehr verfügbar. Auch zeigte sich die Komplexität und Fehleranfälligkeit bei der Erstellung von Datensätzen. Hier ist seit einiger Zeit mit der Möglichkeit, vollständig gefüllte Zonen mit dem Modell ATM_FULL direkt in COCOSYS zu realisieren, eine perspektivisch bessere Alternative verfügbar. Die Schwächen von CoPool, weder Spaltprodukte in der Modellierung berücksichtigen zu können noch lokale Siedephänomene durch entsprechende Modelle zu simulieren, wird durch Weiterentwicklungen am Modell ATM_FULL als bessere Strategie zukünftig weiterverfolgt, so dass die Entwicklungs- und nachfolgenden Validierungsarbeiten zielgerichtet in COCOSYS projektiert werden. Dadurch wird nicht nur die Modellbasis konsequent und nachhaltig in COCOSYS als Bestandteil von AC² verbessert, sondern letztendlich auch eine anwenderfreundlichere Alternative zu CoPool geschaffen.

In nachfolgenden Vorhaben sollen die Aktivitäten gezielt fortgesetzt werden. Neben der fortgesetzten Validierung bzw. Qualifizierung neu entwickelter oder verbesserter Modelle in COCOSYS betrifft dies zunehmend auch die Bewertung der Modellbasis bei Anwendungen auf innovative Systeme einschließlich neuer fortschrittlicher Reaktorkonzepte. Der gezielten Anwendung von COCOSYS im Rahmen gekoppelter Rechnungen mit AC² für generische Anlagenrechnungen muss dabei zukünftig hohe Priorität zukommen, da hier die größten Herausforderungen an Codestabilität, Aussagefähigkeit und Konsistenz der Ergebnisse liegen. Dazu ist die Qualifizierung des Gesamtsystems AC² voranzutreiben. Weiterhin trägt die Mitarbeit in nationalen und internationalen versuchsbegleitenden Arbeitsgruppen insbesondere der OECD/NEA zur Qualifizierung bei. Dadurch leistet die GRS einen substanziellen Beitrag zur Gestaltung der Reaktorsicherheitsforschung, national wie international, und zur Aufnahme aktueller Fragestellungen für die Codeentwicklung und Validierung aller Programme in AC² und zum Kompetenzerhalt.

Literaturverzeichnis

- /AGE 17/ Agethen, K.: Erweiterung der Systemcodes ASTEC und COCOSYS zur Analyse der Spaltproduktfreisetzung während Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum (RUB): Bochum, 2017.
- /AHN 15/ Ahn, J.: Reflections on the Fukushima Daiichi Nuclear Accident, Toward Social-Scientific Literacy and Engineering Resilience. 1456 S., ISBN 978-3-319-12090-4, Springer International Publishing AG: Cham, 2015.
- /ALL 17/ Allelein, H.-J., Beck, S., Klauck, M., Gehr, R.: Weiterentwicklung und Anwendung von Severe Accident Codes - Bewertung und Optimierung von Störfallmaßnahmen (WASA-BOSS) : Analyse von Containment-Phänomenen zur Optimierung von Störfallmaßnahmen : fachlicher Schlussbericht zum Teilprojekt A. RWTH Aachen, 02NUK028A, 01140645, DOI 10.2314/GBV:1012148149: Aachen, 2017-11.
- /ARE 15/ AREVA GmbH: Versuchsmatrizen sowie Anfangs- und Randbedingungen EASY Verbundvorhaben, Komponentenqualifizierung. Karlstein, 2015-06.
- /ARN 19/ Arndt, S., Band, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G., Brückner, N.: COCOSYS 3.0.1 User Manual. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 1, Rev. 54, 2019-06.
- /ARN 20/ Arndt, S., Klein-Heßling, W.: Application of the improved coupled COCOSYS – CoPool version to RBMK-1000, Bericht zum Vorhaben 4717R01520, AP 11. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS - V - 4717R01520 - 11/2020, 2020.
- /ARN 21a/ Arndt, S., Band, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Weber, G.: COCOSYS 3.1 User Manual. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 1, 2021.

- /ARN 21b/ Arndt, S., Reinke, N.: COCOSYS post-test calculations for WAFT experiments. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-Bericht, RS 1579-1/2021, 2021.
- /ARN 21c/ Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H., Reinke, N.: Regression testing for COCOSYS 3.1. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 3, 2021-11.
- /ARN 22/ Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H., Spengler, C., Reinke, N.: COCOSYS Regression Testing, Regression Testing of Version 3.1.1 vs. Version 3.1. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-3 / Vol. 4: Köln, 2022-11.
- /BAK 14/ Bakalov, I., Arndt, S., Wolff, H.: First GEKO model application for the thermal-hydraulic response of a generic WWER-1200 containment to LOCA, Technical Note GRS-V-3611I01512-1/2013. Gesellschaft für Reaktorsicherheit mbH (GRS): Berlin, 2014-04.
- /BAK 18a/ Bakalov, I., Sonnenkalb, M., Schwarz, S.: Generische Untersuchungen zu den Zuständen im Ringraum eines DWR KONVOI unter unfallbedingt erhöhten Leckagen aus dem Sicherheitsbehälter und Ableitung von potentiellen Notfallmaßnahmen zur Schadensbegrenzung. GRS-Bericht, Bd. 491, GRS-491, 147 S., ISBN 978-3-946607-76-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2018-03.
- /BAK 18b/ Bakalov, I., Spengler, C., Foit, J.: Interpretation of the VULCANO VBES-U5 test applying the MCCI Model in COCOSYS. In: Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives (CEA) (Hrsg.): SAFEST Final Seminar on Severe Accident Experimental Research. Cadarache Castle, France, 01.01.2018 00:00:00, 2018.
- /BAK 20a/ Bakalov, I.: Interpretation of Test PANDA ST3_2 with COCOSYS, Technical Note. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-Bericht, GRS-V-RS1579-BAK- 3/2020, 2020.

- /BAK 20b/ Bakalov, I.: Nachrechnungen ausgewählter INKA-Experimente mit dem GEKO-Modul in COCOSYS, Technical Note. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Köln, 2020.
- /BAK 20c/ Bakalov, I.: Nachrechnungen ausgewählter INKA-Experimente mit dem GEKO-Modul in COCOSYS, Technische Notiz GRS-V-BAK-3/2020. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2020-12.
- /BAK 20d/ Bakalov, I., Spengler, C.: Interpretation of SSM test series by the CCI module in COCOSYS, Technical Note, Bericht zum Vorhaben RS1579. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS): Köln, 2020.
- /BAN 12/ Band, S., Schwarz, S., Sonnenkalb, M.: Nachweis der Wirksamkeit von H₂-Rekombinatoren auf der Basis ergänzender analytischer Untersuchungen mit COCOSYS für die Referenzanlage GKN-2, Bericht zum Vorhaben: "Anforderungen an den Nachweis der Wirksamkeit von H₂-Rekombinatoren auf der Basis ergänzender analytischer Untersuchungen". GRS-A-Bericht, GRS-A-3652, 183 S.: Köln, März 2012.
- /BAN 18/ Band, S., Richter, C., Sogalla, M., Sonnenkalb, M.: Unfallablauf- und Quelltermanalysen zu den Ereignissen in Fukushima im Rahmen des OECD/NEA BSAF-Projektes Phase II. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, GRS-485, ISBN 978-3-946607-69-4: Köln, 2018.
- /BEC 18/ Beck, S.: Simulation Druckaufbau für einen I-150 mit COCOSYS, Interne Mitteilung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 2018.
- /BEN 69/ Benatt, F. G.: Gaseous entrainment into axisymmetric liquid sprays. Journal of the Institute of Fuel, S. 309–315, 1969.

- /BOU 18/ Bouyer, V., Denoix, A., Journeau, C., Molina, D., Piluso, P., Haquet, J. F., Foit, J. J., Fluhrer, B., Miassoedov, A.: Molten Core Concrete Interaction Test in VULCANO Facility Preventing Initial Interfacial Crusts. In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 01.01.2018 00:00:00, 2018.
- /BRO 11/ Broxtermann, P., Cron, D. von der, Allelein, H.-J.: Capabilities of a Mechanistic Model for Containment Condenser Simulation. In: Kerntechnische Gesellschaft e.V. (KTG): Jahrestagung Kerntechnik 2011. Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 01.01.2011 00:00:00, 2011.
- /BRO 13/ Broxtermann, P.: Simulation passiver Kühlsysteme des Sicherheitsbehälters. Aachen, Techn. Hochsch., Diss., 2013, 2013.
- /BRY 17/ Bryk, R., Schmidt, H., Mull, T., Wagner, T., Ganzmann, I., Herbst, O.: Modeling of Kerena Emergency Condenser. Archives of Thermodynamics, Bd. 38, DOI 10.1515/aoter-2017-0023, 2017.
- /BUC 18a/ Buchholz, S., Wielenberg, A., Schaffrath, A.: EASY - Evidence of Design Basis Accidents Mitigation Solely with Passive Safety Systems. In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 01.01.2018 00:00:00, S. 977, 2018.
- /BUC 18b/ Buchholz, S., Mull, T., Wagner, T., Hristov, H. V., Gehr, R., Kaczmarkiewicz, N., Bonfigli, G., Sporn, M., Schuster, C., Schäfer, F., Schleicher, E.: EASY Integrale experimentelle und analytische Nachweise der Beherrschbarkeit von Auslegungsstörfällen allein mit passiven Systemen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, GRS-527: Köln, 2018-08.

