



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Freisetzung von Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter

Abschlussbericht



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Abschlussbericht/ Final Report

Reaktorsicherheitsforschung-
Vorhabens Nr.:/
Reactor Safety Research-Project No.:
RS1152

Vorhabensitel / Project Title:

**Freisetzung von Kernschmelze
in den Sicherheitsbehälter**

**Release of molten core material
into the containment**

Autor / Author:
C. Spengler
W. Klein-Heßling

Berichtszeitraum / Publication Date:
November 2006

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS 1152 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Kurzfassung

Im Rahmen dieses Vorhabens ist das Containment-Code-System COCOSYS um ein Modul erweitert worden, mit dem die Phänomene im Zusammenhang mit der Freisetzung der Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter (RDB) in den Sicherheitsbehälter simuliert werden können. Diese Modellerweiterung schließt fortan die in den Analyse-codes der GRS vorhandene Modell-Lücke zwischen den In-Vessel-Prozessen, die zum Durchschmelzen des RDB führen und der Simulation des Schmelzeverhaltens außerhalb des RDB (Schmelzeausbreitung, MCCI).

Die Modellerweiterungen wurden aufgrund intensiver Anwendungserfahrung mit dem US-amerikanischen Containment-Code CONTAIN vorgenommen. Ein wesentlicher Teil der Arbeiten bestand zunächst in der Anwendung von CONTAIN auf Experimente mit Anlagengeometrien, die sich an deutsche Verhältnisse orientieren. Es konnte gezeigt werden, dass die Philosophie und Anlage der Modelle für DCH-Phänomene in CONTAIN nach derzeitigem Kenntnisstand eine ausreichende Plattform für die Übernahme dieser in COCOSYS darstellen.

In COCOSYS sind daher viele Teilmodelle analog zu den in CONTAIN vorhandenen Modellen angelegt worden, mit punktuellen Vereinfachungen und Verbesserungen. Die gegen Vorhabensende vorliegende Version von COCOSYS wurde abschließend durch Anwendung auf wichtige Experimente in der Karlsruher DISCO-Anlage und der amerikanischen Surtsey-Anlage, durch Vergleiche mit CONTAIN für einen Benchmark (DISCO-L1) sowie für einen dokumentierten Anlagenrechenfall (Sequoyah) einer detaillierten Basisabsicherung unterzogen.

Mit dem aktuellen DCH-Modul in COCOSYS steht ein Modell zur Verfügung, mit dem die Vorgänge während der Freisetzung von Kernschmelze aus dem Reaktordruckbehälter realistisch simuliert werden können.

Abstract

Within this project the containment code system COCOSYS was extended with a module for the simulation of phenomena during melt release from the reactor pressure vessel (RPV) into the containment. This model extension is closing the gap of models in the analysis codes of GRS between the in-vessel processes, which lead to the melt-through of the reactor pressure vessel, and the simulation of melt behaviour outside of the RPV (melt spreading/relocation, MCCI).

The model extensions were based upon intensive experiences in application of the US-American containment code CONTAIN. A substantial part of this work consisted of applying CONTAIN to experiments for plant geometries, which are oriented at typical conditions in Germany. It is shown that according to present state of knowledge the philosophy and the composition of the models in CONTAIN represent a sufficient platform for adoption of these into COCOSYS.

Hence, in COCOSYS many detailed models are implemented in close analogy to CONTAIN with selective simplifications and improvements. For the COCOSYS-DCH version achieved at the end of the project a final basic checking was performed, including detailed post-test calculations of experiments in the DISCO and in the Surtsey facility, comparison with CONTAIN in a benchmark for the experiment DISCO-L1 and a comparison with CONTAIN for a plant case (Sequoyah).

According to the current state of development the DCH-module in COCOSYS, which is provided by this work, is capable of simulating the phenomena during release of core melt from the RPV with sufficient realism.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Aufbau des Abschlussberichtes	4
2	Übersicht über vorhandene Modelle und Bewertung	6
2.1	Übersicht über verfügbare Codes	6
2.1.1	CONTAIN	6
2.1.2	RUPUICUV (in ASTEC)	10
2.1.3	AFDM	12
2.1.4	MAAP	14
2.2	Bewertung von Modellen für Einzelphänomene.....	16
2.2.1	Beschreibung der Ausströmung aus dem RDB.....	16
2.2.2	Eintrag von Schmelze in die Gasströmung (Entrainment)	28
2.2.3	Ablagerung luftgetragener Partikel (Trapping)	32
3	Überprüfung der Modelle in CONTAIN für die Übernahme in COCOSYS	38
3.1	Überprüfung der CONTAIN-Version.....	38
3.2	Nachrechnung der kalten DISCO-Versuche mit CONTAIN	38
3.2.1	Nachrechnung von Experimenten in EPR-Geometrie.....	39
3.2.2	Nachrechnung von Experimenten in französischer Geometrie (P'4)	47
3.3	Nachrechnung der heißen DISCO-Versuche	50
3.3.1	Nachrechnung von Experimenten in EPR-Geometrie.....	51
3.3.2	Nachrechnung von Experimenten in französischer Geometrie (P'4)	78
4	Modellentwicklung für COCOSYS-DCH	84
5	Basisabsicherung von COCOSYS-DCH	88
5.1	Detailanalyse ausgewählter Experimente	88
5.1.1	Implikationen aus dem Zusammenspiel energetischer Prozesse bei den DISCO-Versuchen	88
5.1.2	Anpassung der wichtigsten Modell-Parameter in COCOSYS-DCH.....	97

5.1.3	DISCO H04	100
5.1.4	DISCO H02	106
5.1.5	DISCO H03	116
5.1.6	Sup-1	121
5.1.7	Sup-2	127
5.2	Benchmark	131
5.2.1	Nachrechnung von DISCO-L1 mit Übernahme der Parameter aus DISCO-Nachrechnungen	132
5.2.2	Variation von kritischer Kutateladze-Zahl und Cavity-Konstante	137
5.2.3	Variation des Schlupfes	139
5.3	Rechnung mit COCOSYS-DCH für Sequoyah	142
5.4	Zusammenfassung der Basisabsicherung/Bewertung von COCOSYS- DCH	164
6	Zusammenfassung und Ausblick	171
7	Literatur	176
8	Verteiler	181

Lateinische Symbole

A	Fläche	[m ²]
Bo	Bond-Zahl	[1]
C	Konstanten	[1]
C _{dis}	Ausflusszahl	[1]
c _p , c _v	Spez. Wärmekapazität	[J/(kg K)]
d, D	Durchmesser	[m]
d _h	Leckdurchmesser	[m]
d _{RPV}	RDB-Innendurchmesser	[m]
E	Energie	
f	Massenanteil	[1]
Fr	Froude-Zahl	[1]
g	Gravitationsbeschleunigung	[m/s ²]
h	Höhe	[m]
K _c	Cavity-Konstante	[1]
Ku	Kutateladze-Zahl	[1]
l, L	Länge	[m]
m, M	Masse	[kg]
n	Anzahl	[1]
N _r	Zirkulations-Zahl	[1]
Oh	Ohnesorge-Zahl	[1]
P	Druck	[Pa]
R	Gaskonstante	[J/(kg K)]
Re	Reynolds-Zahl	[1]
s	Schlupf	[1]
S	Skalierungsverhältnis	[1]
t	Zeit	[s]

V	Volumen	[m ³]
v	Geschwindigkeit	[m/s]
We	Weber-Zahl	[1]

Griechische Symbole

γ	Isentropenexponent	[1]
δ	Dicke des Schmelzefilms	[m]
ε	Entrainment-Rate	[kg/(s m ²)]
η	Dynamische Viskosität	[Pa s]
λ	Wärmeleitfähigkeit	[W/mK]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
σ	Oberflächenspannung	[J/m ²]
τ	Scherspannung	[Pa]
Φ	Martinelli-2-Phasenfaktor	[1]
Ψ	Verhältnis von Wärmekapazitäten	[1]
ω	Ablagerungsrate	[s ⁻¹]

Indizes

0	Anfangszustand
b	Blowthrough
c, cav	Cavity
d	Debris = Schmelzmaterial
dis	Entladung (engl.: discharge)
disp	dispersed = aus der Reaktorgrube ausgetragen
f	Reibung (engl.: friction)
g	Gas
h	RDB-Leck (engl.: „hole“)
i	Zone
n	Größenklasse
k	Spezies
krit	kritisch
L	luftgetragen
ox	Oxidation
RPV	RDB (engl.: „reactor pressure vessel“)
trap	Ablagerung

1 Einleitung

Die GRS entwickelt und validiert Rechenprogramme für realitätsnahe ('best estimate') Störfallsimulationen sowohl im Bereich der Auslegungsstörfälle als auch für den auslegungsüberschreitenden Bereich bis hin zu Unfällen mit Kernschmelzen.

Zur Simulation der stör- und unfallbedingten Vorgänge in einem Sicherheitsbehälter wird das in der GRS entwickelte Programmsystem COCOSYS /KLE 00/ eingesetzt. Bislang konnte COCOSYS z. B. die nachfolgenden Phänomene und weitgehend auch ihre Wechselwirkungen untereinander beschreiben:

- thermohydraulische Vorgänge
- H₂-Verbrennungsprozesse
- Aerosolphysik
- Jodverhalten (Chemie und Transport)
- Wechselwirkungen einer in den Sicherheitsbehälter freigesetzten Kernschmelze mit Beton (MCCI)
- Freisetzung radioaktiver Stoffe aus der Kernschmelze
- Transport von radioaktiven Stoffen in und durch die Zonen des Sicherheitsbehälter

Obwohl die in COCOSYS verfügbaren Einzelmodelle für verschiedenartige Phänomene bzw. -gruppen anhand von sachorientierten Experimenten erfolgreich validiert worden sind, zeigten Analysen für einen deutschen DWR vom Typ KONVOI aber noch bestehende Lücken bei der Simulation bestimmter Wechselwirkungen auf. Es ist beabsichtigt, diese Lücken zu schließen, um in einer Kopplung von COCOSYS mit seinem Gegenstück auf der Kühlkreislauf-Seite (ATHLET/ ATHLET-CD) möglichst alle Phänomene und deren Wechselwirkungen untereinander einschließlich des gesamten Schmelzeverhaltens nahtlos abbilden zu können.

Mit den in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten wurde ein grundlegendes Modul für COCOSYS zur Verfügung gestellt, um den Schmelzeaustrag aus einem versagenden Reaktordruckbehälter unter Druck in den Sicherheitsbehälter abbilden zu können.

Damit ist die Möglichkeit geschaffen worden, COCOSYS für die Analyse lokaler Auswirkungen einer unter Druck freigesetzten Kernschmelze im Sicherheitsbehälter von DWR-Anlagen nutzen zu können. Belastbare Aussagen hierzu sind erforderlich, um die Durchführbarkeit von Maßnahmen eines anlageninternen Notfallschutzes, vorrangig zur Schadensbegrenzung, bewerten zu können. Der Erhalt der Funktionsfähigkeit von sicherheitstechnisch nutzbaren Systemen und Instrumentierungen muss unter Unfallbedingungen überprüfbar sein. Durch die Modellerweiterungen wird somit die mechanistische Basis für eine durchgehende Analyse der im Zuge von Unfällen auftretenden möglichen Vorgänge bis zum Einsetzen einer Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung geschaffen. Darüber hinaus ergibt sich die Möglichkeit, die aus einem Freisetzungsvorgang resultierenden Einwirkungen auf den Sicherheitsbehälter, einzelner Sicherheitsbehälter-Bereiche oder sicherheitstechnisch relevanter Komponenten mit COCOSYS untersuchen zu können.

Im Einzelnen wird neben der Freisetzung von Kernschmelze unmittelbar nach einem lokalen Versagen des RDB, deren Mitrisse und Ablagerung in angrenzenden Raumbereichen und der kurzzeitige Wärmeaustausch mit der Atmosphäre der betroffenen Anlagenräume sowie chemische Reaktionen freigesetzter Kernschmelzepartikel mit Bestandteilen der Raumatmosphären simuliert. Die Modellierung ermöglicht eine Beschreibung für lokale (d. h. in bestimmten Räumen auftretende) Druck- und Temperaturanstiege ebenso wie für das Auftreten und Reagieren brennbarer Gasgemische.

Mit dem in diesem Vorhaben erreichten Entwicklungsstand von COCOSYS-DCH inklusive einer umfangreichen Basisabsicherung des DCH-Moduls ist eine Voraussetzung geschaffen worden, dass mit dem GRS-Programmpaket ATHLET/ATHLET-CD zusammen mit COCOSYS die gesamte Sequenz eines Unfallablaufes - vom auslösenden Ereignis über das Versagen des RDB mit der Freisetzung von Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter bis hin zu einer Schmelze-Beton-Wechselwirkung - geschlossen berechnet werden kann.

Im Rahmen der Analyse von schweren Störfällen in Reaktoranlagen ist die Ermittlung der Folgen eines Schmelzeaustrags aus dem Reaktordruckbehälter von großer sicherheitstechnischer Bedeutung. Nach dem Unfallablauf im Primärsystem bis hin zum Ansammeln von geschmolzenem Kernmaterial im unteren Plenum des RDB und bei dessen Versagen sind für die Rückhaltung der radioaktiven Stoffe im Sicherheitsbehälter primär zwei weitgehend nacheinander ablaufende Unfallphasen von Bedeutung:

- Das Ausströmen von Kernmaterial und Dampf aus dem RDB und seine Verteilung auf die einzelnen Zonen des Sicherheitsbehälters aufgrund von Druckausgleichsströmungen, verbunden mit Temperatur- und Druckaufbau in den Zonen des Sicherheitsbehälters (direct containment heating, DCH).
- Das Ansammeln von Kernmaterial am Boden der unmittelbar den RDB umgebenden Sicherheitsbehälter-Bereiche (u. a. Reaktorgrube, Nachbarzonen) und die Wechselwirkung der Kernschmelze mit Strukturmaterialien wie Beton und mit vorhandenem bzw. gewollt eingebrachtem Wasser mit resultierender Betonzerstörung, Druck- und Temperaturanstieg sowie Freisetzung radioaktiver Materialien (molten core concrete interaction, MCCI).

Der Austrag von Kernmaterial aus dem RDB in die Zonen des Sicherheitsbehälters kann – je nach Unfallsituation – bei hohem, mittlerem und relativ niedrigem Druck im Primärsystem auftreten. Dementsprechend ist dann auch die Kompliziertheit des Austragungs- und Verteilungsmechanismus in den Sicherheitsbehälter, der bei der geplanten Entwicklung eigener geeigneter Analysewerkzeuge berücksichtigt werden muss.

Bisher international entwickelte Modelle, Berechnungsverfahren und Korrelationen sind relativ umfangreich, insbesondere die US-amerikanischen Entwicklungen sind zahlreich, aber weitgehend bauart- bzw. anlagenspezifisch.

Da amerikanische Experimente überwiegend andere Reaktorgeometrien abdecken und fast ausschließlich für das Austragen von Kernmaterial unter hohem Druck durchgeführt wurden, sind für deutsche Verhältnisse Versuche für mittlere bis niedrige Primärkreisdrücke im Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) durchgeführt worden (DISCO-Versuche). Diese ermöglichen es, die für erforderlich gehaltenen Korrelationen und Modelle zu validieren.

Die in diesem Vorhaben entwickelten Berechnungsverfahren und Rechenmodelle ermöglichen die Anwendbarkeit von COCOSYS auf die Problematik der Schmelzefreisetzung aus dem RDB und deren Konsequenzen, und dies in Rückkopplung zusammen mit den klassischen Containmentphänomenen (Thermohydraulik, Aerosolphysik, Jodchemie usw.).

1.1 Aufbau des Abschlussberichtes

In Kapitel 2 wird zunächst ein Überblick über die wichtigsten internationalen Rechenprogramme gegeben, die bei Beginn des Projektes für die Simulation der Phänomene während der Schmelzefreisetzung in den Sicherheitsbehälter existierten (Abschnitte 2.1.1-2.1.4). Diese Rechenprogramme werden auch im Hinblick auf Ihre Vorteile und Defizite kurz charakterisiert. Aus dieser Übersicht lässt sich bereits eine starke Motivation für die Verwendung von CONTAIN als Grundlage der Modellierung für COCOYS entnehmen. Anschließend werden in Kapitel 2 vielversprechende Modelle für die Einzelphänomene

- Austrag von Schmelze aus dem RDB,
- Eintrag von in der Reaktorgrube abgelagerter Schmelze in die Gasströmung und
- Ablagerung von Schmelze aus dem luftgetragenen Feld (Trapping)

entsprechend der Arbeitspunkte 1, 2 und 3 laut Arbeitsprogramm eingehend untersucht und diskutiert (Abschnitte 2.2.1-2.2.3). Hier wird bereits eine Empfehlung für die Verwendung einzelner Modelle in COCOSYS ausgesprochen.

In Kapitel 3 werden die mit CONTAIN durchgeführten Nachrechnungen vorgestellt, wodurch gemäß der Arbeitspunkte 1, 2, 3 und 5 des Arbeitsprogramms das Verständnis der Phänomene und der Modelle ausreichend vertieft wurde, um eine gezielte Übernahme oder auch Verbesserung von Einzelmodellen motivieren zu können. Zunächst wurde die der GRS vorliegende Version von CONTAIN gegenüber einem dokumentierten Anlagenrechenfall verifiziert und anschließend wurde diese Version für die Nachrechnungen verschiedener Experimente in der Karlsruher DISCO-Anlage eingesetzt.

Die Erkenntnisse aus den Kapiteln 2 und 3 stellen damit die Grundlage dar, aufgrund derer die eigentliche Modellentwicklung durch Einbringen der entsprechenden Modelle und Gleichungen in COCOSYS (Arbeitsprogramm punkt 4) erfolgen konnte. Dieser Arbeitspunkt ist weitgehend im Fachbericht /LAN 06/ im Detail ausgeführt (dortiges Kapitel 5) und wird nur kurz im Kapitel 4 zusammengefasst.

In Kapitel 5 wird die am Ende des Vorhabens vorliegende COCOSYS-Version einer umfassenden Basisabsicherung unterzogen, die dem für die Vorhabensverlängerung

neu hinzugekommenen Arbeitspunkt 6 entspricht. Mit den Erkenntnissen aus dieser Basisabsicherung konnte die vorliegende Version von COCOSYS-DCH abschließend bewertet werden.

2 Übersicht über vorhandene Modelle und Bewertung

In diesem Kapitel wird zunächst ein Überblick über die Rechenprogramme CONTAIN, RUPUICUV, MAAP und AFDM gegeben, die zu Beginn der Entwicklungsarbeiten an COCOSYS-DCH bereits existierten und über Modelle für die Phänomene bei der Freisetzung von Schmelze aus dem RDB in den Sicherheitsbehälter verfügen.

Danach werden die wichtigen Phänomene

- Ausströmen von Schmelze und Gas aus dem RDB
- Eintrag von abgelagerter Schmelze in die Gasströmung (Entrainment)
- Ablagerung von Schmelze aus dem luftgetragenen Zustand (Trapping)

beschrieben und vielversprechende Modellansätze für diese Phänomene diskutiert. Darauf aufbauend werden Empfehlungen für die Verwendung geeigneter Modellansätze in COCOSYS ausgesprochen.

2.1 Übersicht über verfügbare Codes

2.1.1 CONTAIN

Zielsetzung der Modellierung

Die Zielsetzung der Modellierung der DCH-Phänomene in CONTAIN ist die Quantifikation der Druckbelastung auf das Containment während der Schmelzeaustragung aus dem RDB. Darüber hinaus dienen die Modelle zur Verbesserung des Verständnisses der Phänomene durch deren Anwendung auf Experimente und Extrapolation zum Großmaßstab.

Modellumfang und maßgebliche Parameter

Die folgenden Phänomene werden durch Modelle in CONTAIN abgedeckt:

- Schmelzeausstoß aus dem RDB
- Ausblasen des Gases aus dem RDB (zweiphasig: Schmelze/Gas und einphasig: Gas)

- Integrale Fraktion der Schmelze die aus der Grube ausgetragen wird
- Entrainment-Rate
- Größenverteilung der luftgetragenen Schmelzepartikel
- Transport der luftgetragenen Partikel
- Ablagerung in den Containment-Räumen
- Chemische Reaktionen der Schmelze mit Sauerstoff und Wasserdampf
- Verbrennung des Wasserstoffs
- Konvektive Wärmeübergänge
- Strahlungswärmeaustausch zwischen Schmelze und Atmosphäre/Strukturen

Die folgenden Modellparameter wurden als maßgeblich identifiziert:

- Primärkreisdruck bei RDB-Versagen und anfänglicher Lochdurchmesser
- Hauptmerkmale der Geometrien von Reaktorgrube und Primärkreislauf
- Multiplikator für die Entrainment-Rate (K_c)
- Querschnittsfläche für die Gasströmung in der Grube zur Berechnung der Entrainment-Geschwindigkeit
- Größenverteilung der Partikel
- Multiplikatoren für den Wärmeaustausch zwischen Schmelzepartikeln und Atmosphäre/Strukturen
- Ablagerungsrate (falls durch User-Input gegeben)
- Multiplikatoren für die Berechnung des Stoffaustausches bei den chemischen Reaktionen

Modellcharakterisierung

Das DCH-Modell in CONTAIN basiert auf einer Mehrfeldrepräsentation von Schmelzepartikeln im atmosphärisch getragenen Zustand. Diese werden durch eine Spannweite von Größenklassen und durch eine Liste von Stoffsorten repräsentiert. Jedem Feldelement in einer Raumzone i ist eine eigene charakteristische Größe und chemische

Stoffsorte zugeordnet. Der Transport der Schmelze wird als Strömung zwischen Kontrollvolumina unter Verwendung der Impulsgleichung inklusive der Trägheitsterme modelliert. Dabei gilt die Massen- und Energieerhaltung sowohl für das Gas als auch für die Schmelze. In diesem Modell gilt die Hypothese, dass Gas und Schmelze zusammen strömen, wobei sich deren Geschwindigkeiten durch einen Schlupf voneinander unterscheiden. Die Modelle für den RDB decken den einphasigen und den zweiphasigen Austrag von Schmelze und Gas aus dem RDB ab. Dabei wird die Schmelze aus dem abgelagerten Feld im RDB in das abgelagerte Feld in der Grube umverteilt. Der Schmelzeaustrag aus dem RDB wird durch ein Modell für die Erosion des Loches im RDB beeinflusst. Der Eintrag von abgelagerter Schmelze in das luftgetragene Feld ist nur in der Reaktorgrube möglich. Für die Berechnung der Entrainment-Rate stehen 5 Korrelationen zur Verfügung. Alternativ gibt es 8 Optionen, um die integrale Fraktion von Schmelze zu berechnen, die mit der Gasströmung aus der Reaktorgrube ausgeht. Dieser Wert repräsentiert das zeitliche Integral der ausgetragenen Masse, die ihrerseits zeitschrittgenau durch die Verwendung von Korrelationen für die Rate und Abgleich mit dem Integral berechnet wird. Die Größe der Schmelzepartikel wird durch Benutzervorgabe oder durch das Tropfengrößenmodell nach Weber ermittelt. Bei der Ablagerung können 4 verschiedene Ansätze zur Ermittlung einer Ablagerungsrate verwendet werden:

1. Benutzervorgabe der Ablagerungsrate,
2. Herabfallen durch Gravitation,
3. Flugzeit bis zum Aufprall auf die erste Struktur und Herabfallen sowie
4. sequentielle Flugzeiten bis zum Aufprall auf die nächste Struktur und Kutateladze-Kriterium für Weiterflug

Das Chemiemodell umfasst 4 Teile: Der erste Teil beinhaltet die Modellierung des Transports von Gasen (Oxidationsmittel) an die Oberfläche der Schmelzepartikel inklusive der Berechnung einer effektiven Reaktionszeit (Zeitkonstante) für Metalle basierend auf einer gaseitigen Begrenzung des Stofftransports. Der zweite Teil repräsentiert den tropfenseitigen Transport basierend auf der Diffusion des Reduktionsmittels innerhalb des Tropfens. Hier wird wiederum eine Reaktionszeit (Zeitkonstante) für die Reaktion bei tropfenseitiger Begrenzung des Stofftransports berechnet. Im dritten Teil des Chemiemodells werden die gaseitig und tropfenseitig dominierten

Reaktionsraten kombiniert und für die Bestimmung der jeweiligen Metallmenge, die an den Reaktionen teilnimmt, wird eine Hierarchie von Reaktionsgleichungen durchlaufen. Der vierte und letzte Teil besteht in der Rekombination von Wasserstoff, der durch die chemischen Reaktionen produziert wird.

Die modellierten Wärmeübergänge umfassen konvektive (über geeignete Nusselt-Korrelationen) und radiative (über einen einfachen Graustrahler-Ansatz) Wärmeübergänge zwischen Schmelze und Atmosphäre bzw. Strukturen.

Die DCH-Modelle in CONTAIN stellen einen schlüssigen Ansatz zur Simulation der DCH-Phänomene dar. Die Strategie der Modellierung folgt dabei soweit wie möglich mechanistischen Grundzügen, was auch der Philosophie von COCOSYS entspricht. Die Umsetzung der Kopplung der Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter mit den DCH-Prozessen funktioniert einwandfrei und ist leicht verständlich. Die numerische Robustheit des Codes ist ausreichend. Die in CONTAIN vorhandenen Modelle für DCH sind aus diesen Gründen eine gute Basis für die Entwicklung von COCOSYS-DCH.

Es gibt aber auch Probleme in den Modellen in CONTAIN, die zu einem Großteil in der Vielfalt von Modellparametern liegen, was zu einer nahezu unendlichen „Spielwiese“ für die Suche nach geeigneten Werte-Konstellationen führt. Die in CONTAIN zur Verfügung stehende, sehr detaillierte Modellierung erfordert eine große Anzahl von Parametern – teils Materialeigenschaften, teils aus der Erfahrung heraus wählbare Faktoren – die vom Anwender beigestellt werden müssen. Die Festlegung dieser Eingabegrößen ist äußerst schwierig, da kleine Veränderungen teilweise markante Auswirkungen auf thermodynamische und auch chemische Vorgänge haben. Es wurde schon eine große Anzahl von Parametervariationen durchgeführt, aber eine klare Voraussage der Folgen einer Veränderung ohne Rechnung ist für viele Fälle und Parameter heute noch nicht möglich. Dies betrifft insbesondere die gleichzeitige Veränderung von mehr als einem Parameter.

Das GFT-Modell zur Berechnung der Ablagerungsrate ist für kleine Geometrien nicht anwendbar. Das Ausströmen von Schmelze aus dem RDB hat keinen Einfluss auf den RDB-Druck. Das zweiphasige Ausströmen von Schmelze und Gas aus dem RDB berücksichtigt keine innere Reibung.

2.1.2 RUPUICUV (in ASTEC)

Zielsetzung der Modellierung

Ziel des Moduls RUPUICUV /CRA 03/ in ASTEC ist es, die Entladung von Corium in die Reaktorgrube nach Durchbruch des RDB zu berechnen sowie die Massenströme von heißen Gasen und ausgetragener Schmelze in den Sicherheitsbehälter zu bestimmen.