- /CRA 07/ Cranga, M.: Molten Core Concrete Interaction: validation status of MEDICIS module of ASTEC V1.3. (ASTEC-V1/VAL/07-08). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH und Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), 2007.
- /DU 20/ Du, K., Hu, P., Hu, Z.: Numerical Investigation of Water Film Evaporation with the Countercurrent Air in the Asymmetric Heating Rectangular Channel for Passive Containment Cooling System. Science and Technology of Nuclear Installations, Bd. 2020, S. 1–17, DOI 10.1155/2020/5924325, 2020.
- /EBE 22/ Ebertz, M., Wolff, H., Arndt, S.: Review of documents on the PASI test facility, creation of a COCOSYS in-put deck and results of post-test calculations. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Technical Note GRS-V-4720I01512-6/2022, 2022-11.
- /ERK 09/ Erkan, N., Mignot, G., Kapulla, R., Paladino, D., Zboray, R., Fehlmann, M.: PANDA Test ST3_2, Quick-Look Report, OECD/SETH-2, Report No. TM-42-09-22-0. Paul Scherrer Institute (PSI), 2009-10.
- /FAR 10a/ Farmer, M. T., Aeschlimann, R. W., Kilsdonk, D., Lomperski, S.: Category 2: Water-Cooled Basemat (WCB-1) Test Investigating Core Melt Stabilization Using a Water-Cooled Surface, MCCI Seminar 2010. In: OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): MCCI - Seminar. CEA, Cadarache, France, 01.01.2010 00:00:00, 2010.
- /FAR 10b/ Farmer, M. T., Lomperski, S., Kilsdonk, D. J., Aeschlimann, R. W.: OECD MCCI-2 Project, Final Report. Hrsg.: Argonne National Laboratory (ANL), OECD/MCCI-2010-TR07, 2010.
- /FET 98/ Fethke, M.: Experimentelle und analytische Untersuchungen der Effektivität des Gebäudekondensators im SWR 1000. JÜL-3617, 1998.
- /FIS 98/ Fischer, K.: Modellierung von Abscheidungsvorgängen in Wasservorlagen: Abschlussbericht. Battelle Ingenieurtechnik GmbH, BF-R68.411-1, 1998.

- /FIS 15/ Fischer, M.: Core melt stabilization concepts for existing and future LWRs and associated R&D needs. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. NURETH-16, Chicago, IL, USA, 01.01.2015 00:00:00, ISBN 9781510811843, 2015.
- /FOI 14/ Foit, J. J.: MCCI of a metal and oxide melt with reinforced siliceous concrete in MOCKA experiments. In: ASME (Hrsg.): 22th International Conference on Nuclear Engineering. Prague, 2014.
- /FOR 22/ Forell, B.: Simulation of the Heater Bay Fire Event with the CFD Code Fire Dynamics Simulator (FDS) and Comparison with COCOSYS Simulations, Common OECD/NEA FIRE and PRISME Cable Fire Benchmark Exercise – Step 3. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-Bericht, 4720R01550 - 1/2022, 2022-04.
- /FRA 21a/ Fraunhofer ITWM: CoPool - Mehrdimensionales Containment Pool-Model. Erreichbar unter <https://www.itwm.fraunhofer.de/de/abteilungen/sms/komplexe-fluide-und-mehrphasenstroemung/copool.html>, abgerufen am 19. April 2021.
- /FRA 21b/ Fraunhofer ITWM: Strömungs- und Materialsimulation. Erreichbar unter <https://www.itwm.fraunhofer.de/de/abteilungen/sms.html>, abgerufen am 19. April 2021.
- /FRA 21c/ Fraunhofer ITWM: Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM. Erreichbar unter <https://www.itwm.fraunhofer.de/>, abgerufen am 19. April 2021.
- /FRE 16/ Freitag, M., Schmidt, E., Gupta, S., Colombet, M., Kühnel, A., Laufenberg, B. von: Commissioning test of the Two Vessel Configuration, Test TH-27. Becker Technologies GmbH, 1501455-FB/TR-TH27, 2016-03.
- /FRE 19/ Freitag, M., Gupta, S., Beck, S., Sonnenkalb, M.: Experimental and Analytical Investigations of Aerosol Processes—Wash-Out and Wash-Down. Nuclear Science and Engineering, Bd. 193, Nr. 1-2, S. 198–210, DOI 10.1080/00295639.2018.1479091, 2019.

- /FRE 21a/ Freitag, M., Schmidt, E., Nowack, H.: Specification Report for Blind Simulation of HR-57, "PAR performance behaviour in H₂-CO containing atmosphere". Becker Technologies GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 150 1613 - SR - HR-57, 2021.
- /FRE 21b/ Freitag, M., Schmidt, E., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A.: PAR performance behaviour in H₂-CO containing LWR- or HWR-atmosphere, Test series HR-54 - HR-58, Quick Look Report. Becker Technologies GmbH, 1501613 - QLR - RH54-58, 2021.
- /FRE 22/ Freitag, M., Schmidt, E., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A.: PAR performance behaviour in H₂-CO containing LWR- or HWR-atmosphere, Test series HR-54 - HR-58, Quick Look Report. Becker Technologies GmbH, 1501613 - QLR - RH54-58, 2022.
- /FRE 23/ Freitag, M., Schmidt, E., Laufenberg, B. von, Langrock, G., Funke, F.: THAI experiments on iodine behavior in a room chain representing flow conditions in large containments. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 184, S. 109670, DOI 10.1016/j.anucene.2022.109670, 2023.
- /FUN 16/ Funke, F., Gupta, S., Weber, G., Langrock, G., Kühnel, A., Schmidt, E., Freitag, M., Laufenberg, B. von: Iodine Washout from Containment Atmosphere by Spray, Test ID: Iod-31. AREVA GmbH (AREVA), Becker Technologies GmbH, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 1501455-TH-Iod-31, 2016.
- /GRS 90/ Gesellschaft für Reaktorsicherheit: Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke: Phase B, Eine Untersuchung im Auftrag des Bundesministers für Forschung und Technologie. 825 S., ISBN 3-88585-809-6, Verl. TÜV Rheinland: Köln, 1990.
- /GUP 16/ Gupta, S., Laufenberg, B. von, Freitag, M., Colombet, M., Schmidt, E., Poss, G., Langrock, G., Funke, F.: INSTRUMENTATION FOR LWR CONTAINMENT EXPERIMENTS UNDER ACCIDENT CONDITIONS. In: NINE Nuclear and Industrial Engineering (Hrsg.): SWINTH-2016, Specialist Workshop on Advanced Instrumentation and Measurement Techniques for Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. 2016.

- /GUP 17/ Gupta, S., Freitag, M., Schmidt, E., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A., Langer, G.: Ein- und Mehrraumversuche zum Spaltprodukt- und Wasserstoff-Verhalten im Sicherheitsbehälter – THAI-V. Becker Technologies GmbH, 1501455-FR, 142 S.: Frankfurt, 2017-04.
- /GUP 19/ Gupta, S., Poss, G., Freitag, M., Schmidt, E. W., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A., Langer, G., Funke, F., Langrock, G.: Experimentelle Untersuchungen zur Spaltproduktrückhaltung und Wasserstoffbeherrschung bei Stör- und Unfallabläufen im Sicherheitsbehälter – THAI-VI, Experimental Investigations on Fission-Product Retention and Hydrogen Mitigation for Design-Basis and Severe Accidents in the Containment – THAI-VI. Hrsg.: Becker Technologies GmbH, 1501547-FR, 2019.
- /GUP 20/ Gupta, S., Poss, G., Freitag, M., Schmidt, E., Colombet, M., Laufenberg, B. von, Kühnel, A., Langer, G., Funke, F., Langrock, G.: Fission product behaviour, hydrogen mitigation, and hydrogen combustion in water cooled reactors under severe accident conditions, OECD/NEA THAI-3 Project, Reactor Safety Research Project 1501516. Eschborn, 2020-03.
- /HAA 20/ Haag, M.: Experimentelle Untersuchungen und analytische Modellierung von adiabaten Siedevorgängen in Naturumlaufsystemen. Dissertation, Université du Luxembourg, 2020.
- /HIC 00/ Hicken, E., Verfondern, K. (Hrsg.): Investigation of the effectiveness of innovative passive safety systems for boiling water reactors. Forschungszentrum Jülich, Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik, Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Energietechnik, Bd. 11, 287 S., ISBN 3-89336-263-0, Forschungszentrum Zentralbibliothek: Jülich, 2000.
- /HUA 15/ Huang, X., Cheng, X., Klein-Heßling, W.: Evaluation of Passive Containment Cooling with an Advanced Water Film Model In a Lumped-Parameter Code. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. NURETH-16, Chicago, IL, USA, 01.01.2015 00:00:00, ISBN 9781510811843, 2015.