Modellumfang und maßgebliche Parameter

RUPUICUV umfasst folgende Detailmodelle:

- Einphasiges Ausströmen aus dem RDB in die Grube für einen festen oder sich aufweitenden Lochdurchmesser
- Aufweitender Lochdurchmesser im RDB als Folge der Erosion durch den Schmelzejet
- Einphasiges Ausströmen von Dampf aus dem RDB und Druckentlastung des Primärkreises (Blowdown)
- Oxidation des Coriums in der Reaktorgrube durch den strömenden Dampf und Wasserstofffreisetzung
- Eintrag von Corium als kugelförmige Teilchen (monodispers) in die Gasströmung und Austrag der Schmelze aus der Grube in den Sicherheitsbehälter
- Wärmeübergang zwischen Schmelze und Gas
- Wasserstoffverbrennung

Die hauptsächlichen Modellparameter sind:

- Primärkreisdruck bei RDB-Versagen und anfänglicher Lochdurchmesser
- Masse und Zusammensetzung der im untern Bereich des RDB angesammelten Kernschmelze
- Hauptmerkmale der Geometrien von Reaktorgrube und Primärkreislauf
- Dicke und Material der RDB-Wand

- Physikalische Stoffeigenschaften der Kernschmelze
- Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Schmelzepartikeln und dem Gas im Sicherheitsbehälter
- Charakteristische Flugzeit der Partikel im Sicherheitsbehälter
- Beginn und Dauer der Wasserstoffverbrennung

Modellcharakterisierung

Der im Integralcode ASTEC enthaltene Modul RUPUICUV beschreibt die Auswirkungen einer Kernschmelzefreisetzung in den Sicherheitsbehälter. Dabei ist die Modellierung erheblich einfacher als die in CONTAIN und geht von einer Reihe von Voraussetzungen aus, die die Absicherung der mit RUPUICUV erzielten Ergebnisse fraglich machen.

Der Massenstrom der Schmelze am RDB-Leck ist eine Funktion der Druckdifferenz zwischen RDB und Grube, der Dichte der Schmelze sowie des Lochdurchmessers (Blendengleichung). Der Primärkreisdruck wird als konstant während des Ausstoßes von Schmelze angenommen. Die Aufweitung des Lecks durch Erosion basiert auf dem Wärmeübergang vom Schmelzestrahle zum RDB.

Der Massenstrom des Dampfes am RDB-Leck wird unter der Annahme einer isothermen Expansion des Fluids im Primärkreislauf berechnet. Es sind im RDB und in der Reaktorgrube nur Satttdampfbedingungen möglich. Der tatsächlich meist vorliegenden Überhitzung kann nicht Rechnung getragen werden. Damit wird in vielen Fällen die Ausströmrates des Dampfes falsch berechnet, was wieder Auswirkungen auf Entrainment und dampfbedingtem Druckaufbau in der Reaktorgrube hat.

Die Ausströmung aus dem RDB berücksichtigt nur einphasige Ausströmregimes von ausschließlich Schmelze und anschließend ausschließlich Dampf, das in Realität auftretende Regime einer Gemischausströmung wird also vernachlässigt.

Die optional einzubeziehende Oxidation des Coriums wird unter Vernachlässigung von kinetischen Vorgängen angenähert und beschränkt sich auf die Reaktion mit dem Wasserdampf. Die Reihenfolge in der Priorität der Oxidation lautet 1) Zr, 2) Cr und zuletzt 3) Fe.

Im Falle der nach oben offenen Geometrie der Reaktorgrube (für europäische Anlagen relevant) wird die Partikelgröße aus der kritischen Weberzahl und der Austrag von Schmelze aus der Grube basierend auf den Anfangsbedingungen und der Reaktorgeometrie berechnet. Da eine Korrelation für den integralen Wert der ausgetragenen Masse verwendet wird, muss die Kinetik dieser Austragung durch ein vereinfachtes Modell angenähert werden.

Das Entrainment – hier der Anteil der in der Reaktorgrube befindliche Teil der Schmelze, der in die übrigen Zonen des Sicherheitsbehälter gelangt – wird anhand einer auf koreanischen Experimenten basierenden Korrelation einmal zu Beginn der Rechnung ermittelt und dann mittels einer thermodynamischen Näherung auf die Dampfauströmzeit verteilt.

Der Wärmeübergang zwischen Schmelzepartikeln und dem Gas im Sicherheitsbehälter wird durch Eingabeparameter beeinflusst.

Ebenso wird die Verbrennung des Wasserstoffs durch wichtige Modellparameter gekennzeichnet.

RUPUICUV ist an den Experimenten der Surtsey-Anlage erfolgreich überprüft. Allerdings hängen die Ergebnisse stark von geometrischen Voraussetzungen eines Anlagentyps ab, wofür in jedem Fall eine Anpassung der Parameter nötig ist. Auch bei RUPUICUV ist die Anzahl der einflussreichen Benutzerparameter sehr hoch. Eine Schwäche wird in dem vereinfachten Modell für die Kinetik des Entrainments gesehen.

2.1.3 AFDM

Zielsetzung der Modellierung

Zielsetzung der Modelle in AFDM /WIL 01/ ist eine zweidimensionale Simulation von DCH-Phänomenen, die real in einer 3D-Geometrie ablaufen, unter Verwendung von CFD-Methoden. In der 2D-Modellierung in AFDM müssen alle relevanten Strömungspfade und Volumina, die zu den DCH-Vorgängen beitragen, entsprechend repräsentiert sein. Ferner sollen mithilfe der Anwendung von AFDM auf Experimente die relevanten physikalischen Prozesse während der Schmelzeaustragung aus dem RDB identifiziert und quantifiziert werden.

Modellumfang und maßgebliche Parameter

Der DCH-Teil in AFDM umfasst die Modelle für folgende Phänomene:

- Die Filmbildung von Schmelze an den Wänden der Reaktorgrube und die Eintragung von Schmelze aus diesem Film in die Gasströmung
- Wärmeübergang von dem Schmelzefilm auf die Wände der Reaktorgrube, inklusive Krustenbildung und Erosion der Strukturen
- Die Ventile, die im Experiment zwischen Dampfkumulator und Druckbehälter angeordnet sind sowie die Lecköffnung am Boden des RDB
- Die Erosion der Lochwand und Vergrößerung des Lochdurchmessers als Folge des Wärmeübergangs zwischen Schmelze und RDB-Wand
- Die Fragmentation des Schmelzestrahls am Leckausgang
- Die chemische Wechselwirkung zwischen Dampf und Schmelze
- Die Produktion von Wasserstoff im Sicherheitsbehälter im Zuge der Wechselwirkung zwischen Wasserdampf und Schmelze
- Die Verbrennung von Wasserstoff in der sauerstoffreichen Atmosphäre des Sicherheitsbehälters und die Übertragung von Wärme auf die Strukturen im Sicherheitsbehälter

Modellcharakterisierung

Bei AFDM handelt es sich um einen CFD-basierten Rechencode für Thermo-Hydraulik-Phänomene, der imstande ist, transiente, kompressible und mehrphasige Vorgänge zu simulieren. Mit AFDM können zylindersymmetrische Geometrien in zwei Dimensionen behandelt werden. Es wird das Verhalten zweier Fluide simuliert: Die flüssige Schmelze (Wasser oder flüssige Metalle und Oxide inklusive Feststoffe) und das Gas, welches aus Wasserdampf, Wasserstoff, Sauerstoff und Stickstoff besteht. Drei Geschwindigkeitsfelder decken alle Strömungsbereiche ab (Gas, luftgetragene Schmelze, flüssige Schmelze). Die Strömung der Schmelze aus dem RDB wird durch die stromabwärts/stromaufwärts gerichteten Bedingungen bestimmt.

Schwächen von AFDM werden

- im großen rechnerischen Aufwand aufgrund der CFD-ähnlichen Modellanlage,
- in der benötigten Übertragung dreidimensionaler, nicht axialsymmetrischer Details auf eine zweidimensionale Geometrie,
- in der im Input vorzugebenden Rate für die Wasserstoffverbrennung und
- in dem nicht ausreichend überprüften Modell für den Wärmeübergang durch Strahlung zwischen stehender Flamme bei der Wasserstoffverbrennung und den Wandstrukturen.

identifiziert.

2.1.4 MAAP

Zielsetzung der Modellierung

Zielsetzung der DCH-Modelle in MAAP /EPR 99/ ist die Bestimmung des integralen Anteils an Schmelze, der in den Sicherheitsbehälter ausgetragen wird, sowie die Berechnung der Zeiträume für den Eintrag der Schmelze in die Gasströmung und deren Austrag in den Sicherheitsbehälter.

Modellumfang und maßgebliche Parameter

Die DCH-Modelle in MAAP konzentrieren sich auf folgende Phänomene:

- Teilerstarrung der Schmelze bei Erstkontakt mit Wasser in der Grube (Quenching)
- Kim's Korrelation /KIM 95/ für die Bestimmung des integralen Anteils der in den Sicherheitsbehälter ausgetragenen Schmelze
- Ein Modell für das De-Entrainment repräsentiert mögliche Ablagerungs-/Einfangprozesse von luftgetragener Schmelze
- Die Berechnung der Energie, die als Eintrag in den Sicherheitsbehälter verfügbar ist und welche unter der Annahme eines thermischen Gleichgewichtes der insgesamt aus der Grube in den Sicherheitsbehälter ausgetragenen Schmelzemasse mit dem abgeblasenen Dampf und mit den vor dem DCH in den Räumen vorhandenen Gasen in Grube und unteren Räumen angenähert wird.
- Der Zeitraum für diesen Energietransport (Entrainment-Zeit)

- Der Zeitraum für die Spaltproduktfreisetzung (Entrainment-Zeit)
- Ein optionales Modell für das Strahlverbrennen von H₂ mit hoher Intensität ist verfügbar

Als Parameter mit großem Einfluss in den Modellen in MAAP werden die folgenden Größen gesehen:

- Effizienz des De-Entrainments
- Kritische Weber-Zahl
- Koeffizienten des Entrainment-Kriteriums
- Faktor für die Strahlverbrennung von H₂ während des DCH
- Metallanteil in der Schmelze, der während des Schmelzeaustrags aus dem RDB oxidiert wird
- Modellparameter für das Diffusionsvermögen von Spaltprodukten

Modellcharakterisierung

Das Modell wird benutzt, sobald der Blowdown einsetzt nachdem die Kernschmelze den RDB verlassen hat. Das Modell nimmt einen Sperrstrom (choked flow) von Gas mit isentroper Expansion an.

Der erste Teil des Modells umfasst die Berechnung für die Entrainment-Zeit, die Berechnung der insgesamt ausgetragenen Schmelzemasse, die Berechnung der Menge der freigesetzten Spaltprodukte und die Berechnung der Energiemenge, die während des DCH in den Sicherheitsbehälter eingetragen wird.

Der zweite Teil bringt die entsprechenden Raten für Masse und Energie als Quellen in den Erhaltungsgleichungen für den Raum des Sicherheitsbehälters ein. Dies erfolgt bis zum Ende der Entrainment-Zeit.

Die Schwächen des Modells bestehen darin, dass die Energie der ausgetragenen Schmelze nur der Atmosphäre eines einzigen, ausgewählten Raumes zugeführt wird, der mit der Reaktorgrube über einen speziellen Strömungsweg in Verbindung steht. Das Modell für den Austrag von Schmelze aus dem Sicherheitsbehälter ist wie bei al-

len Rechenprogrammen sehr unsicher im Bezug auf die geometrischen Eigenschaften der Anlage, die von einigen wenigen Parametern abgedeckt werden. Die Extrapolation von Experimenten auf Reaktorgeometrien ist daher sehr unsicher.

2.2 Bewertung von Modellen für Einzelphänomene

2.2.1 Beschreibung der Ausströmung aus dem RDB

Von großem Einfluss auf die Phänomenologie ist das Zeitverhalten der Ausströmung von geschmolzenem Kernmaterial aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen. Nach dem im Bereich der unteren Bodenkalotte angenommenen Versagen beginnt das Ausströmen geschmolzenen Kernmaterials in die Reaktorgrube. Der im Primärsystem und im RDB bei Auftreten einer Bruchöffnung herrschende Druck wird zunächst ausschließlich das im RDB-Bodenbereich angesammelte Kernmaterial durch die entstandene Öffnung herausdrücken (Phase 1) und in eine Phase der weiteren Ausströmung von Kernmaterial zusammen mit einem Wasser(dampf)-/Gas-Gemisch in die Reaktorgrube übergehen (Phase 2). In einer dritten Phase werden dann überwiegend bzw. fast ausschließlich Gase wie z. B. Wasserdampf und H_2 aus dem System ausströmen.

Die Versagensart des RDB in seinem unteren Bereich kann für diese Abläufe und die daraus resultierenden Belastungen von Bedeutung sein. Ein seitliches Versagen kann die Beladung der Strukturflächen der Reaktorgrube mit einem Schmelzefilm und damit auch das Entrainment in anderer Weise beeinflussen als ein zentrales Leck. Da bislang jedoch davon ausgegangen wird, dass ein zentrales Leck maximale integrale Auswirkungen einer Schmelzefreisetzung bewirkt, wird in den verfügbaren Experimenten praktisch ausschließlich die Freisetzung bei einem zentralen Leck unten im RDB untersucht. Eine experimentelle Absicherung dieser Erwartung wie auch eine Konkretisierung der lokalen Belastungen bei unsymmetrischem, lateralem Ausströmen steht zurzeit allerdings noch aus.

Unter Einwirkung der austretenden heißen Schmelze kann sich die entstehende Öffnung im RDB-Boden vergrößern (Anschmelzen, Erosion). Neben der Kernschmelze tritt auch ein Gasgemisch aus Wasserdampf, Wasserstoff und anderen Gasen aus dem RDB in die Reaktorgrube aus.

Der Ausströmprozess von Schmelze und Dampf aus dem RDB wird in drei Phasen unterteilt:

- Einphasige Ausströmung (nur Schmelze)

Wenn der RDB unter hohem Druck versagt, wird Schmelze strahlförmig (als „Jet“) durch die Bruchstelle ausströmen. Der Strömungsprozess wird als einphasig bezeichnet, da zunächst nur Schmelze aus dem Druckbehälter austritt. Der Jet tritt meist nicht als säulenförmiger Strahl aus, sondern er zerreißt und fragmentiert weitgehend, schon vor dem Auftreffen auf die Bodenstrukturen.

Der bei dem Zerfall des Schmelzejets beobachtete Mechanismus der hydraulischen Zerstäubung kann auf die Weber-Fragmentierung zurückgeführt werden. Auf den Tropfen oder Strahl einwirkende Kräfte werden hierbei größer als die Oberflächenspannung. Instabilitäten werden verstärkt und erzeugen Flüssigkeitsstrahlen, die durch die Geschwindigkeit des Jets relativ zum Gas abreißen und in Tropfen zerfallen. Durch das Auftreffen der Schmelze oder der bereits gebildeten Tropfen bzw. Partikel auf den Boden der Reaktorgrube oder ein anderes Hindernis erfolgt eine weitere Fragmentierung.

- Zweiphasige Ausströmung (Schmelze und Dampf)

Mit abnehmender Schmelzemenge im RDB – je nach Größe der Öffnung im RDB-Boden – wird ein Zustand erreicht, an dem die Schmelzeüberdeckung der Bruchstelle dem Druck der Atmosphäre darüber nicht mehr standhalten kann. Dann beginnt der so genannte "Blowthrough", d. h. das Durchströmen von Gasen und Dampf durch die restliche Schmelze. Nach dem zuvor besprochenen einphasigen Schmelzejet strömen nun Schmelze und gasförmige Bestandteile gleichzeitig aus. Es bildet sich eine mehr oder weniger dicke Schicht flüssiger Schmelze auf den Strukturoberflächen der Reaktorgrube.

Die Dampf- und Gasströmung aus dem Reaktordruckbehälter durch die Grube führt zu einer weiteren Fragmentierung luftgetragener Schmelze bis hin zu dem für Aerosole relevanten Größenbereich sowie dem Ablösen weiterer Schmelzepartikel aus den bereits auf den Strukturen abgelagerten flüssigen Schmelzeschichten. Die vergrößerte Oberfläche begünstigt Wechselwirkungen der Schmelze und ihrer Bestandteile mit den atmosphärischen Gasen und dem Dampf, die dann eine Energiezufuhr an Atmosphäre und Strukturen bewirkt.

- Einphasiges Abblasen von Gas und Dampf

Nach Ausstoß des gesamten Schmelzematerials aus dem RDB endet die zweiphasige Ausströmung und der restliche Dampf und die verbliebenen Gase aus

dem Druckbehälter und dem angeschlossenen Primärsystem strömen aus. Der stark turbulente Ausströmprozess bewirkt eine heftige Vermischung von in der Reaktorgrube abgelagerter Schmelze und Dampf und es kommt zu Verwirbelungen innerhalb der Reaktorgrube.

Der Mitriss (das Herausreißen) von Tropfen aus den Oberflächen dickerer Flüssigkeitsschichten oder aus Flüssigkeitspools in die Grubenatmosphäre hinein wird als Entrainment bezeichnet. Der über die Flüssigkeit strömende Dampf verursacht Wellen an der Oberfläche. Diese wachsen an, schließlich kann die Oberflächenspannung der Flüssigkeit nicht mehr den von außen einwirkenden Kräften standhalten, Flüssigkeitstropfen werden abgelöst bzw. heraus- und von der Dampfströmung mitgerissen.

Mit der Gasströmung in benachbarte Raumbereiche werden auch in der Atmosphäre getragene Schmelzetropfen mittransportiert und in andere Räume des Sicherheitsbehälters ausgetragen.

Unter den existierenden Rechenprogrammen, die über für COCOSYS geeignete null-dimensionale Ansätze zur Beschreibung der Ausströmung von Schmelze und Gas aus dem RDB verfügen, weist einzig CONTAIN eine detaillierte Betrachtung der drei oben beschriebenen Strömungsphasen auf, die im folgenden beschrieben wird:

2.2.1.1 Einphasiges Ausströmen von Schmelze aus dem RDB

Der einphasige Volumenstrom \dot{V} von Schmelze aus dem RDB kann vergleichsweise einfach unter Anwendung der Bernoulli-Gleichung und Einbezug einer Ausflusszahl C_{dis} (≈ 0.6) für den Öffnungsquerschnitt A_h des RDB-Loches berechnet werden:

$$\dot{V} = C_{dis} A_h \sqrt{2 \Delta P / \rho_d} \quad (2-1)$$

Die Geschwindigkeit der Schmelze wird dabei mit der Druckdifferenz ΔP zwischen RDB und Grube und der Gemischdichte ρ_d der Schmelze nach

$$v_d = C_{dis} \sqrt{2 \Delta P / \rho_d} \quad (2-2)$$

berechnet. Aus einem per Tabellenvorgabe im RDB verfügbaren Schmelzevolumen kann dann mit Gl. (2-1) eine Übertragung des Volumens in die Reaktorgrube berech-

net werden. Die komplexen Phänomene, die mit dem Verhalten des Schmelzestrahls in der Reaktorgrube zusammenhängen (energetische Interaktionen mit der Atmosphäre sowie mit den Betonstrukturen, Fragmentation, etc.) werden in CONTAIN nicht betrachtet. Die aus dem RDB ausgestoßene Schmelzemasse wird zunächst auf dem Boden der Grube in Form einer monodispersen Schüttung (unter Benutzervorgabe des charakteristischen Durchmessers) angesammelt.

2.2.1.2 Einsetzen des Blowthrough

In /PIL 85, PIL 92/ werden die in CONTAIN verfügbaren Ansätze zur Berechnung der kritischen Schmelzehöhe im RDB diskutiert, bei deren Unterschreiten der Durchstoß von Gas durch das Loch im RDB erfolgt.

Nach Skalierungsanalyse und Anwendung des Buckingham Pi Theorems wird demnach die kritische Schmelzehöhe h_b für das Einsetzen des Blowthrough nach Entdimensionierung mit dem Leckdurchmesser d_h allgemein durch die folgenden Größen bestimmt: Froude-Zahl Fr , Reynolds-Zahl Re , Bond-Zahl Bo , Dichteverhältnis ρ_g/ρ_d , Verhältnis von Lochdurchmesser zu Behälterdurchmesser d_h/d_{RPV} , Zirkulationszahl N_T sowie die Geometrie des Behälters. Für DCH-Situationen in Reaktorgeometrien erreichen Re , Bo und das Dichteverhältnis ρ_g/ρ_d extreme Werte, bei denen die Effekte von Viskosität (im Falle der Reynolds-Zahl) bzw. von Oberflächenspannung (im Falle der Bond-Zahl) bzw. der Dichte vernachlässigbar sind. Auch der Einfluss von Wirbeln kann nach /PIL 92/ für Reaktorsituationen vernachlässigt werden, sodass die Zirkulationszahl ebenfalls aus der Liste der Einflussgrößen eliminiert werden kann. Es bleibt

$$\frac{h_b}{d_h} = f\left(Fr; \frac{d_h}{d_{RPV}}; \text{Geometrie}\right) \quad (2-3)$$

Es gibt in der Literatur einige Untersuchungen, in denen für horizontale Rohre sowie für Zylindergeometrien Korrelationen der Form

$$\frac{h_b}{d_h} = C_1 Fr^{C_2} \quad (2-4)$$

abgeleitet worden sind. Die Autoren in /PIL 92/ empfehlen dagegen den von Gluck et al. im Jahre 1966 abgeleiteten Ausdruck

$$\frac{h_b}{d_h} = 0,43 \frac{d_{RPV}}{d_h} \tanh\left(Fr^{1/2} \frac{d_h}{d_{RPV}}\right), \quad (2-5)$$

der im Unterschied zu anderen Arbeiten sowohl für Zylindergeometrien wie auch für Halbkugelgeometrien gültig ist und das nach der Skalierungsanalyse wichtige Verhältnis der Durchmesser d_h/d_{RPV} enthält. Für sehr kleine d_h/d_{RPV} geht Gl. (2-5) über in

$$\frac{h_b}{d_h} = 0,43 Fr^{1/2}, \quad (2-6)$$

was der zuvor genannten allgemeinen Funktion der Gl. (2-4) entspricht.

Anwendung auf die Versuche der DISCO-Serie

In den DISCO-Experimenten beim Forschungszentrum Karlsruhe wurden in den heißen Versuchen der „H“-Reihe sowie in den kalten Experimenten der „C“-Reihe die Zeiten bis zum Einsetzen des Blowthrough ermittelt. Diese wurden aus einer Änderung der Steigung in der Druckentlastungskurve dP/dt für den Druckbehälter und für die Grube bestimmt /KRE 06/.

Das folgende einfache Verfahren erlaubt eine Anwendung der Gl. (2-5) auf die DISCO-Versuche zum Vergleich der experimentell ermittelten Zeit bis zum Einsetzen des Blowthrough mit theoretischen Werten.

Aus der bekannten Geometrie des Reaktordruckbehälters in den DISCO-Versuchen kann eine eindeutige Zuordnung zwischen Füllhöhe h im RDB und dem entsprechenden Volumen V ermittelt werden. In den DISCO-C Versuchen /KRE 06/ entspricht die Geometrie der eines Kugelabschnittes (unten) mit aufgesetztem Zylinder. In den DISCO-H Versuchen /MEY 04/ ähnelt die Geometrie der eines flachen Kreiskegelstumpfes mit aufgesetztem Zylinder (Abb. 2-1).

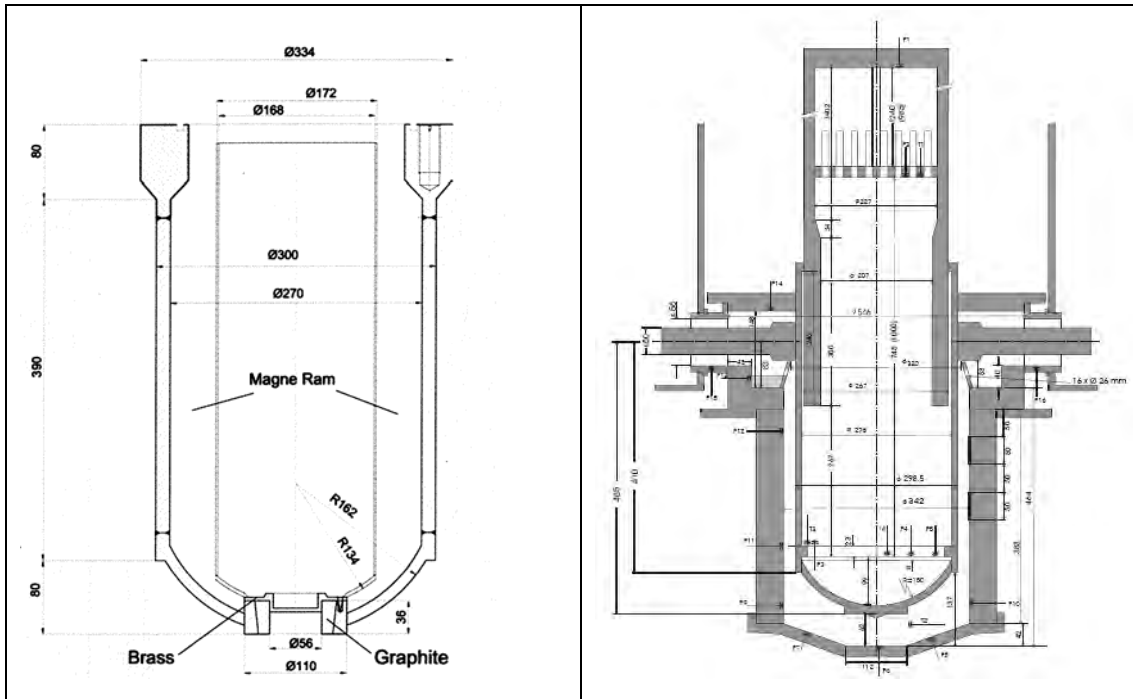


Abb. 2-1: Geometrien der Reaktordruckbehälter in DISCO-H (links) und DISCO-C (rechts).

Die Ausflussgeschwindigkeit der Modellschmelze zur Berechnung der Froude-Zahl wird wie mit Gl. (2-2) berechnet, aber entsprechend der Ableitung der Korrelation (2-5) ohne Berücksichtigung der Ausflusszahl C_{dis} :

$$v_d = \sqrt{\frac{2(P_{RPV} - P_{cav})}{\rho_d}} \quad (2-7)$$

$$Fr = \frac{v_d}{\sqrt{g d_h}} \quad (2-8)$$

Mit der so berechneten Froude-Zahl und den geometrischen Parametern d_h und d_{RPV} der DISCO-Experimente lassen sich mit Gl. (2-5) die kritischen Füllhöhen h_b für das Einsetzen des Blowthrough ermitteln. Diese liegen für die heißen und kalten DISCO-Experimente zwischen etwa 5,5 cm und 11,5 cm. Aus einer Abbildung $V \leftrightarrow h$ lässt sich ein entsprechendes Schmelzevolumen $V_b(h_b)$ im RDB zuordnen. Mit der Anfangsmasse M_0 der Modellschmelze und deren Dichte ρ_d wird die Differenz ΔV_b zwischen anfänglichem Volumen im RDB V_0 und kritischem Volumen im RDB V_b berechnet:

$$\Delta V_b = V_0 - V_b(h_b) = \frac{M_0}{\rho_d} - V_b(h_b) \quad (2-9)$$

Unter Verwendung der anfänglichen Ausflussgeschwindigkeit aus Gl. (2-2) – jetzt unter Berücksichtigung der Ausflusszahl C_{dis} – kann daraus eine charakteristische Ausströmzeit bis zum Erreichen des kritischen Füllstandes im RDB angenähert werden:

$$\Delta t_b \approx \frac{\Delta V_b}{C_d A_h \sqrt{2 \Delta P / \rho_d}} \quad (2-10)$$

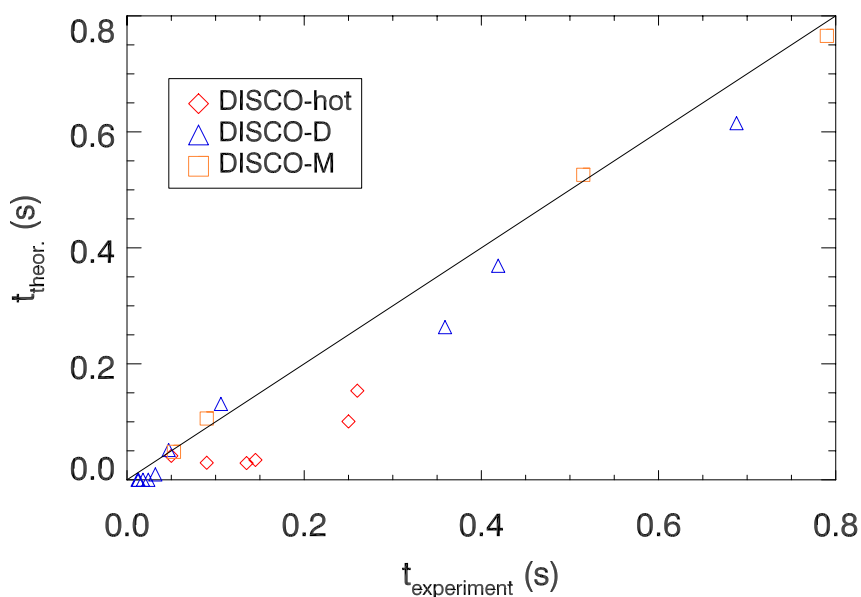


Abb. 2-2: Vergleich zwischen theoretischen (basierend auf der Gluck-Korrelation Gl. (2-5)) und experimentellen Zeiten bis zum Eintreten des Blowthrough bei den DISCO-Versuchen.