- /IAEA 09/ IAEA: Passive Safety Systems and Natural, Circulation in Water Cooled Nuclear Power Plants. Hrsg.: International Atomic Energy Agency (IAEA), TECDOC-, Nr. 1624: Vienna, Austria, 2009.
- /IAEA 20/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Advances in Small Modular Reactor Technology Developments, A Supplement to: IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS), 2020 Edition. ARIS Status Reports, 354 S., 2020-09.
- /ILI 12/ Iliev, O., Steiner, K., Zemitis, A., Gornak, T.: CoPool: Mehrdimensionales Containment Pool-Modell Entwicklung eines COCOSYS-Moduls zur orts-aufgelösten Simulation großer Wasservorlagen, Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung - Vorhaben - Nr.: 1501369. Fraunhofer ITWM, 2012.
- /ILI 20/ Iliev, O., Steiner, K., Zemitis, A.: Genauigkeits- und Effizienzsteigerung bei gekoppelten Berechnungen des Containment-Pool-Modells CoPool mit COCOSYS : Abschlussbericht. Genauigkeits- und Effizienzsteigerung bei gekoppelten Berechnungen des Containment-Pool-Modells CoPool mit COCOSYS, DOI 10.2314/KXP:1696063310, 2020.
- /ILI 22a/ Iliev, D., Band, S.: Blind and open COCOSYS simulations of the PAR Benchmark THAI HR-57, Technical Note, For internal use only. GRS gGmbH, 9. November 2022.
- /ILI 22b/ Iliev, D.: Blind COCOSYS simulation of the PAR Benchmark THAI HR-57. GRS gGmbH, Technical Note: Köln, 2022.
- /ILI 22c/ Iliev, D., Band, S.: Blind and open COCOSYS simulation results of the THAI HR-57 benchmark. Präsentation, 4rd Meeting of the Programme Review Group (PGR) and Management Board (MB) of the OECD/NEA THEMIS Project, 7. November 2022.
- /ILI 22d/ Iliev, D.: Model and results of the blind COCOSYS calculation of the THAI HR-57 experiment. Präsentation, 3rd Meeting of the Programme Review Group (PGR) and Management Board (MB) of the OECD/NEA THEMIS Project: Remote Zoom meeting hosted by NEA, 15. März 2022.

- /IRSN 04/ Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN): Safety assessment of the EPR project, Principles of computerized operation, design of core catcher, heterogeneous boron dilution, design of safety injection system, internal and external hazards. EPR Report n° 88, Volume 2 : Appendix B: Detailed analysis of the EPR core melt retention, 2004-10.
- /KAN 93/ Kanzleiter, T.: VANAM-Mehrraum-Aerosolabbau-Versuch M3 mit löslichem Aerosolmaterial. 212 S., 1993-07.
- /KLE 16/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Bakalov, I., Beck, S., Krönung, D., Nowack, H., Reinke, N., Schwarz, S., Spengler, C., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Durchführung von Anwendungsrechnungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, GRS-407, ISBN 978-3-944161-89-1: Köln, 2016.
- /KLE 17/ Klein-Heßling, W., Sonnenkalb, M., Zemitis, A., Iliev, O., Steiner, K.: Application of a coupled CFD/LP code approach for containment simulations of a konvoi type PWR plant. In: ANS (Hrsg.): NURETH-17, 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. Xi'an, China, 2017.
- /KLE 19/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Weber, G.: COCOSYS Reference Manual, THY Main Models, Extract of COCOSYS V1.2 Programme Reference Manual. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS – P – 3/2, 2019-04.
- /KLE 21a/ Klein-Heßling, W.: Improvement of Cable Fire Simulations with COCOSYS and Blind Simulation of the PRS3-CFP-D1 Fire Test. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-Bericht, GRS-V-RS 1579 – 2/2021: Köln, 2021-08.
- /KLE 21b/ Klein-Heßling, W.: Open Simulation of the PRF-BCM-S2 Fire Test with COCOSYS. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-RS 1579 – 1/2021, 2021-02.

- /KLE 21c/ Klein-Heßling, W.: Simulation of the Heater Bay Fire Event with COCOSYS. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-V-RS 1579 – 3/2021, 2021-09.
- /KÓS 07a/ Kóska, P.: Development and Assessment of Fission Product Release Model for MEDICIS (ASTEC). Hrsg.: Institute for Electric Power Research Co. (VEIKI), VEIKI Institute for Electric Power Research Co., VEIKI 21.51-726, 31 S.: Budapest, 2007-12.
- /KÓS 07b/ Kósa, P., Lajtha, G., Téchy, Z., Holló E: Development and Assessment of fissionproduct release model for medicis (ASTEC). Institute for Electric Power Research Co. (VEIKI), Technical Report. (VEIKI 21.51-726), 2007-12.
- /KOU 21/ Kouhia, V., Riikonen, V., Kauppinen, O.-P., Telkkä, J., Hyvärinen, J.: PASI – A test facility for research on passive heat removal. Nuclear Engineering and Design, Bd. 383, DOI 10.1016/j.nucengdes.2021.111417, 2021.
- /LEY 12/ Leyer, S., Wich, M.: The Integral Test Facility Karlstein. Science and Technology of Nuclear Installations, Bd. 2012, Nr. 4, S. 1–12, DOI 10.1155/2012/439374, 2012.
- /LIN 21/ Lindsay, A., Stogner, R. H., Gaston, D., Schwen, D., Matthews, C., Jiang, W., Aagesen, L. K., Carlsen, R., Kong, F., Slaughter, A., Permann, C. J., Martineau, R.: Automatic Differentiation in MetaPhysicL and Its Applications in MOOSE. Nuclear Technology, Bd. 207, Nr. 7, S. 905–922, DOI 10.1080/00295450.2020.1838877, 2021.
- /MAC 91/ MacGregor, S. A.: Air entrainment in spray jets. International Journal of Heat and Fluid Flow, Bd. 12, Nr. 3, S. 279–283, DOI 10.1016/0142-727X(91)90064-3, 1991.
- /MCG 12/ McGrattan, K., Lock, A., Marsh, N., Nyden, M., Bareham, S., Price, M.: Cable Heat Release, Ignition, and Spread in Tray Installations during Fire (CHRISTIFIRE) Phase 1: Horizontal Trays. Hrsg.: US NRC, National Institute of Standards and Technology (NIST), NUREG/CR-, 7010 Volume 1, 2012-07.

- /MCQ 75/ McQuaid, J.: Air Entrainment into Bounded Axisymmetric Sprays. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Bd. 189, Nr. 1, S. 197–202, DOI 10.1243/PIME_PROC_1975_189_026_02, 1975.
- /NIE 05/ Nie, M.: Temporary melt retention in the reactor pit of the European pressurized water reactor (EPR). DOI 10.18419/opus-1655, Universität Stuttgart, 2005.
- /NUS 20/ NuScale Power, L.L.C. (NuScale): Status Report – NuScale SMR (NuScale Power, LLC), Status Report. Hrsg.: International Atomic Energy Agency (IAEA): United States, erreichbar unter https://aris.iaea.org/PDF/NuScale-NPM200_2020.pdf, abgerufen am 22. Dezember 2020.
- /OECD 12/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): OECD/SETH-2 Project PANDA and MISTRA Experiments Final Summary Report, Investigation of Key Issues for the Simulation of Thermal-hydraulic Conditions in Water Reactor Containment. NEA/CSNI/R(2012)5, 2012-04.
- /OWC 91/ Owczarski, P. C., Burk, K. W.: SPARC-90: A code for calculating fission product capture in suppression pools. DOI 10.2172/6120360, 1991.
- /PIO 04/ Pioro, I. L., Rohsenow, W. M., Doerffer, S. S.: Nucleate pool-boiling heat transfer., II: assessment of prediction methods. International Journal of Heat and Mass Transfer, Bd. 47, Nr. 23, S. 5045–5057, 2004.
- /PLU 21/ Plumecocq, W.: Common OECD/NEA FIRE and PRISME Cable Benchmark Exercise, Specification of Step 3. Hrsg.: Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), No. PRISME-3 n°22, 2021-01.
- /POS 18/ Poss, G., et al.: Experimentelle Untersuchungen zum Spaltproduktverhalten und der Wasserstoffbeherrschung bei Stör- und Unfallabläufen im Sicherheitsbehälter - THAI VI. Hrsg.: Becker Technologies GmbH, 2018.
- /PRÉ 20/ Prétel, H.: PRISME 3 and FIRE common benchmark exercise – Step#2_2, Analysis report. Hrsg.: Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PRISME-3 n°40, 2020-11.