Die Abb. 2-2 zeigt einen Vergleich der experimentellen Zeiten mit den theoretisch ermittelten Zeiten für das Einsetzen des Blowthrough. Daraus ist zu sehen, dass die experimentellen Zeiten für die kalten Versuche der DISCO-C Reihe mit Wasser und der M-Reihe mit einer Bismut-Legierung ($\rho_d = 9104 \text{ kg/m}^3$) als Schmelzesimulation recht gut wiedergegeben werden. Eine leichte Unterschätzung der Zeitdauer wäre prinzipiell zu erwarten, da die Froude-Zahl sowie die Ausströmgeschwindigkeit mit maximaler Druckdifferenz zwischen RDB und Reaktorgrube sowie eine ideale Ausflusszahl für scharfkantige Öffnungen ($C_{dis} = 0,6$) angesetzt worden sind. Für die heißen DISCO-Versuche mit Thermitschmelze als Schmelzesimulation wird dagegen eine stärkere Unterschätzung registriert (s. auch Tab. 2-1). Die Ursache hierfür konnte bis-

lang nicht eindeutig geklärt werden. Folgende Details müssen in Betracht gezogen werden:

- Die Abschätzung nach Gl. (2-10) wurde für die DISCO-H-Versuche mit einer Mischdichte ρ_d von Aluminiumoxid und Eisen durchgeführt, die bei etwa 5000 kg/m³ liegt. Aufgrund der Abhängigkeit von $\Delta t_b \propto M/\sqrt{\rho_d}$ würde eine bessere Approximation der vergleichsweise großen experimentellen Ausflusszeit Δt_b mit einer verringerten Dichte der Schmelze gelingen. Es gibt in diesem Zusammenhang Hinweise auf einen anfänglichen Gasgehalt in der Thermiterschmelze /WIL 06/, die diese Hypothese unterstützen. Andererseits müsste prinzipiell eine Schichtung der Thermiterschmelze im RDB und damit ein sequentielles Ausströmen von zunächst Eisen (mit höherer Dichte) und danach Aluminiumoxid (mit niedrigerer Dichte) zu erwarten sein. Liegt der Zeitpunkt des Blowdown noch im Bereich der Ausströmung von Eisen, würde die höhere Dichte den Zeitpunkt des Blowdown nach Gl. (2-10) bestimmen, was der eingangs genannten Hypothese zuwider läuft.
- Ein möglicher Einfluss des Dichteverhältnisses ρ_g/ρ_d kann angesichts der guten Übereinstimmungen für die DISCO-M-Versuche mit der gegenüber der Thermiterschmelze schweren Bismut-Legierung ausgeschlossen werden. Dies bestätigt die eingangs in Gl. (2-3) genannten Abhängigkeiten.
- In den DISCO-H-Versuchen gibt es zu Beginn eine endliche Zeit, in der der Verschlussstopfen des RDB erst aufgeschmolzen wird, bevor Schmelze aus dem RDB austreten kann. Der Auslegungs-Lochquerschnitt steht daher erst kurze Zeit später (~ 70 ms) zur Verfügung. Dieser Sachverhalt stellt bislang die wahrscheinlichste Teil-Ursache für die Unsicherheit dar. Eine detaillierte Diskussion hierzu folgt in Abschnitt 2.2.1.3.
- Das Ausströmen einer heißen Schmelze mit der Möglichkeit von Erstarrung an kalten Strukturen sowie Erosion der Düse ist deutlich komplexer, als in der Situation der C-Versuche mit Wasser bzw. in der der M-Versuche mit kaltem Metall. Mit einer verringerten Ausflusszahl von etwa $C_{dis} = 0,3$ würde sich hier eine bessere Approximation der H-Experimente ergeben. Hinweise für solch niedrige Ausflusszahlen konnten jedoch in bekannten Arbeiten zu ähnlichen Problemstellungen (z. B. Schmelzeausbreitungsversuche) bislang nicht gefunden werden.

Tab. 2-1: Vergleich zwischen theoretischen (basierend auf der Gluck-Korrelation Gl. (2-5)) und experimentellen Zeiten bis zum Eintreten des Blowthrough bei den heißen DISCO-Versuchen.

DISCO-Versuch	t_b Experiment (s)	t_b Gluck Korrelation (s)
H01	0,050	0,041
H02	0,090	0,029
H03	0,135	0,029
H04	0,145	0,034
H05	0,260	0,154
H06	0,250	0,101

Eine ähnliche Überprüfung der Gluck-Korrelation in /KRE 06/ anhand der DISCO-C Versuche wie die zuvor durchgeführte zeigt vergleichbare Abweichungen zwischen Experiment und Rechnung wie die hier gefundenen.

Zusammen mit den erfolgreichen Nachrechnungen der DISCO-C Versuche mit dem Reencode CONTAIN konnte so bestätigt werden, dass die Korrelation nach Gluck Gl. (2-5) nach derzeitigem Kenntnisstand einen ausreichenden Ansatz zur Berechnung des Blowthrough-Kriteriums darstellt.

Dieser soll im Rahmen der Modellentwicklung für COCOSYS aufgegriffen werden.

2.2.1.3 Abschätzung der Zeitdauer bis zum vollständigen Aufschmelzen des RDB-Lecks

Als eine Unsicherheit bei der Randbedingung der heißen DISCO-Versuche wurde zuvor das Aufschmelzen der Messing-Platte als Verschluss des RDB-Loches genannt. Dies soll hier näher untersucht werden:

In Abb. 2-3 ist der Druckverlauf im RDB in den ersten Sekunden bei dem Versuch H04 zu erkennen. Das Loch im RDB öffnet sich zu dem Zeitpunkt, an dem die Druckentlastung im RDB beginnt ($t = 0$ s). Es folgt der Zeitraum der einphasigen Ausströmung von Schmelze bis zu dem Beginn einer stärkeren Druckentlastung bei Einsetzen des Blowthrough ($t_b = 0,145$ s /MEY 04/). Unter der Annahme einer homogenen Schmelze und adiabaten, isothermen Bedingungen der RDB-Atmosphäre kann mit der idealen Gasgleichung

$$\frac{P V}{T} = \text{const.} \Rightarrow \frac{dP}{dt} V + \frac{dV}{dt} P = 0$$

die Annäherung an die Druckentlastungskurve mit Hilfe

$$\frac{dP}{dt} = - \frac{dV}{dt} \frac{P}{V} = -C_{\text{dis}} A_h \sqrt{\frac{2 \Delta P}{\rho_d}} \frac{P}{V} \quad (2-11)$$

abgeleitet werden.

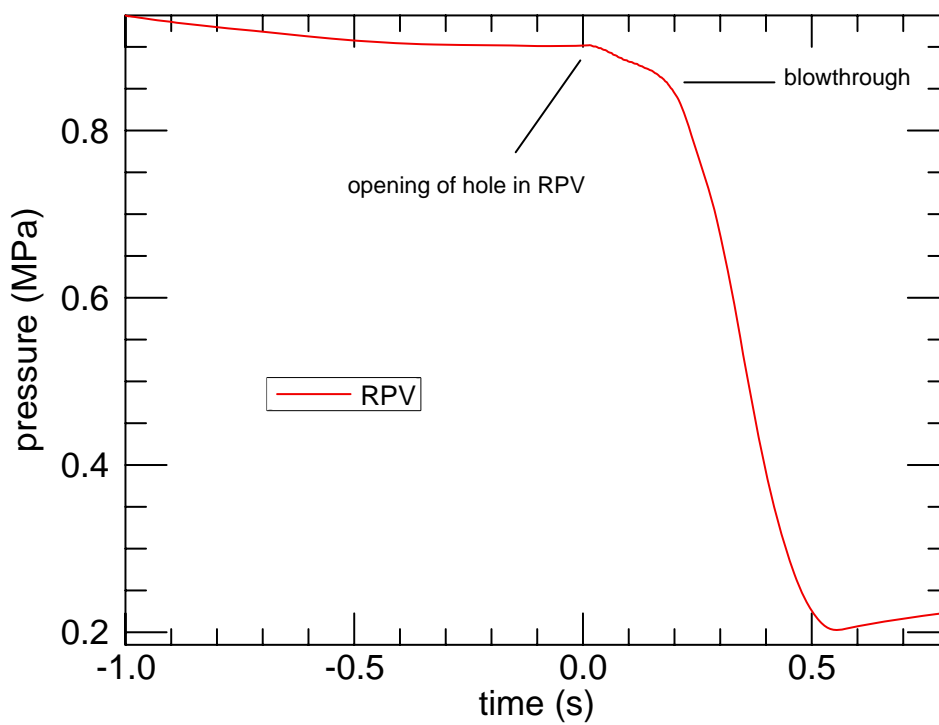


Abb. 2-3: Druckverlauf im RDB der DISCO-Versuchsanlage bei dem Versuch H04.

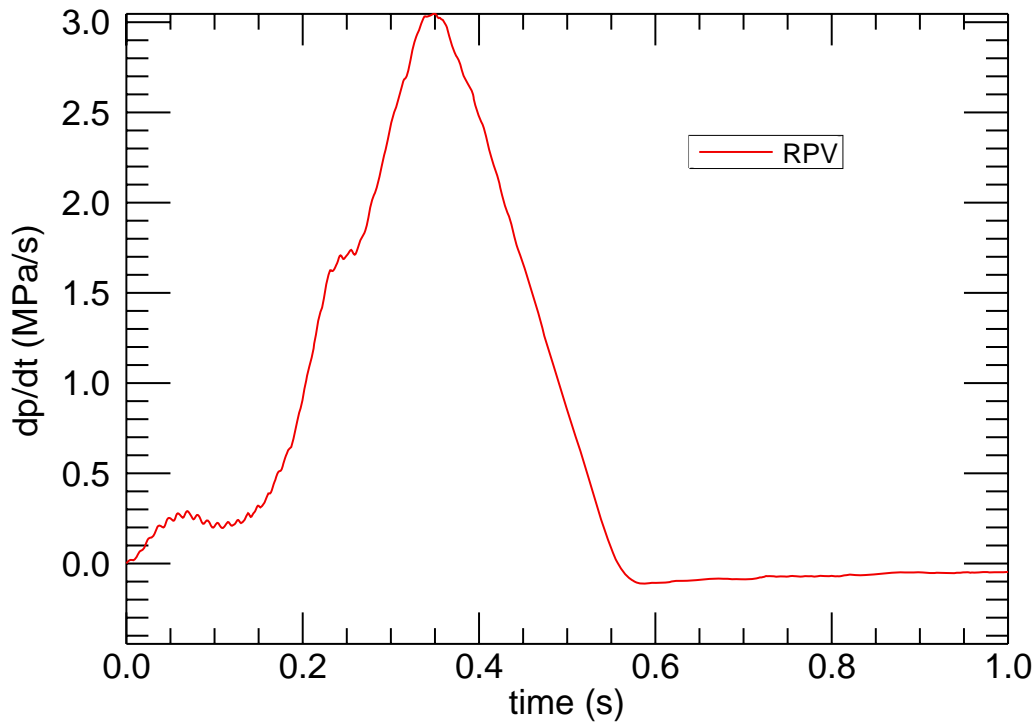


Abb. 2-4: Druckentlastung im RDB der DISCO-Versuchsanlage bei dem Versuch H04.

Mit dem experimentell ermittelten Druck (Abb. 2-3) und der Druckentlastung im RDB bei dem Versuch H04 (Abb. 2-4) sowie unter der Annäherung $V = (V_0 P_0)/P$ kann die Gl. (2-11) nach der Öffnungsfläche des RDB A_h aufgelöst werden. Die so berechnete Öffnungsfläche (unter Wahl der Schmelzedichte als derjenigen von Fe bzw. Al_2O_3) ist in Abb. 2-5 angetragen. Diese Darstellung ist nur solange gültig, bis kein homogenes Ausfließen mehr angenommen werden kann. Der Auslegungsquerschnitt in DISCO-H04 beträgt 56 mm, das entspricht $A_h = 0,002463 \text{ m}^2$. Abb. 2-5 zeigt, dass dieser Querschnitt ungefähr unter der Annahme des Ausfließens der spezifisch schwereren Eisen-schmelze (mit $\rho_d = 6684 \text{ kg/m}^3$) nach ca. 0,07 s erreicht wird.

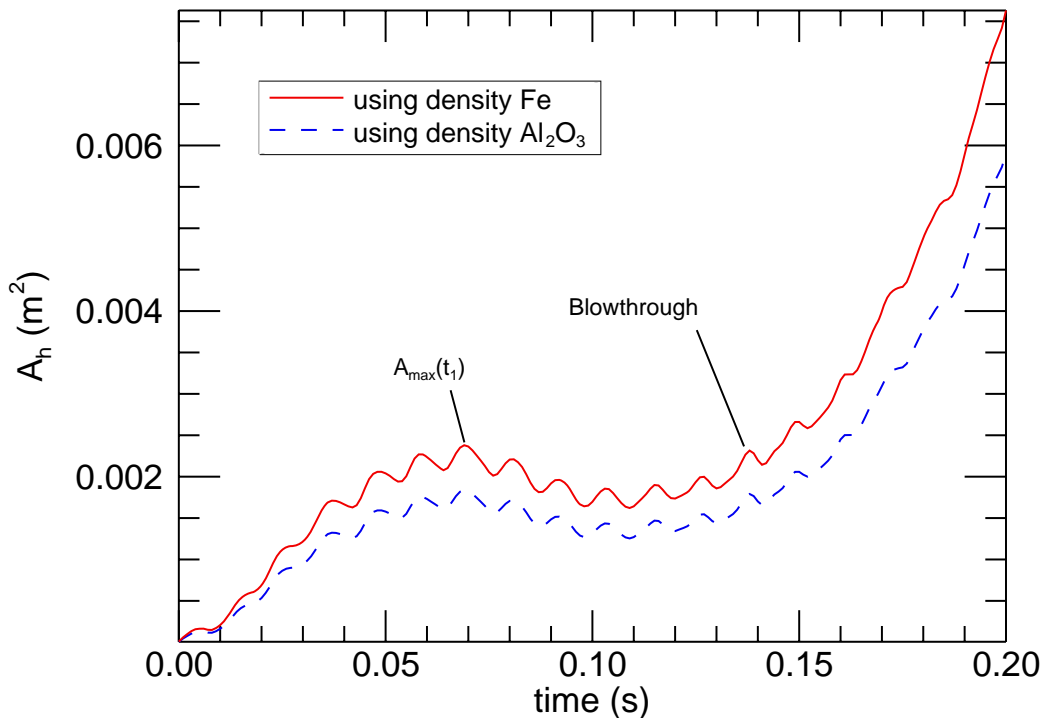


Abb. 2-5: Öffnungsfläche im Loch des RDB in der DISCO-Versuchsanlage bei dem Versuch H04.

Wenn die Öffnungsfläche wie aus dem Bild zu entnehmen innerhalb von 0,07 s ungefähr linear anwächst kann die ausgeflossene Masse von Eisen nach dieser Zeit mit

$$M_{Fe}(t_1 = 0,07 \text{ s}) = \int_0^{t_1} \dot{M}_{Fe} dt = \int_0^{t_1} \rho_d C_d A_h(t) \sqrt{\frac{2 \Delta P}{\rho_d}} dt = \rho_d C_d A_{max} \frac{t_1}{2} \sqrt{\frac{2 \Delta P}{\rho_d}}$$

abgeschätzt werden. Das Ergebnis $M_{Fe}(t_1 = 0,07 \text{ s}) = 5,35 \text{ kg}$ ist in guter Übereinstimmung mit der Eisenmasse, die tatsächlich zu Beginn des Versuches im RDB vorhanden war. Der berechnete Rückgang der in Abb. 2-5 für $\rho_d = \rho_{Fe}$ berechneten Öffnungsfläche nach $t = 0,07 \text{ s}$ kann dann mit der ab diesem Zeitpunkt angenommenen Eisendichte statt der tatsächlich vorliegenden Oxiddichte erklärt werden. Öffnungsflächen nach Einsetzen des Blowthrough (d. h. für $t > t_b$) sind in Abb. 2-5 irrelevant.

Im Manual zu CONTAIN /MUR 97/ wird für Nachrechnungen von Experimenten aus halb-empirischen Gründen empfohlen, eine Öffnungszeit des Lochs mit linearem Anwachsen des Querschnittes nach der Beziehung

$$\Delta t = 0,4 \left(\frac{S}{0,1} \right) \left(\frac{0,4}{d_h/S} \right)^2 \sqrt{\frac{6,3}{P_{0,RPV}}} \quad (2-12)$$

zu berücksichtigen. S bedeutet hier das Skalierungsverhältnis des Experimentes und $P_{0,RPV}$ gibt den Anfangsdruck des RDB in MPa an. Für die DISCO-Experimente beträgt der Lochdurchmesser $d_h = 0,056$ m, das Skalierungsverhältnis $S = 1/18$ und der Anfangsdruck $P_{0,RPV} \approx 1$ MPa. Aus dieser Empfehlung resultiert ein Wert von $\Delta t = 90$ ms, der als Dauer der Lochöffnung in CONTAIN für die DISCO-Versuche berücksichtigt werden sollte.

Als Ergebnis dieser Betrachtung wird festgehalten, dass die experimentellen Daten beim Ausströmen der DISCO-Versuche mit der Hypothese in guter Übereinstimmung erklärt werden können, dass das Aufschmelzen des RDB-Leckes zu Beginn der Versuche eine endliche Zeitdauer benötigt, bis der Auslegungsquerschnitt für das RDB-Leck völlig frei gelegt ist. Diese Zeit beträgt bei DISCO-H04 ca. 70 ms in guter Übereinstimmung zu Empfehlungen für Versuchsnachrechnungen im CONTAIN-Manual (Gl. (2-12)), das macht etwa die Hälfte der Zeit bis zum Einsetzen des Blowthrough aus. In dieser Zeit strömt in DISCO-H04 fast das gesamte Eiseninventar aus dem RDB aus.

Für Nachrechnungen der heißen DISCO-Versuche mit CONTAIN und COCOSYS wird eine lineare Vorgabe des Öffnungsquerschnittes in Abhängigkeit von der Zeit innerhalb von 70 ms bis zum Erreichen des Auslegungsquerschnittes empfohlen.

2.2.2 Eintrag von Schmelze in die Gasströmung (Entrainment)

2.2.2.1 Kriterien für Störwellen als Ursache von Entrainment

In vertikalen Filmströmungen werden so genannte „Störwellen“ als Ursache für einen Abriss von Tropfen aus dem Flüssigkeitsfilm gesehen. Die Entstehung dieser Störwellen wird als koinzident mit dem Beginn von Entrainment angesehen. Man hat in der Folge versucht, die Bedingung für das Entstehen solcher Störwellen mit dimensionslosen Kennzahlen zu korrelieren. Die wichtigsten dieser Kennzahlen sind:

- $$We = \frac{\rho_g v_g^2 l}{\sigma} \quad (2-13)$$

Die Weber-Zahl We gibt das Verhältnis von kinetischer Energie der Gasströmung zur Oberflächenenergie der Schmelze an. Die Länge l kann als maximaler Durchmesser eines stabilen, abgelösten Tropfens interpretiert werden.

- $$Ku = \frac{\rho_g v_g^2}{\sqrt{\sigma g \Delta \rho}} \quad (2-14)$$

Die Kutateladze Zahl Ku ergibt sich aus der Weber-Zahl Gl. (2-13)

wenn für die charakteristische Länge l die Kapillarlänge $\sqrt{\sigma/g(\rho_l - \rho_g)}$ eingesetzt wird. Sie charakterisiert die Dicke eines Tropfens bzw. Films, der sich unter Einwirkung von Gravitation und Oberflächenspannung auf einer horizontalen Oberfläche im Gleichgewicht befindet.

- $$Re = \frac{\rho v l}{\eta} \quad (2-15)$$

Die Reynolds-Zahl Re charakterisiert das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften. Sowohl Re_d , die die Bedingungen der Filmströmung charakterisiert, als auch Re_g als entsprechende Kennzahl für die Gasströmung sind von Bedeutung.

- $$Oh = \frac{\eta_l}{\sqrt{\sigma \rho_l l}} \quad (2-16)$$

Die Ohnesorge-Zahl Oh beschreibt das Verhältnis von Reibungskraft zum Produkt aus Oberflächenspannung und Trägheitskraft

Das Einsetzen von Entrainment wird für Strömungsbedingungen erwartet, bei denen die auf die Flüssigkeitsoberfläche wirkenden Scherkräfte (proportional zur kinetischen Energie der Gasströmung) die der Tropfenablösung entgegenwirkenden Kräfte (Oberflächenspannung, Gravitation) in einem gewissen Maße übersteigen. Durch Korrelation mit vorhandenen Experimenten sind kritische Werte für verschiedene Kombinationen der Größen (2-13)-(2-16) gefunden worden, ab denen ein Entrainment erwartet wird. Abb. 2-6 zeigt eine Korrelierung experimenteller Daten für Ringströmungen aus den Jahren 1964-1983 mit den Kenngrößen Re_d , Oh , We , und Re_g /AZZ 97/. In anderen Untersuchungen wurde als kritische Bedingung für Entrainment im Bezug auf die Kennzahlen We und Ku die Werte $We_{krit} = 12$ bzw. $Ku_{krit} = 10$ gefunden /BÜS 99, MUR 97/.

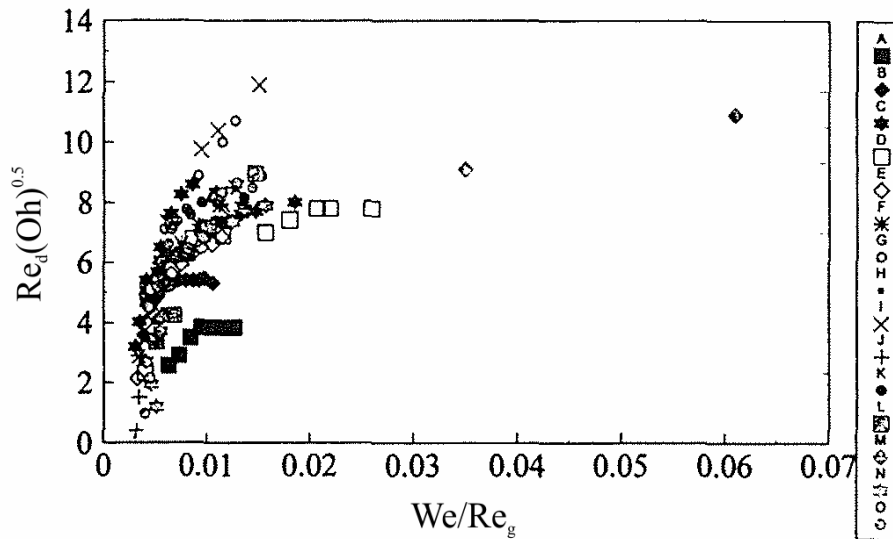


Abb. 2-6: Kritische Bedingungen für die Entstehung von Störwellen in Abhängigkeit von Re_d , Oh , We und Re_g .

Für COCOSYS soll ein Kriterium verwendet werden, dass sich an den verfügbaren Modellen in CONTAIN orientiert. In CONTAIN wird zwar kein Kriterium für den Beginn und das Ende des eigentlichen Entrainment-Vorganges geprüft, wohl aber wird ein Kutateladze-Kriterium bei dem Trapping-Modell „TOF/KU“ einbezogen, bei dem die Flugzeiten eines Partikels bis zum Auftreffen auf Strukturen berechnet werden. Nach jedem Aufprallvorgang wird dort mit dem Kutateladze-Kriterium geprüft, ob das Partikel nicht sogleich in den Gasstrom rückgetragen wird. Ein solches Kutateladze-Kriterium soll in COCOSYS für den Beginn und das Ende des Entrainment-Vorganges geprüft werden:

$$Ku_{krit} \leq \frac{\rho_g V_g^2}{\sqrt{\sigma g (\rho_d - \rho_g)}} \quad (2-17)$$

Die kritische Kutateladze-Zahl Ku_{krit} für den Einsatz von Entrainment muss im Input definiert werden (Default: $Ku_{krit} = 10$). Ist diese Bedingung erfüllt, so findet Entrainment statt, allerdings nur in der Reaktorgrube, daher muss in den Modellen die Massenquelle nur für diejenige Zone vorgegeben werden, die die Reaktorgrube repräsentiert.

2.2.2.2 Entrainment-Rate

Sind die Bedingungen für das Entrainment einmal überkritisch, so wird in Ansätzen für die Entrainment-Rate $\dot{\varepsilon}$ analog zu Ansätzen für diffusiven Massentransport eine Proportionalität zur Konzentration angesetzt:

$$\dot{\varepsilon} = k C_{\infty} \quad (2-18)$$

Hierin steht C_{∞} für die „Gleichgewichtskonzentration“, die i. A. mit einem Ausdruck proportional zu $(\tau l/\sigma)$ korreliert. τ steht für die Scherkraft, die an der Schnittstelle Gas/Schmelze angreift und l für eine charakteristische Länge, die das Verhältnis von den Scherkräften zu den Oberflächenkräften σ entdimensioniert (z. B. die Filmdicke der Flüssigkeit δ). In den vielen verschiedenen Ableitungen zu Entrainment-Raten-Korrelationen kommt also wiederum der We-Zahl ein maßgeblicher Einfluss zu.

Obwohl die Ansätze zur Bestimmung der Entrainment-Rate als eine im Vergleich zur Verwendung von Korrelationen für den Bruchteil mitgerissener Schmelze („Entrained-Fraction“) eher mechanistische Beschreibung gelten, so sind die Methoden zur Bestimmung der maßgeblichen Parameter hierin (z. B. C_{∞} als Funktion der Weber-Zahl, oder der Vorfaktor k in (2-18) trotzdem als weitgehend empirisch zu bewerten /AZZ 97/.