- /REI 19a/ Reinke, N., Arndt, S., Bakalov, I., Beck, S., Buchholz, S., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Iliev, D., Nowack, H., Spengler, C., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Validierung & Verifikation der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, Bd. 551, 436 S., ISBN 978-3-947685-36-3: Köln, 2019.
- /REI 19b/ Reinke, N., Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Beck, S., Nowack, H., Iliev, D., Spengler, C., Klein-Heßling, W., Sonnenkalb, M.: Validation and Application of the AC² Code COCOSYS. Kerntechnik, Bd. 84, Nr. 5, S. 414–424, DOI 10.3139/124.190066, 2019.
- /RIS 15/ Risiken, T.: Modellierung des sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitrisses zur Analyse seines Einflusses auf die Gasverteilung in Sicherheitsbehältern von Kernkraftwerken mit dem Code COCOSYS. Dissertation, Lehrstuhl Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-Universität Bochum (LEE); Ruhr-Universität Bochum, Ruhr-Universität Bochum (RUB): Bochum, 2015.
- /SCH 17/ Schramm, B. A., Stewering, J., Sonnenkalb, M.: Einsatz von CFD-Codes für die Simulation von unfalltypischen Phänomenen im Sicherheitseinschluss Validierung und gezielte Modellerweiterung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-Bericht, Bd. 472, GRS-472, 566 S., ISBN 978-3-946607-55-7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, 2017.
- /SCH 23/ Schmidt, E., Reinke, N., Freitag, M., Sonnenkalb, M.: Analyses of Critical Hydrogen Enrichment in PWR Containment Compartments. Nuclear Science and Engineering, S. 1–13, DOI 10.1080/00295639.2022.2146994, 2023.
- /SON 20/ Sonnenkalb, M., Pellegrini, M., Herranz, L. E., Lind, T., Morreale, A. C., Kanda, K., Tamaki, H., Kim, S. I., Cousin, F., Fernandez Moguel, L., Andrews, N., Sevon, T.: Overview and outcomes of the OECD/NEA benchmark study of the accident at the Fukushima Daiichi NPS (BSAF), phase 2 – Results of severe accident analyses for unit 2. Nuclear Engineering and Design, Bd. 369, S. 110840, DOI 10.1016/j.nucengdes.2020.110840, 2020.

- /SPE 01/ Spengler, C.: LAVA 2000, A computer code for the simulation of melt spreading in the containment; [program description]. GRS-A-Bericht, GRS-A-2968, 1. Aufl., XII, 85 S, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2001.
- /SPE 11/ Spengler, C.: Adaption of a Fission Product Release Model for MEDICIS. GRS-VRS 1185 - 4/2011. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2011-11.
- /SPE 12a/ Spengler, C.: Validation of the MCCI-Module COCOSYS-MEDICIS (Draft), GRSV-RS 1190-1/2012. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 2012.
- /SPE 12b/ Spengler, C., Arndt, J., Arndt, S., Bakalov, I., Band, S., Eckel, J., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Pelzer, M., Reinke, N., Sievers, J., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-3654: Köln, 2012.
- /SPE 18/ Spengler, C., Bakalov, I., Reinke, N., Sonnenkalb, M.: Uncertainty and Sensitivity Analyses in Support of Model Development and Validation of the Containment Module COCOSYS of the AC² Code – Application for Molten Corium/Concrete Interaction (MCCI). In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 01.01.2018 00:00:00, 2018.
- /SPE 20/ Spengler, C.: Generalized interpretation of MCCI experiments with the AC2/COCOSYS code and Application to Core catcher Simulation. In: KernD, KTG, INFORUM (Hrsg.): Kerntechnik 2020. Berlin, 2020.
- /SPE 21/ Spengler, C., Arndt, S., Beck, S., Eschricht, D., Iliev, D., Nowack, H.: Modellentwicklung zu Vorgängen im Containment für das GRS-Codesystem AC² (ATHLET / CD / COCOSYS). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-Bericht, GRS-629, ISBN 978-3-949088-17-9, 2021.

- /SPE 22/ Spengler, C., Bakalov, I.: A simplified core catcher model for the containment code AC²/COCOSYS. In: Gabrielli, F., Herranz, L. E., Paci, S. (Hrsg.): Proceedings of the 10th European Review Meeting on Severe Accidents Research (ERMSAR2022), Severe Accident Research Eleven Years after the Fukushima Accident. ERMSAR, Karlsruhe, S. 1707–1720, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2022.
- /SUT 11/ Sutharshan, B., Mutyala, M., Vijuk, R. P., Mishra, A.: The AP1000TM Reactor: Passive Safety and Modular Design. Energy Procedia, Bd. 7, S. 293–302, DOI 10.1016/j.egypro.2011.06.038, 2011.
- /THO 97/ Thompson, D. H., Farmer, M. T., Fink, J. K., Armstrong, D. R., Spencer, B. W.: Compilation, Analysis, and Interpretation of ACE Phase C and MACE Experimental Data: Volume I - MCCI Thermalhydraulics Results, ACEX TR-C-14. Argonne National Laboratory, 1997-11.
- /WAG 17/ Wagner, T., Herbst, V., Mull, T.: Instrumentation Report on the INKA test facility for the EASY experiments, Report: D02-ARV-01-110-199. AREVA GmbH: Karlstein, 2017-04.
- /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, S. 110211, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110211, 2019.
- /WOL 22/ Wolff, H., Reinke, N., Spengler, C.: COCOSYS 3.1 Short Description. GRS GmbH, 43 S., 2022.
- /ZAV 13/ Zavaleta, P.: PRISME-2 Cable Fire Spreading Support Tests, Analysis Report. Hrsg.: Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), Report PSN-RES/SA2I-2013-074, 2013-06.
- /ZAV 15/ Zavaleta, P.: PRISME-2 CFS – phase 2 Analysis report of the CFS-1 to CFS-4 fire tests, Analysis Report. Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), Report PSN-RES/SA2I/2015-028, 2015-07.

/ZEM 19/ Zemitis, A., Iliev, O., Steiner, K.: CoPool - User's Manual, Code revision 1218. Fraunhofer ITWM, February / 2019.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Struktur des Programmsystems AC ²	5
Abb. 1.2	THAI ⁺ -Anlage /GUP 19/	7
Abb. 2.1	Schnitt durch ein Volldruckcontainment eines KONVOI DWR /BAK 18a/	16
Abb. 2.2	THAI ⁺ -Anlage mit THAI Test Vessel (TTV) links und Parallel Attachable Drum (PAD) rechts /REI 19a/	17
Abb. 2.3	THAI TH-29, Konfiguration des THAI-Behälters. Einbauten und Helium-/ Dampfzufuhr (links). Probenahmestellen, Thermoelemente, Schaufelrad und Feuchtigkeitssensor (rechts) /SCH 23/	19
Abb. 2.4	THAI TH-29, COCOSYS Nodalisierung (vertikaler und horizontaler Schnitt)	21
Abb. 2.5	THAI TH-29, Vergleich des gemessenen Drucks mit der COCOSYS- Rechnung	22
Abb. 2.6	THAI TH-29, Vergleich der gemessenen Dampfkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen mit der COCOSYS-Rechnung.....	23
Abb. 2.7	THAI TH-29, Vergleich der gemessenen Heliumkonzentration an unterschiedlichen Messpositionen mit der COCOSYS-Rechnung.....	24
Abb. 2.8	THAI TH-29, Vergleich der zeitlichen Propagation der Heliumwolke mit der COCOSYS-Rechnung.....	25
Abb. 2.9	THAI TH-29.1 - 29.3, Vergleich der Heliumkonzentration entlang des Ringraums nach 10,5 h.....	26
Abb. 2.10	THAI TH-29.1, Vergleich der Kondensatmassenströme.....	27
Abb. 2.11	THAI TH-29.3, Vergleich der Kondensatmassenströme.....	27
Abb. 2.12	Darstellung der Versuchsanlage THAI für den Versuch THAI HR-57	30
Abb. 2.13	COCOYS Nodalisierungen für den Test THAI HR-57 – blinde Rechnungsphase (links) und offene (rechts).....	31
Abb. 2.14	Schema der PAR-Modellierung in COCOSYS (links) und im THAI- Behälter implementierte PAR-Einheit (rechts) /ARN 21a/.....	32
Abb. 2.15	Druckverlauf im TTV im Experiment THAI HR-57, in der blinden Vorausrechnung und offenen Nachrechnung.....	33

Abb. 2.16	Integrale Rekombinationsmassen für H ₂ und CO für blinde Vorausrechnung, offene Rechnung und experimentelle Ergebnisse (Test THAI HR-57).....	34
Abb. 2.17	Konfiguration des Tests THAI Iod-31 /FUN 16/	35
Abb. 2.18	COCOSYS-Nodalisationen – Referenznodalisation (links) und Nodalisation mit vollständig mit Wasser gefüllten Zonen (R3.1 – R3.4) und ATM_FULL-Verbindungen (rechts).....	37
Abb. 2.19	Druckverlauf im PAD	38
Abb. 2.20	Temperaturverlauf in den Sumpfbereichen R3.1 bis R3.4.....	39
Abb. 2.21	PANDA ST3_2, Prinzipschema der PANDA-Versuchsbehälter mit der Position der Sprühdüse und den Anfangsparametern der Atmosphäre /OECD 12/	41
Abb. 2.22	PANDA ST3_2, Vorkonditionierungs- und Sprühphase	42
Abb. 2.23	COCOSYS-Nodalisation der PANDA-Testanlage /RIS 15/	44
Abb. 2.24	PANDA ST3_2, Vergleich zwischen dem berechneten Druck und dem während des Versuchs gemessenen Druck	46
Abb. 2.25	PANDA ST3_2, Vergleich der He-Konzentration in der DW1SO-Zone (Kuppel von Behälter 1), berechnet mit drei verschiedenen COCOSYS-Entrainment-Korrelationen	47
Abb. 2.26	PANDA ST3_2, Vergleich der He-Konzentration in der Zone DW1A3 (unterhalb der Kuppel von Vessel 1), berechnet mit drei verschiedenen COCOSYS-Entrainment-Korrelationen	49
Abb. 2.27	PANDA ST3_2, Vergleich der durch drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten atmosphärischen Temperatur in der DW1SO-Zone mit der im oberen Bereich (Kuppel) von Behälter 1 gemessenen Temperatur.....	50
Abb. 2.28	PANDA ST3_2, Vergleich der von den drei COCOSYS-Entrainment-Korrelationen berechneten atmosphärischen Temperatur in Zone mit der im oberen Bereich (Kuppel) von Behälter 1	51
Abb. 2.29	THAI TH-35, Schema der Testkonfiguration der Versuchsanlage THAI+	54
Abb. 2.30	Geschwindigkeitsprofile bei Gegenströmung – laminare Strömung, teilweise turbulente Strömung und voll ausgebreitete turbulente Strömung.....	54

Abb. 2.31	THAI TH-35, COCOSYS-Nodalisierung für die Voruntersuchungen zum Gegenströmungsversuch	55
Abb. 2.32	THAI TH-35, Gasgeschwindigkeitsprofile (anonymisierte Darstellung) im Verbindungsrohr mit und ohne Verluste aufgrund turbulenter Effekte	57
Abb. 2.33	THAI Iod-32, Aufbau des Versuchs in der THAI ⁺ -Anlage und COCOSYS-Nodalisierung	59
Abb. 2.34	THAI Iod-32, Schemazeichnung des Massentransfers von I ₂	61
Abb. 2.35	THAI Iod-32, Gesamtdruck	62
Abb. 2.36	THAI Iod-32, Temperaturen im PAD, Wasser und Gasphase	63
Abb. 2.37	THAI Iod-32, Gesamtiodmasse im Sumpfwasser	64
Abb. 2.38	THAI Iod-32, I ₂ -Masse im Sumpfwasser	65
Abb. 2.39	THAI Iod-32, I ₂ -Konzentration in der Atmosphäre des PAD	66
Abb. 2.40	THAI Iod-37, Versuchskonfiguration (links) und COCOSYS-Nodalisierung mit Kennzeichnung der Zonen (rechts).....	68
Abb. 2.41	THAI Iod-37, O ₃ -Konzentration im THAI-Behälter (anonymisierte Darstellung)	69
Abb. 2.42	THAI Iod-33, THAI ⁺ -Konfiguration (PAD links, TTV rechts) mit COCOSYS-Nodalisierung und Kennzeichnung der Zonen.....	71
Abb. 2.43	THAI Iod-33, relative Luftfeuchtigkeit in unterschiedlichen Zonen in Rechnung (durchgezogene Linien) und Experiment (unterbrochene Linien).....	72
Abb. 2.44	THAI Iod-33, Iodkonzentration in unterschiedlichen Raumbereichen in Rechnung (Linien) und Experiment (Punkte).....	73
Abb. 2.45	METUSA-Messaufnahme im oberen Verbindungsrohr der THAI-Versuchs-anlage /GUP 16/	73
Abb. 2.46	THAI Iod-33, Geschwindigkeit im oberen Verbindungsrohr in Rechnung (rote Linie) und Experiment (graue Linien für unterschiedliche Messstellen)	74
Abb. 2.47	THAI WH-33, COCOSYS-Nodalisierung	76
Abb. 2.48	THAI WH-33, zeitlicher Verlauf der Aerosolkonzentration in der Atmosphäre über dem Wasserpool (anonymisierte Darstellung).....	77

Abb. 2.49	THAI AW-4, berechneter Druckverlauf während der ersten Rechnungen	79
Abb. 2.50	THAI AW-4, Druckverlauf nach der Anpassung der Randbedingungen	80
Abb. 2.51	THAI AW-4, Sedimentierungsrate von Nebeltropfen bei AFP und NewAFP	81
Abb. 2.52	THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe	82
Abb. 2.53	THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 7,7 m Höhe	82
Abb. 2.54	THAI AW-4, Druckverläufe bei Variation der Tropfengröße.....	83
Abb. 2.55	THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe (andere Tropfengröße).....	84
Abb. 2.56	THAI AW-4, Unterschied der Aerosolkonzentrationen auf 4,9 m Höhe (andere Tropfengröße).....	84
Abb. 2.57	BMC VANAM-M3, Versuchstand /KAN 93/	87
Abb. 2.58	BMC VANAM-M3, Gesamtdruck.....	88
Abb. 2.59	BMC VANAM-M3, Temperaturschichtung in R6.....	89
Abb. 2.60	BMC VANAM-M3, relative Feuchte in R8	90
Abb. 2.61	BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R8	91
Abb. 2.62	BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R9	92
Abb. 2.63	BMC VANAM-M3, Aerosolkonzentration in R10.....	92
Abb. 2.64	THAI Iod-09, Gesamtiodkonzentration im Sumpf	94
Abb. 2.65	THAI Iod-09, I ₂ -Konzentration in der Gasphase	95
Abb. 2.66	THAI Iod-09, Gesamtiodmasse im Kondensatsammeltank	96
Abb. 2.67	THAI Iod-11, Druck innerhalb des THAI-Behälters.....	97
Abb. 2.68	THAI Iod-11, Temperaturen in einer unteren und einer oberen Zone	98
Abb. 2.69	THAI Iod-11, He-Konzentration in einer unteren und einer oberen Zone	99
Abb. 2.70	THAI Iod-11, Iodkonzentration auf verschiedenen Höhen des THAI-Behälters	100
Abb. 2.71	RTF Phebus1, Konzentration von Iodspezies in der Gasphase	101

Abb. 2.72	RTF Phebus1, Gesamtiodykonzentration in der Gasphase	102
Abb. 2.73	RTF Phebus 1, Iodkonzentration im Wasser gelöst	103
Abb. 2.74	Versuchsaufbau der ACE-Anlage /AGE 17/	106
Abb. 2.75	COCOSYS-Nodalisierung der ACE-Versuchsanlage	109
Abb. 2.76	Umrechnung der quadratischen Geometrie der ACE-Versuchsanlage in eine axialsymmetrische Geometrie im CCI-Modul von COCOSYS /AGE 17/	111
Abb. 2.77	Aufteilung der eingespeisten Leistung in den ACE-Versuchen /AGE 17/	115
Abb. 2.78	ACE L2, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt	120
Abb. 2.79	ACE L2, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten	121
Abb. 2.80	ACE L2, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den aus dem Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche	122
Abb. 2.81	ACE L2, Vergleich der von COCOSYS 3.0.1 berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzung von Spezies (schwarze Balken)	123
Abb. 2.82	ACE L6, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt	124
Abb. 2.83	ACE L6, Vergleich der berechneten Schmelztemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten	125
Abb. 2.84	ACE L6, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den aus dem Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche	126
Abb. 2.85	ACE L6, Vergleich der von COCOSYS 3.0.1 berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzung von Spezies (schwarzer Balken)	127
Abb. 2.86	ACE L6, Vergleich der von COCOSYSv2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Ruthenium (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten Freisetzungsrates von Ruthenium (schwarzer Balken) /AGE 17/	127

Abb. 2.87	ACE L7, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt.....	128
Abb. 2.88	ACE L7, Vergleich der berechneten Schmelzetemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten.....	130
Abb. 2.89	ACE L7, Vergleich der berechneten Anteile der aus der Schmelze freigesetzten Spaltprodukte mit den im Experiment ermittelten Anteilen der freigesetzten Spaltprodukte (bezogen auf das Anfangsinventar).....	131
Abb. 2.90	ACE L7, Vergleich der von COCOSYSv2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Bor (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten, anteiligen Borfreisetzung (schwarzer Balken) /AGE 17/.....	131
Abb. 2.91	ACE L8, Vergleich der berechneten Betonerosionstiefe in axialer Richtung mit dem im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Erosionsfortschritt.....	132
Abb. 2.92	ACE L8, Vergleich der berechneten Schmelzetemperatur mit den im Experiment durch Thermoelemente ermittelten Temperaturwerten.....	133
Abb. 2.93	ACE L8, Vergleich der berechneten Oberflächenverluste mit den im Experiment ermittelten Leistungsverlusten durch die Schmelzeoberfläche	134
Abb. 2.94	ACE L8, Vergleich der von COCOSYS berechneten Freisetzung von Spezies (rote Balken) mit den im Experiment ermittelten, anteiligen Freisetzungsrates von Spezies (schwarzer Balken).....	135
Abb. 2.95	ACE L8, Vergleich der von COCOSYS v2.4v3+ berechneten Freisetzungsrates von Lanthan (roter Balken) mit der im Experiment ermittelten anteiligen Lanthanfreisetzung (schwarzer Balken) /AGE 17/	136
Abb. 2.96	Ausbreitungskonzept des EPR™-Designs, via Wikimedia Commons	141
Abb. 2.97	Kernfänger des EPR™-Designs (Blick auf den Ausbreitungsraum) /AHN 15/	142
Abb. 2.98	Kühlsystem und Schichtenaufbau des EPR™-Kernfängers	143
Abb. 2.99	EPR™ Kernfänger, passive Schmelzekühlung durch Wasserüberflutung der Kernschmelze, Areva NP (CC0), via Wikimedia Commons.....	144
Abb. 2.100	COCOSYS-Nodalisierung des Sicherheitsbehälter einer EPR™-Anlage	145