Die in das luftgetragene Feld m_L eingetragene Masse wird durch eine flächenspezifische Entrainment-Rate $\dot{\varepsilon}$ (kg/s/m^2) berechnet. Für die Entrainment-Rate $\dot{\varepsilon}$ existieren viele verschiedene Korrelationen. Eine wissenschaftliche Beurteilung der besonderen Qualifikation einer dieser Korrelationen auf Basis von CONTAIN-Anwendungen konnte bislang nicht erfolgen. Dies gilt insbesondere deswegen, weil verschiedene Korrelationen mit unterschiedlichen Vorfaktoren zu ähnlichen Rechenergebnissen in CONTAIN geführt haben. Aus pragmatischer Sicht erwies sich eines der vorhandenen Modelle in CONTAIN in Nachrechnungen der DISCO-Versuche als besonders stabil: Die unmodifizierte Korrelation nach Whalley-Hewitt, welcher in vorhergehenden Untersuchungen eine gute Prognosefähigkeit attestiert worden war /WIL 96/ und die hier für den Einbau in COCOSYS vorgeschlagen wird. In dieser wird ein Bezug zwischen den Größen Scherkraft τ an der Schnittstelle zwischen Gasströmung und Schmelzeoberfläche, Oberflächenspannung σ und Viskosität η_d entsprechend der Relation

$$\dot{\varepsilon} \propto \tau \frac{\eta_d}{\sigma} \quad (2-19)$$

hergestellt. Im Unterschied zu den Korrelationen basierend auf der Weber-Zahl findet sich hier ein Einfluss der Viskosität η_d der Schmelze wieder, der im Falle größerer Viskositäten zu stärkerem Mittriss von Partikeln führt. Der Ausdruck leitet sich nicht aufgrund theoretischer Überlegungen ab, sondern aus Empirie. Die Schubspannung τ an der Schnittstelle zwischen Gasströmung und Schmelzefilm wird durch den Ausdruck

$$\tau = \frac{1}{2} \Phi C_f \rho_g v_g^2 \quad (2-20)$$

angenähert. Hierin steht C_f für den einphasigen Reibungsbeiwert (für $Re_g \geq 10^5$: $C_f = 0,005$) und ϕ für den Martinelli-Zwei-Phasen-Multiplikator

$$\Phi = 1 + 360 \frac{\delta}{D_{cav}}. \quad (2-21)$$

δ bezeichnet die Dicke des Schmelzefilms in der Cavity ($\delta = m_d / (\rho_d A_{film})$) und D_{cav} den Bezugsdurchmesser der Cavity (hydraulischer Durchmesser, im Input vorzugeben). Mit einem empirischen (im Input zu wählenden) Vorfaktor K_c lautet die Beziehung für die Entrainment-Korrelation dann:

$$\dot{\varepsilon} = 0,0025 K_c \left(1 + 360 \frac{\delta}{D_{cav}} \right) \left(\frac{\rho_g v_g^2 \eta_d}{\sigma} \right) \quad (2-22)$$

In COCOSYS soll als Referenzmodell die Entrainment-Rate Gl. (2-22) nach Whalley-Hewitt eingebracht werden.

2.2.3 Ablagerung luftgetragener Partikel (Trapping)

Für die Simulation von DCH-Phänomenen ist das Primärziel, die Massen und Größenverteilung luftgetragener Schmelzepartikel zu bestimmen und deren Transport und chemische Reaktionen zu berechnen. Der Eintrag von Schmelze ins luftgetragene Feld erfolgt über Korrelationen für die „Entrainment-Rate“, die in idealisierten Versuchsanordnungen (z. B. vertikale Ringströmungen in Rohren) abgeleitet worden sind. In die-

sen Experimenten wird versucht, den Einfluss von gleichzeitigen Ablagerungsvorgängen weitgehend zu unterbinden bzw. herauszurechnen. Ablagerungsvorgänge laufen in der Realität aber gleichzeitig und in den großen betrachteten Kontrollvolumina faktisch untrennbar von Entrainment-Phänomenen ab. In der Konsequenz wird die zeitliche Zunahme der Masse im luftgetragenen Feld durch die Differenz aus Entrainment-Rate und Ablagerungsrate bestimmt.

Wenn nach erfolgtem Druckausgleich nach Ende der „Blowdown“-Phase kein weiteres Entrainment mehr stattfindet (aufgrund nicht mehr genügend hoher Gasgeschwindigkeiten) wird die lokale Änderung der luftgetragenen Schmelzemasse dann nur noch durch Transport zwischen den Kontrollvolumen und durch Ablagerungsvorgänge kontrolliert: Das luftgetragene Feld wird letztlich vollständig durch Ablagerungsprozesse abgetragen.

Im Wesentlichen sind zwei verschiedene Mechanismen für Ablagerungsprozesse relevant:

- inelastischer, direkter Aufprall von luftgetragenen Partikeln auf Strukturen
- Sedimentation von Partikeln unter Einfluss von Schwerkraft

Der in allgemeiner Literatur zu Ablagerungsprozessen breit diskutierte Vorgang der diffusiven Ablagerung wird hier nicht betrachtet, da bei DCH entweder große Gas- bzw. Partikelgeschwindigkeiten vorliegen, dann sind direkte Aufprallvorgänge relevant, oder aber kleine Partikelgeschwindigkeiten und große Teilchenmassen, in diesem Fall ist der freie Fall der Teilchen dominant. Beide Vorgänge spielen sich im Vergleich zur Diffusion auf sehr kurzen Zeitskalen ab.

Bei dem Feld für luftgetragene Schmelzepartikel $m_{L,(i,n,k)}$ handelt es sich um ein dreidimensionales Feld, wobei die drei Indizes das Kontrollvolumen i , die Größenklasse n und die Stoffsorte k bezeichnen.

Die entsprechende Senke wird als eine Art „Zerfallsprozess“ berechnet, d. h. die Änderung der Größe ist proportional zur Größe selbst:

$$\left. \frac{dm_{L,(i,n,k)}}{dt} \right|_{\text{trap}} = -\omega_{i,n} m_{L,(i,n,k)}$$

Die Ablagerungsrate $\omega_{i,n}$ hat die Einheit s^{-1} und hängt vom Kontrollvolumen i und von der Größenklasse n ab, da auch die Strömungsgeschwindigkeiten für luftgetragene Partikel nur von der Größenklasse abhängen, nicht aber von der Stoffsorte.

2.2.3.1 GFT-Modell

Im GFT-Modell wird die Ablagerung auf den freien Fall der Partikel im Gravitationsfeld zurückgeführt. Im Gleichgewicht zwischen Gravitationsbeschleunigung und Reibung würde das Teilchen dann mit einer konstanten Sinkgeschwindigkeit $v_{\text{GFT}} = v_{\infty}$ fallen.

Die Ablagerungsrate $\omega_{i,n}$ ergibt sich dann mit der charakteristischen Fallhöhe durch

$$\omega_{i,n} = \frac{v_{\text{GFT},i,n}}{L_{\text{GFT},i}}.$$

Wenn möglich, sollte für jedes Kontrollvolumen i die charakteristische Fallhöhe $L_{\text{GFT},i}$ als mittlere Höhe dieses Kontrollvolumens im Input vorgegeben werden können. Sofern keine Angaben darüber im Input vorliegen, sollte dieser Wert aus der dritten Wurzel des Volumens angenähert werden:

$$L_{\text{GFT},i} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{V_i}.$$

Die für die Berechnung der Ablagerungsrate im GFT-Modell verwendete Fallgeschwindigkeit v_{GFT} kann mit v_{∞} angenähert werden, sofern sichergestellt ist, dass die entsprechende Zelle i hoch genug ist, dass die Partikel auch bis zu dieser Geschwindigkeit beschleunigen können bevor sie am Boden auftreffen. Vereinfachend wird dies dadurch geprüft, dass v_{GFT} auf die innerhalb der zur Verfügung stehenden Fallhöhe maximal mögliche Geschwindigkeit bedingt durch freien Fall (ohne Reibung) begrenzt wird.

Die maximal für die Gravitationsbeschleunigung zur Verfügung stehende Zeit ergibt sich durch

$$\Delta t_i = \sqrt{\frac{2 L_{\text{GFT},i}}{g}}.$$

In dieser Zeit kann das Teilchen, ausgehend vom gedachten Ruhezustand, maximal auf die Geschwindigkeit

$$v_{\max,i} = g \Delta t_i$$

beschleunigt werden. v_{GFT} bleibt daher auf diese maximale Geschwindigkeit beschränkt:

$$v_{\text{GFT},i,n} = \text{MIN}(v_{\infty,n}, v_{\max,i}).$$

Die für eine Größenklasse charakteristische Schwebegeschwindigkeit v_{∞} wird in CONTAIN-(siehe Manual Gl. 6-89) wie folgt berechnet:

$$v_{\infty,n} = \left[\frac{-C_1 + \sqrt{C_1^2 + C_1 C_2}}{2} \right]^2 \left(\frac{\eta_g}{\rho_g d_n} \right) \text{ mit} \quad (2-23)$$

$$C_1 = 9,06 ; \text{ und } C_2 = \frac{1}{3} \sqrt{8 g d_n \left(\frac{\rho_d d_n}{\eta_g} \right) \left(\frac{\rho_g d_n}{\eta_g} \right)}.$$

Hierin stehen die Indizes „d“ und „g“ für Debris bzw. Gas, d_n bezeichnet den Durchmesser der Größenklasse n und η steht für die dynamische Viskosität.

Die Sinkgeschwindigkeit im Schwerfeld wird allgemein aus der Kräftegleichheit zwischen Gewichtskraft, Auftrieb und Widerstandskraft berechnet. Die Widerstandskraft ist allgemein eine Funktion des Widerstandsbeiwertes c_w und damit abhängig von der Reynolds-Zahl Re_d :

$$Re_d = \frac{v_g d \rho_g}{\eta_g}$$

Für kleine Re_d ($< 0,25$) kann die Sinkgeschwindigkeit nach der Ableitung von Stokes behandelt werden. Dies führt zu

$$v_{\infty} = \frac{\rho_d - \rho_g}{18 \eta} g d^2. \quad (2-24)$$

Für größere Re_d im Newton-Bereich ($10^3 < Re_d < 2 \cdot 10^5$) gilt die Formel

$$v_{\infty} = \sqrt{\frac{4 d (\rho_d - \rho_g) g}{3 c_w \rho_g}} . \quad (2-25)$$

Der c_w -Wert hängt von Re_d ab und liegt für eine Kugel im betrachteten Reynolds-Bereich bei ca. 0,47.

Die mit dem Kugeldurchmesser d und der Gasgeschwindigkeit v_g gebildete Reynolds-Zahl bewegt sich bei einem Kugeldurchmesser von 1 cm und maximalen Gasgeschwindigkeiten von 100 m/s (für DISCO-Experimente wurden mit CONTAIN Geschwindigkeiten von ca. 80 m/s berechnet) in der Größenordnung $4,5 \cdot 10^4$.

Mit diesen Korrelationen werden für typische Stoffwerte im Falle der DISCO-Experimente Schwebegeschwindigkeiten wie in Abb. 2-7 berechnet. Die Korrelation in CONTAIN und die klassische Berechnung („Newton“) liefern ähnliche Werte, wobei von dem Modell in CONTAIN, Gl. (2-23), für kleine Partikeldurchmesser kleinere und für große Partikeldurchmesser größere Geschwindigkeiten berechnet werden als im klassischen Ausdruck der Gleichung (2-25).

Da die Herkunft der in CONTAIN verwendeten Korrelation (2-23) nicht nachgewiesen ist, soll in COCOSYS der Newtonsche Ausdruck (2-25) verwendet werden.

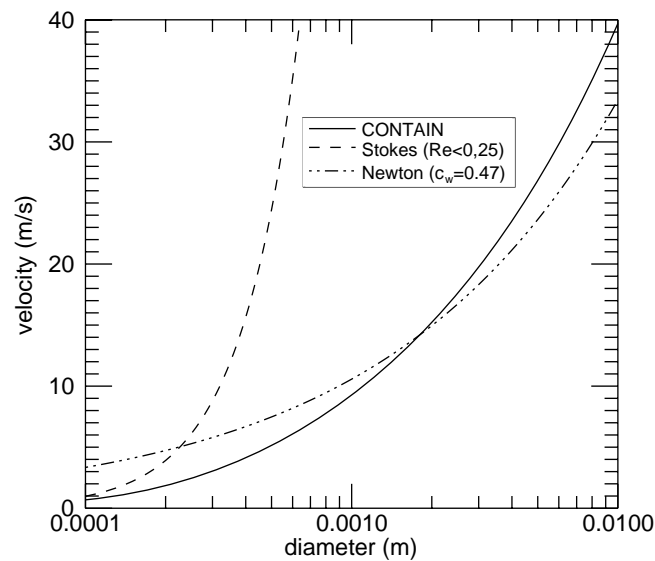


Abb. 2-7: Vergleich von klassisch berechneten Schwebegeschwindigkeiten im Stokes- und Newton-Bereich und nach der in CONTAIN verwendeten Korrelation ($\eta_g = 2,367E-5$ Pa s, $\rho_g = 1,057$ kg/m³, $\rho_d = 4248$ kg/m³).

2.2.3.2 Direkter Aufprall

Aufgrund der Komplexität der möglichen Vorgänge (verwirbelte Strömungswege in komplexer Geometrie, mehrmalige Aufprallmöglichkeiten etc.) und der mangelnden Überprüfbarkeit der Modellansätze soll zunächst auf eine detaillierte Modellierung von direkten Aufprallvorgängen in COCOSYS verzichtet werden. Als Referenzmodell soll COCOSYS das zuvor besprochene GFT-Modell enthalten.

3 Überprüfung der Modelle in CONTAIN für die Übernahme in COCOSYS

Aufgrund der wie im vorherigen Kapitel besprochenen detaillierten und weitgehend mechanistischen Anlage der Modellierung in CONTAIN soll die Modellentwicklung für COCOSYS weitgehend auf den in CONTAIN verfügbaren Modellansätzen beruhen. Für ein besseres Verständnis der wichtigsten Phänomene (Ausströmen aus dem RDB, Entrainment, Trapping) und zur Identifizierung wichtiger Einflussparameter auf diese Phänomene sind nach einer voraus laufenden Verifizierung der vorliegenden CONTAIN-Version (Abschnitt 3.1) verschiedene DCH-Versuche in der Karlsruher DISCO-Anlage mit CONTAIN nachgerechnet worden (3.2-3.3). In diesen umfangreichen Anwendungen konnten die Modelle in CONTAIN soweit wie möglich überprüft werden und eine gezielte Übernahme sowie nötige Modifikationen dieser motiviert werden. Die Ergebnisse der durchgeführten CONTAIN-Rechnungen werden nachfolgend dargestellt.