Abb. 2.101	Modellierung des Ausbreitungsraums im Kernfänger einer EPR™-Anlage	146
Abb. 2.102	COCOSYS, Definition der inneren Kontur zwischen Kernschmelze und Opfermaterial in Form einer 2D-Punkteschar (<i>r, z-Koordinaten</i>).....	149
Abb. 2.103	COCOSYS, radiale und axiale Erosionstiefe in der Reaktorgrube (Zone R2)	151
Abb. 2.104	COCOSYS, Wasserspiegel in den Kanälen der Kühlrippen (Zone R1b) und in der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b) sowie im Ausbreitungsraum (Zone R1)	152
Abb. 2.105	COCOSYS, zeitlicher Verlauf der Schmelztemperatur im Kernfänger.....	153
Abb. 2.106	COCOSYS, radiale und axiale Erosionstiefe im Ausbreitungsraum des Kernfängers	154
Abb. 2.107	COCOSYS, zeitlicher Verlauf der Kontaktflächen zwischen Schmelze und Boden- und Seitenstrukturen	155
Abb. 2.108	COCOSYS, Wassertemperatur in der Spalte hinter der Seitenplatte (Zone R1b)	156
Abb. 2.109	COCOSYS, Wasserspiegel im Kühlkanal (R1b), Ausbreitungsraum (R1), in der Reaktorgrube (R2) und im Flutbecken (R4).....	157
Abb. 2.110	COCOSYS, Massenstrom durch die Überlauföffnung (AF1a)	158
Abb. 2.111	COCOSYS, Dampfkonzentration im Ausbreitungsraum (Zone R1).....	159
Abb. 2.112	Konzept des erweiterten vereinfachten Kabelbrandmodells in COCOSYS.....	162
Abb. 2.113	Vergleich der MLR-Profile (PVC: rot, PE/PVC: schwarz, FRNC: blau) ...	165
Abb. 2.114	Sauerstoffabhängigkeit $f(c_{O_2})$ für FRNC und PVC-Kabel	166
Abb. 2.115	Aufbau der SATURNE-Anlage. Die eingezeichnete Ebene bei 8 m ist die obere Grenze der COCOSYS-Nodalisierung /ZAV 13/	167
Abb. 2.116	Nodalisierung des Brandraums der SATURNE-Anlage (Aufsicht).....	167
Abb. 2.117	Gemessene Volumenstromrate im Experiment PRS2-CFSS-4	168
Abb. 2.118	Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für den PRS2-CFSS-2, -4 und PRF-BCM-S2 Test	169
Abb. 2.119	Draufsicht auf die verwendeten Räume in der DIVA-Anlage für die PRS2-CFS-Tests /ZAV 15/	170

Abb. 2.120	Darstellung der COCOSYS-Nodalisierung (Aufsicht: oben, Seitenansicht: unten)	171
Abb. 2.121	Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für die Tests PRS2-CFS-4, PRS3-CFP-D1 und PRS2-CFS-2... 173	173
Abb. 2.122	Vergleich der gemessenen und berechneten MLR (links) und HRR (rechts) für den PRS2-CFS-3 Test.....	174
Abb. 2.123	Schema des Kabelbrandortes im Heater-Bay-Raum als Teil des Turbinengebäudes.....	176
Abb. 2.124	Einteilung der Kabeltrassen	177
Abb. 2.125	Vergleich der Abbrandrate (oben) und Temperatur in der Nähe des Sprinklers (unten) der COCOSYS- und FDS-Rechnungen	179
Abb. 3.1	CoPool Modellgeometrie für Idealisierten SMR.....	187
Abb. 3.2	Berechnungsgebiet (links) und Flüssigkeitsgitter (rechts)	188
Abb. 3.3	COCOSYS-Schema der Nodalisierung – Seitenansicht.....	188
Abb. 3.4	Temperaturverteilung bei T = 0 Sek., T = 500 Sek. und T = 1000 Sek.	189
Abb. 3.5	Temperaturverteilung bei T = 1500 Sek., T = 2000 Sek. und T = 2500 Sek.	189
Abb. 3.6	Temperaturverteilung bei T = 3000 Sek., T = 3500 Sek. und T = 4000 Sek.	189
Abb. 3.7	Temperaturverteilung bei T = 4500 Sek. und T = 5000 Sek.	190
Abb. 3.8	Geschwindigkeitsfeld (qualitativ).....	191
Abb. 3.9	Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für y = 10 m bei T = 0 Sek., T = 500 Sek. und T = 1000 Sek.	191
Abb. 3.10	Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für y = 10 m bei T = 1500 Sek., T = 2000 Sek. und T = 2500 Sek.	192
Abb. 3.11	Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für y = 10 m bei T = 3000 Sek., T = 3500 Sek. und T = 4000 Sek.	192
Abb. 3.12	Geschwindigkeitsfeld (in m/s) für y = 10 m bei T = 4500 Sek. und T = 5000 Sek.	192
Abb. 3.13	Notkondensatorkonzept im KERENA /BRY 17/ (links) und Gebäudekondensatorkonzept in AP1000TM /SUT 11/ (rechts).....	194

Abb. 3.14	Nachzerfallswärmeabfuhrsystem im NuScale™ SMR /NUS 20/	195
Abb. 3.15	1-Zonen-Nodalisierung (links) und 10-Zonen-Nodalisierung (rechts)	196
Abb. 3.16	Hauptphasen der Simulationsphasen	198
Abb. 3.17	Zeitverlauf des Wasserstands bei beheizter Struktur	199
Abb. 3.18	Zeitverlauf der Zonentemperaturen bei feiner Nodalisierung im Fall der beheizten Struktur	200
Abb. 3.19	Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei grober Nodalisierung.....	200
Abb. 3.20	Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (oberste Struktur)	201
Abb. 3.21	Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (zweite Struktur von oben)	201
Abb. 3.22	Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten bei feinere Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (dritte Struktur von oben)	202
Abb. 3.23	Zeitverlauf der Wärmeübertragungskoeffizienten an der untersten Zone bei feiner Nodalisierung im Fall stark beheizter Struktur (unterste Struktur).....	202
Abb. 3.24	Erstellung einer an den NUWARD™ SMR angelehnten Geometrie für CoPool.....	204
Abb. 3.25	Position der Monitorpunkte im Wasserpool	205
Abb. 3.26	Temperaturen in °C (oben) und Vertikalgeschwindigkeiten in m/s (unten) bei t = 500 s.....	206
Abb. 3.27	Temperaturverlauf an unterschiedlichen Monitorpunkten (P1, P6, P1, vgl. Abb. 3.25)	207
Abb. 3.28	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten an unterschiedlichen Monitorpunkten (P1, P6, P12, vgl. Abb. 3.25)	207
Abb. 3.29	Verfeinerung des CoPool-Gitters im Fluid (Schnitt / Ansicht von oben)	208
Abb. 3.30	Einfluss der Gitterfeinheit auf den Temperaturverlauf an den Monitorpunkten P1 und P12 (vgl. Abb. 3.25).....	209

Abb. 3.31	Einfluss der Gitterfeinheit auf die vertikale Strömungsgeschwindigkeit an den Monitorpunkten P1 und P12.....	209
Abb. 3.32	Einfluss der Randbedingung auf den Temperaturverlauf an den Monitorpunkten P1 und P12	211
Abb. 3.33	Einfluss der Randbedingung auf die vertikale Strömungsgeschwindigkeit an den Monitorpunkten P1 und P12.....	211
Abb. 3.34	Vergleich der Berechnungsgitter von CoPool und CFX.....	212
Abb. 3.35	Temperaturen in CFX (oben) und CoPool (unten) bei $t = 500$ s (Farbskala oben in K, unten in $^{\circ}\text{C}$)	213
Abb. 3.36	Temperaturen in CFX (oben) und CoPool (unten) bei $t = 10.000$ s (etwas unterschiedliche Farbskalen, oben in K, unten in $^{\circ}\text{C}$)	214
Abb. 3.37	Vertikalgeschwindigkeiten in m/s, CFX (oben) und CoPool (unten), bei $t = 500$ s.....	215
Abb. 3.38	Vergleich der mit CoPool und CFX berechneten Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12.....	216
Abb. 3.39	Temperaturen an der Containment-Außenseite bei $t = 1.000$ s (Farbskala links in K, rechts in $^{\circ}\text{C}$)	217
Abb. 3.40	Vergleich der mit CoPool und CFX berechneten vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an den Monitorpunkten P1 und P12.....	217
Abb. 3.41	Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten zum Zeitpunkt $t = 500$ s ohne Flansch (links) und mit Flansch (rechts)	218
Abb. 3.42	Vergleich der Temperaturen zum Zeitpunkt $t = 500$ s ohne Flansch (links) und mit Flansch (rechts).....	218
Abb. 3.43	Temperaturen bei den Rechnungen ohne und mit Flansch an den Monitorpunkten P1 und P12	219
Abb. 3.44	Temperaturen an den Containment-Außenseiten mit und ohne Flansch.....	220
Abb. 3.45	Vertikale Strömungsgeschwindigkeiten bei den Rechnungen ohne und mit Flansch an den Monitorpunkten P1 und P12.....	220
Abb. 3.46	COCOSYS-Nodalisierung (rechts) für die mit CoPool gekoppelte Rechnung	221
Abb. 3.47	CoPool mit gekoppeltem Datensatz: Temperaturverteilungen in $^{\circ}\text{C}$	222
Abb. 3.48	Temperaturverlauf in COCOSYS-Zone R1 (Gasphase).....	223

Abb. 3.49	Vergleich der Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung	223
Abb. 3.50	Veränderung des Fluid-Gitters in z-Richtung (links: vorher, rechts: nachher)	224
Abb. 3.51	CoPool mit gekoppeltem Datensatz (modifiziertes Gitter): Temperaturverteilungen in °C	225
Abb. 3.52	Temperaturverlauf in COCOSYS-Zone R1 (Gasphase / neues Gitter)...	226
Abb. 3.53	Vergleich der Temperaturen an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung (neues Gitter).....	227
Abb. 3.54	Vergleich der vertikalen Strömungsgeschwindigkeiten an den Monitorpunkten P1 und P12 für die Stand-alone- und die gekoppelte CoPool/COCOSYS-Rechnung (neues Gitter)	227
Abb. 3.55	Leckstörfall: Massenstrom für die Einspeisung in COCOSYS-Zone C1	228
Abb. 3.56	Leckstörfall: Spezifische Enthalpie für die Einspeisung in COCOSYS-Zone C1	229
Abb. 3.57	Aktuelle Rechnung: Druckverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)	230
Abb. 3.58	Frühere Rechnung: Druckverlauf im Containment	231
Abb. 3.59	Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)	231
Abb. 3.60	Frühere Rechnung /BEC 18/: Temperaturverlauf im Containment	232
Abb. 3.61	Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf im Wasserpool (COCOSYS-Zone R1)	232
Abb. 3.62	Frühere Rechnung /BEC 18/: Temperaturverlauf im Wasserpool.....	233
Abb. 3.63	Aktuelle Rechnung: Temperaturverlauf an den Monitorpunkte P1 und P12 im Wasserpool.....	233
Abb. 3.64	Aktuelle Rechnung: Temperaturen in °C im Wasserpool (links) und an der Containment-Außenseite (rechts) zum Zeitpunkt t = 2.000 s.....	234
Abb. 3.65	Parameterstudie: Druckverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)	235

Abb. 3.66	Parameterstudie: Temperaturverlauf im Containment (COCOSYS-Zone C1)	235
Abb. 3.67	Parameterstudie: Temperatur an der Containment-Wand (Pool-Seite) ..	236
Abb. 3.68	Parameterstudie: Mittlere Pooltemperatur.....	236
Abb. 3.69	Schema der PASI-Versuchsanlage (Kouhia, Kauppinen et al, DOI: 10.1016/j.nucengdes.2021.111417, CC BY 4.0 DEED /KOU 21/).....	239
Abb. 3.70	PASI-Versuchsanlage, COCOSYS-Nodalisierung	240
Abb. 3.71	Vereinfachte schematische Darstellung der INKA-Versuchsanlage /LEY 12/.....	244
Abb. 3.72	Flutbehälter mit Messstellen für den Druck und die Temperatur /WAG 17/.....	245
Abb. 3.73	Ausbildung von inneren (Kondensat) und äußeren (Dampf) Strömungsschichten in der Rücklaufleitung des Gebäudekondensators /WAG 17/	247
Abb. 3.74	COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters der INKA-Versuchsanlage.....	249
Abb. 3.75	Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators mit Messstellen für die Temperatur des Kühlmittels /WAG 17/	251
Abb. 3.76	Nodalisierungsschema des Rücklaufrohres und der Wärmetauscherrohre des Gebäudekondensators.....	252
Abb. 3.77	Höhendifferenzen zwischen Gebäudekondensator und Absetzbecken	253
Abb. 3.78	CCC_040_025_100_01, Vergleich des berechneten Druckes mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im Dom des Flutbehälters.....	255
Abb. 3.79	CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Atmosphärentemperatur mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter.....	255
Abb. 3.80	CCC_040_025_100_01, Vergleich des berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom	256
Abb. 3.81	CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators	258

Abb. 3.82	CCC_040_025_100_01, Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der im Experiment ermittelten Kühlleistung.....	259
Abb. 3.83	CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Kühlmitteltemperatur (Seg_15) mit der im Experiment gemessenen Kühlmitteltemperatur im Wärmetauscherrohr sowie der Wandtemperatur	260
Abb. 3.84	CCC_040_025_100_01, berechneter volumetrischer Dampfgehalt entlang der WTR des Gebäudekondensators	261
Abb. 3.85	CCC_040_025_100_01, berechnete Strömungsform (FLAGB) in den Wärmetauscherrohren des Gebäudekondensators	262
Abb. 3.86	CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Austrittstemperaturen (Sektion 2) am Rücklaufrohr mit den im Experiment gemessenen Temperaturen in der Rücklaufleitung (auf Höhe 22,8 m).....	263
Abb. 3.87	CCC_040_025_100_01, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen in zwei Zonen des Absetzbeckens mit den im Experiment gemessenen Wassertemperaturen entlang der Höhe des Absetzbeckens	264
Abb. 3.88	CCC_040_025_100_01, Vergleich der in den Flutbehälter eingespeisten Dampfenenergie (INJECTION) und der im Gebäudekondensator gespeicherten Energie (BUILD_COND) mit dem berechneten Energiebilanzfehler (DIFFERENCE).....	265
Abb. 3.89	CCC_050_030_20_1, Vergleich des berechneten Druckes mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im Dom des Flutbehälters.....	266
Abb. 3.90	CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten mit der im Experiment gemessenen Atmosphärentemperatur im Flutbehälter	266
Abb. 3.91	CCC_050_030_20_1, Vergleich des berechneten Massenstroms durch den Gebäudekondensator mit dem im Experiment ermittelten Massenstrom	268
Abb. 3.92	CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Kühlleistung mit der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators	269
Abb. 3.93	CCC_050_030_20_1, Vergleich des Integrals der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit dem Integral der im Experiment ermittelten Kühlleistung des Gebäudekondensators und der in den Flutbehälter eingespeisten Dampfenenergie.....	270

Abb. 3.94	CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Kühlmitteltemperatur (Seg_15) mit der im Experiment gemessenen Kühlmitteltemperatur im Wärmetauscherrohr	271
Abb. 3.95	CCC_050_030_20_1, Vergleich der berechneten Austrittstemperaturen (Sektion 2) am Rücklaufrohr mit den im Experiment gemessenen Temperaturen in der Rücklaufleitung (auf Höhe 22,8 m).....	272
Abb. 3.96	ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage.....	277
Abb. 3.97	Modifizierte ATHLET/COCOSYS-Nodalisierung der INKA-Versuchsanlage (EASY-4: Station blackout)	278
Abb. 3.98	Schematische Darstellung der Kopplung zwischen ATHLET-HCO-Struktur und COCOSYS-Struktur	279
Abb. 3.99	COCOSYS-Nodalisierung des Flutbehälters für die Nachrechnungen des Experiments EASY-4 (Station blackout)	280
Abb. 3.100	EASY-4, Vergleich des berechneten Druckes für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im DW-Behälter	281
Abb. 3.101	EASY-4, Vergleich der über den NOKO übertragenen Wärme für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)	282
Abb. 3.102	EASY-4, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter	283
Abb. 3.103	EASY-4, Vergleich der berechneten Luftanteile im Flutbehälter für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)	284
Abb. 3.104	EASY-4, Vergleich des berechneten Druckes für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR2) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit dem im Experiment gemessenen Druckverlauf im DW-Behälter	285
Abb. 3.105	EASY-4, Vergleich der berechneten Wassertemperaturen für die gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG) mit der im Experiment gemessenen Temperatur im Flutbehälter	286
Abb. 3.106	EASY-4, Vergleich der über den NOKO übertragenen Wärme für die gekoppelte Rechnung (VAR2) und die ursprüngliche Simulation (ORG).....	287

Abb. 3.107	EASY-4, Vergleich der berechneten Luftanteile im Flutbehälter für die vorliegende, gekoppelte Variantenrechnung (VAR1) und die ursprüngliche Simulation (ORG)	287
Abb. 3.108	EASY-4, Vergleich der vom GEKO-Modul berechneten Wandtemperatur der WTR mit der von COCOSYS berechneten Zonentemperatur (Flutbehälter)	289
Abb. 3.109	EASY-4, Vergleich des vom GEKO-Modul berechneten Wärmeübergangskoeffizienten an der Außenseite (ALPHAA) und an der Innenseite (ALPHA) der Wärmetauscherrohre	290
Abb. 3.110	EASY-4, Vergleich der vom GEKO berechneten Kühlleistung mit der in der ursprünglichen ATHLET/COCOSYS-Simulation (ORG) ermittelten Kühlleistung.....	291
Abb. 4.1	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: zeitlicher Verlauf des SHB-Drucks (MBL-Fall).....	297
Abb. 4.2	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Gastemperatur im Dombereich (MBL-Fall).....	297
Abb. 4.3	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Temperatur der Stahlschale im Dom-Bereich (MBL-Fall)	298
Abb. 4.4	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Gastemperatur im Dom bei 41 m	298
Abb. 4.5	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: zeitlicher Verlauf der Dampfkonzentration in den Anlagenräumen (MBL-Fall).....	299
Abb. 4.6	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Dampfanteil in der äußeren Peripherie unterhalb Beckenflur (MBL-Fall)	299
Abb. 4.7	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Masse abgelagerter Spaltprodukte im Sumpf (MBL-Fall)	300
Abb. 4.8	Temperaturverteilung innerhalb des SHB bei 1.000 s (MBL-Fall).....	301
Abb. 4.9	Temperaturverteilung innerhalb des SHB bei 25.000 s (MBL-Fall).....	301
Abb. 4.10	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Zeitlicher Verlauf des SHB-Drucks	302
Abb. 4.11	DWR-KONVOI, COCOSYS-Rechnung: Temperaturen im SHB-Dom	302
Abb. 4.12	Druck im PAR-Versuch (TTV).....	303
Abb. 4.13	Beispiel für die Temperaturunterschiede in THAI (am Innenzylinder).....	304

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	PANDA ST3_2, Anfangs- und Randbedingungen	42
Tab. 2.2	THAI Iod-32, Versuchsphasen	60
Tab. 2.3	Randbedingungen für die COCOSYS-Rechnung	69
Tab. 2.4	Überblick über die für NewAFP relevanten Versuche im Regressionstesten	85
Tab. 2.5	Anfangs- und Randbedingungen der COCOSYS-Nachrechnungen ausgewählter ACE-Experimente /AGE 17/	107
Tab. 2.6	Vergleich der Sichtfaktoren für die Wärmestrahlung aus der Schmelzeoberfläche in der Simulation ausgewählter ACE- Experimente mit COCOSYS	110
Tab. 2.7	Anfangsmasse der Schmelze für die Simulation ausgewählter ACE- Experimente mithilfe des CCI-Moduls von COCOSYS	112
Tab. 2.8	Zusammensetzung des Betons für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mithilfe des CCI-Moduls von COCOSYS	113
Tab. 2.9	Vergleich der Modellparameter zu MCCI für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mit COCOSYS	117
Tab. 2.10	Spaltprodukt – und Strukturmaterialmasse für die Simulation ausgewählter ACE-Experimente mit dem CCI-Modul von COCOSYS /AGE 17/	119
Tab. 2.11	COCOSYS-Eingabedaten zu den verschiedenen Kabelmaterialien	163
Tab. 3.1	Anfangs- und Randbedingungen der für die COCOSYS- Nachrechnungen ausgewählten INKA-Experimente	248

Abkürzungsverzeichnis

AC ²	<i>Computerprogramm der GRS</i>
ACE	<i>Advanced Containment Experiments (Versuchsanlage ANL, USA)</i>
AFP	<i>Aerosol and Fission Product (COCOSYS Modul)</i>
ANL	<i>Argonne National Laboratory, USA</i>
AP1000	<i>Druckwasserreaktor Westinghouse, Advanced Passive (Westinghouse DWR)</i>
ASTEC	<i>Accident Source Term Evaluation Code (Computerprogramm von IRSN)</i>
AULA	<i>Abwaschmodell für unlösliche Aerosole</i>
BIP	<i>Behaviour of Iodine Project (OECD/NEA Projekt)</i>
BMC	<i>Battelle Model Containment (Versuchsanlage, Deutschland)</i>
BMUV	<i>Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz</i>
CCI	<i>Core Concrete Interaction (COCOSYS Modul)</i>
CCV	<i>Modelloption für die Wärmeübertragung zwischen Kernschmelze und Kernfangwänden</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CHRS	<i>Containment Heat Removal System</i>
COCOSYS	<i>Containment Code System (Computerprogramm der GRS)</i>
COMO	<i>Condensor Module</i>
CoPool	<i>Containment Pool (Computerprogramm von ITWM)</i>
CSNI	<i>Committee on the Safety of Nuclear Installations</i>
DIVA	<i>Versuchsanlage IRSN (Frankreich)</i>
DWR	<i>Druckwasserreaktor</i>
ELSA	<i>Spaltproduktfreisetzungsmodul in ASTEC</i>
ESTER	<i>Experiments on Source Term for Delayed Releases (OECD/NEA Projekt)</i>
FLASH-CAT	<i>Flame Spread over Horizontal Cable Trays, Computermodell</i>
GEKO	<i>Gebäudekondensator</i>
Git	<i>freie Software zur Versionsverwaltung von Dateien</i>
HCO	<i>Heat Conduction Object</i>
HRR	<i>Heat Release Rate</i>
IAEA	<i>International Atomic Energy Agency</i>
INKA	<i>Integral-Teststand Karlstein (Versuchstand Framatome, Deutschland)</i>

IRSN	<i>Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire</i>
KERENA™	<i>Siedewasserreaktor-Konzept (AREVA)</i>
KMV	<i>Kühlmittelverluststörfall</i>
LAVA	<i>Computerprogramm der GRS zur Schmelzeausbreitung</i>
LCS	<i>Limestone/Common Sand</i>
LP	<i>Lumped Parameter Programm</i>
LUT	<i>Lappeenranta-Lahti University of Technology, Finland</i>
MBL	<i>Medium Break LOCA</i>
MCCI	<i>Molten Corium Concrete Interaction</i>
MDB	<i>Materialdatenbank</i>
METUSA	<i>Minimal Encroaching Turntable Streamwise Anemometers</i>
MLR	<i>Mass Release Rate</i>
MOCKA	<i>Molten Corium Karlsruhe (Versuchsanlage, KIT)</i>
ND*	<i>Störfallverlauf entsprechend der Deutschen Risikostudie Phase B</i>
NOKO	<i>Notkondensator</i>
NUSCALE™	<i>SMR, U.S. Konzept</i>
NUWARD™	<i>NUclear forWARD, französisches SMR Konzept</i>
PAD	<i>Parallel Attachable Drum (Behälter in der THAI-Versuchsanlage)</i>
PANDA	<i>Passive Nachzerfallswärmeabfuhr und Druckabbau-Testanlage bei PSI (Schweiz)</i>
PAR	<i>Passiver Autokatalytischer Rekombinator</i>
PASI	<i>Passive heat removal system (Versuchsanlage bei LUT)</i>
PCCS	<i>Passive Containment Cooling System</i>
Phebus	<i>Versuchsanlage (IRSN)</i>
PHRS-C	<i>Passive Heat Removal System - Containment</i>
PKL	<i>Primärkreislauf</i>
POSEIDON	<i>Pool-Scrubbing-Test</i>
PRISME	<i>Propagation d'un incendie pour des scenarios multi-locaux élémentaires</i>
PRS2-CFS	<i>PRISME - Cabel Fire Spreading</i>
PRS3-BCM	<i>PRISME-Benchmark</i>
PRS3-CFP-D1	<i>PRISME-Cable Fire Propagation</i>
PSI	<i>Paul Scherrer Institut</i>
PSS	<i>Arbeitsgruppe Plant Simulation and Safety der Ruhr-Uni-Bochum</i>
RDB	<i>Reaktordruckbehälter</i>
ROSAU	<i>Reduktion of Severe Accident Uncertainties (OECD/NEA Projekt)</i>

SATURNE	<i>Versuchsanlage zur Durchführung von Kalorimeter-Brandversuchen, IRSN</i>
SHB	<i>Sicherheitsbehälter</i>
SJTU	<i>Shanghai Jiao Tong University, China</i>
SPARC	<i>Suppression Pool Aerosol Removal Code (Computerprogramm)</i>
STEM	<i>Source Term Evaluation and Mitigation (OECD/NEA Projekt)</i>
SVN	<i>Subversion (Versionsverwaltungssystem)</i>
THAI	<i>Thermal-hydraulics, Hydrogen, Aerosols, Iodine (Versuchstand bei Becker Technologies, Deutschland)</i>
THEMIS	<i>THAI Experiments on Mitigation measures, and source term issues to support analysis and further Improvement of Severe accident management measures (OECD/NEA Projekt)</i>
THY	<i>Thermal Hydraulic (COCOSYS Modul)</i>
TTV	<i>THAI Test Vessel (Hauptbehälter in der THAI Versuchsanlage)</i>
UM	<i>User Manual</i>
VBES	<i>MCCI Test in der VULCANO Versuchsanlage</i>
VULCANO	<i>Versatile UO₂ Lab for Corium Analysis and Observation, Versuchsanlage CEA</i>
WAFT	<i>Water Film Test Facility (Versuchsstand, China)</i>
WTR	<i>Wärmetauscherrohre</i>
WWER	<i>Wasser-Wasser-Energie-Reaktor russischer Bauart</i>

**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

ISBN 978-3-949088-82-7