3.1 Überprüfung der CONTAIN-Version

Zur Überprüfung der CONTAIN-Version, die der GRS im Quellcode vorliegt, wurde ein in /MUR 97/ dokumentierter Rechenfall für die US-amerikanische Reaktoranlage Sequoyah mit der bei der GRS verfügbaren Programmversion von CONTAIN nachgerechnet und mit den veröffentlichten Rechenergebnissen der Amerikaner verglichen /LAN 06/. Der in /LAN 06/ ausführlich besprochene Vergleich der Rechenergebnisse zeigt, dass die in der GRS verwendete CONTAIN-Version praktisch mit derjenigen, die zur Berechnung der im CONTAIN-Benutzerhandbuch veröffentlichten Ergebnisse benutzt wurde, übereinstimmt.

3.2 Nachrechnung der kalten DISCO-Versuche mit CONTAIN

Beim Forschungszentrum Karlsruhe wurden im Versuchsstand DISCO-C (Dispersion of Simulant Corium - Cold) Versuche mit Modellflüssigkeiten bei niedrigen Temperaturen durchgeführt /MEY 06, GAR 01, MEY 03/.

In den kalten Versuchen im DISCO-C-Versuchsstand können gezielt die Phänomene der Hydrodynamik (Austrag von Flüssigkeit aus dem RDB unter Druck, Einsetzen des Blowthrough, Austrag der Flüssigkeit in Containment-Räume) ohne die komplexen Ei-

genschaften und Wechselwirkungen, die im Falle einer heißen Schmelze auftreten, studiert werden.

In einer ersten Gruppe von Experimenten wurde dabei die Reaktorgrube und die anschließenden Räume beim EPR im Maßstab 1:18 modelliert (Abb. 3-1). Als Modellflüssigkeit für die Schmelze diente in der Versuchsreihe „D“ Wasser und in der Versuchsreihe „M“ eine Blei-Bismut-Legierung. Anstelle von Dampf wurde in den Versuchen der D- und M- Reihe Stickstoff verwendet. Innerhalb einer Versuchsreihe wurden der Versagensdruck des RDB sowie die Lochgröße variiert.

In einer zweiten Gruppe von Experimenten wurden die Phänomene in einer im Maßstab 1:16 skalierten Geometrie eines französischen Druckwasserreaktors der Linie P'4 untersucht. Genau wie bei der erstgenannten Experimentgruppe wurden die realen Stoffe Dampf und Corium durch Stickstoff und Wasser simuliert.

3.2.1 Nachrechnung von Experimenten in EPR-Geometrie

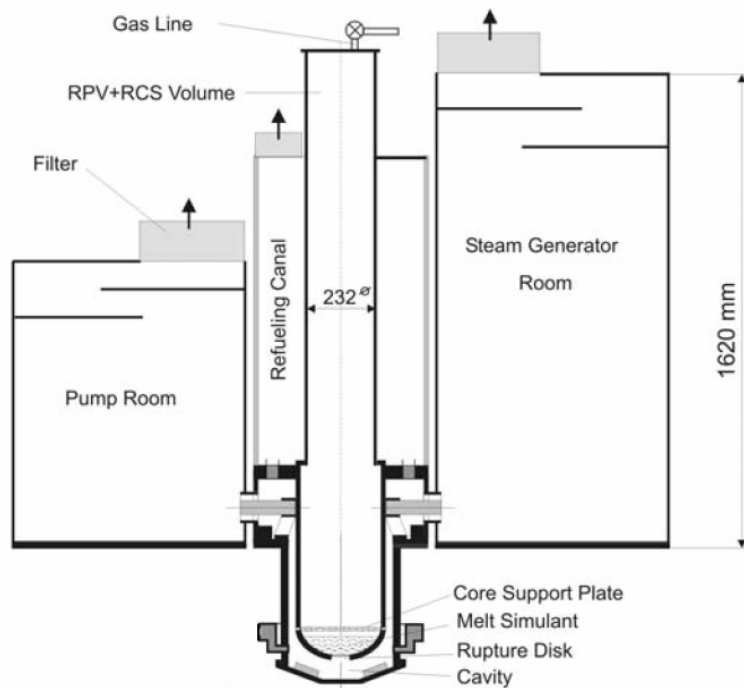


Abb. 3-1: Schematischer Aufbau der DISCO-C Versuchsanlage.

Der mögliche Strömungspfad verläuft hier vom zentralen Loch im RDB durch die Grube über den Ringspalt zwischen RDB und Betonschild entlang der Hauptkühlmittelleitungen in die Pumpen- und Dampferzeugerräume.

Die Experimente der „D“- und der „M“-Reihe wurden mit dem Rechencode CONTAIN nachgerechnet. Die Rechnungen dienten hauptsächlich zur Überprüfung der in Abschnitt 2.2.1 diskutierten Modelle für den Austrag von Schmelze aus dem RDB.

Zur Überprüfung des Entrainment-Modells wurde die zuvor schon diskutierte Entrainment-Raten-Korrelation von Whalley-Hewitt mit einem Vorfaktor von $K_c = 1000$ sowie eine User-Trapping-Rate von $\omega = 5 \text{ s}^{-1}$ verwendet. Beide Parameter wurden in verschiedenen Nachrechnungen mit CONTAIN auf die heißen DISCO-Versuche bereits erfolgreich getestet /LAN 06/. Die Strömungsgeschwindigkeit für die Ermittlung der Entrainment-Rate wird für die DISCO-C Versuche aus den Geschwindigkeiten am RDB-Leck und am Ausgang der Grube (an der freien Querschnittsfläche am Auflagepunkt der Tragstruktur) gemittelt.

Tab. 3-1: Vergleich der Parameter d und ΔP sowie der Ergebnisse für die Ausströmzeit bis zum Blowthrough t_b und den aus der Grube ausgetragenen Schmelzeanteil f_{disp} in den DISCO-C-Experimenten mit EPR-Geometrie.

Experiment	ΔP (MPa)	d (mm)	$t_{b, \text{Exp}}$ (s)	$t_{b, \text{Rechnung}}$ (s)	$f_{\text{disp, Exp}}$	$f_{\text{disp, Rechnung}}$ (s)
D04	1,060	25	0,047	0,092	0,698	0,868
D05	1,060	50	0,018	0,003	0,759	0,954
D06	0,520	50	0,024	0,013	0,669	0,756
D07	0,520	25	0,106	0,179	0,518	0,350
D08	0,510	100	0,013	0,000	0,717	0,831
D09	1,037	100	-	0,002	0,741	0,918
D10	1,040	15	0,419	0,440	0,382	0,404
D11	0,540	15	0,688	0,704	0,161	0,062
D12	0,170	18	-	0,952	0,000	0,000
D13	0,253	50	0,032	0,035	0,551	0,347
D14	0,250	100	0,012	0,000	0,580	0,639
D15	0,248	25	0,359	0,322	0,193	0,073
M01	0,945	25	0,515	0,582	0,357	0,231
M02	0,495	25	0,790	0,827	0,060	0,055
M03	0,482	50	0,090	0,140	0,380	0,236
M04	0,900	50	0,053	0,079	0,732	0,513

Die Rechenergebnisse für die Ausströmzeit t_b und den aus der Reaktorgrube ausgehenden Anteil der Schmelze f_{disp} sind in vielen Fällen in guter Übereinstimmung mit den Experimenten (Tab. 3-1). Für die Berechnung der kritischen Höhe anhand der Gluck-Korrelation wurde dabei für die beste Übereinstimmung ein Vorfaktor von 0,4 statt 0,43 gefunden. Die Abhängigkeit der beiden Größen t_b und f_{disp} von den Parametern d und ΔP (in Experiment und Rechnung) sind in den Abb. 3-2 bis Abb. 3-5 darge-

stellt. Die Zeit t_b nimmt stark mit zunehmendem Lochdurchmesser und schwach mit zunehmender Druckdifferenz ab. Diese Tendenzen bestätigen sich für Flüssigkeiten mit höherer Dichte (M01-M04), jedoch ergeben sich bei gleichen Parametern d und ΔP größere Ausströmzeiten bis zum Einsetzen des Blowthrough (vgl. D04 und M01, D07 und M02 etc.).

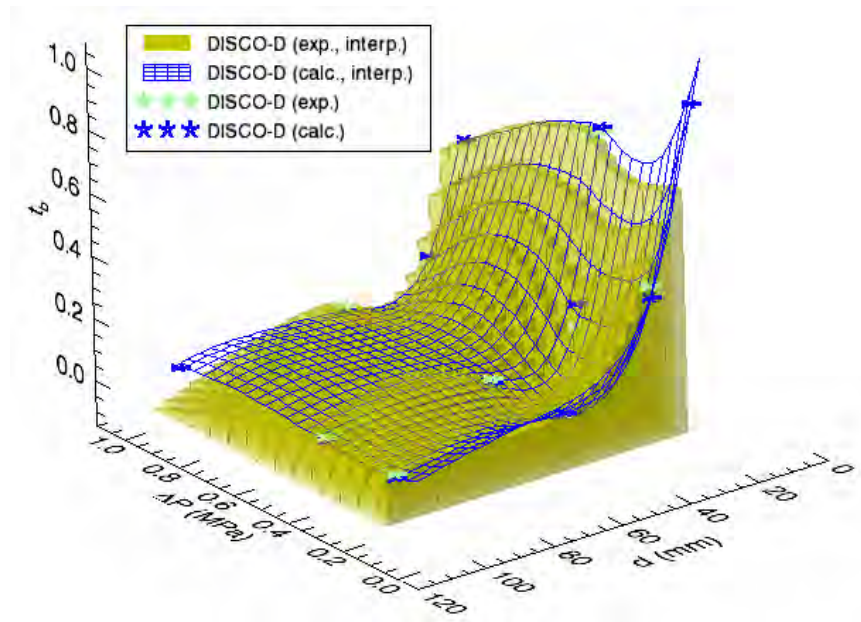


Abb. 3-2: Abhängigkeit der Zeit t_b bis zum Einsetzen des Blowthrough von dem Lochdurchmesser d und der Druckdifferenz ΔP in Experimenten und Rechnungen für die kalten Versuche mit Wasser D04-D15.

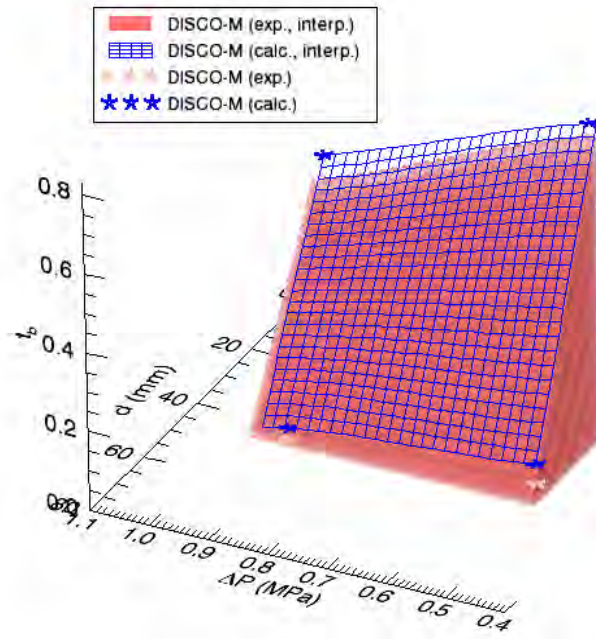


Abb. 3-3: Abhängigkeit der Zeit t_b bis zum Einsetzen des Blowthrough von dem Lochdurchmesser d und der Druckdifferenz ΔP in Experimenten und Rechnungen für die kalten Versuche mit der Bismut-Blei-Legierung M01-M04.

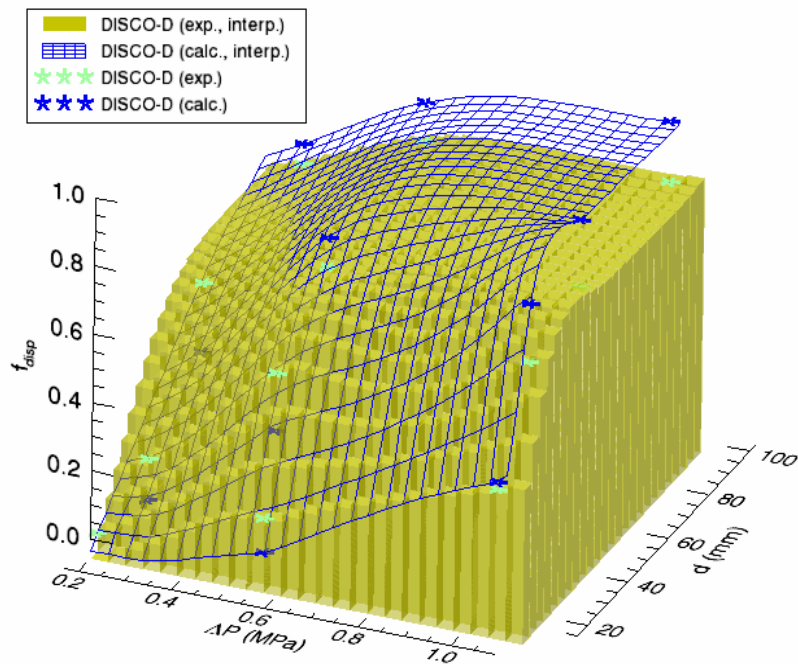


Abb. 3-4: Abhängigkeit der ausgetragenen Schmelzefraktion f_{disp} von dem Lochdurchmesser d und der Druckdifferenz ΔP in Experimenten und Rechnungen für die kalten Versuche mit Wasser D04-D15.

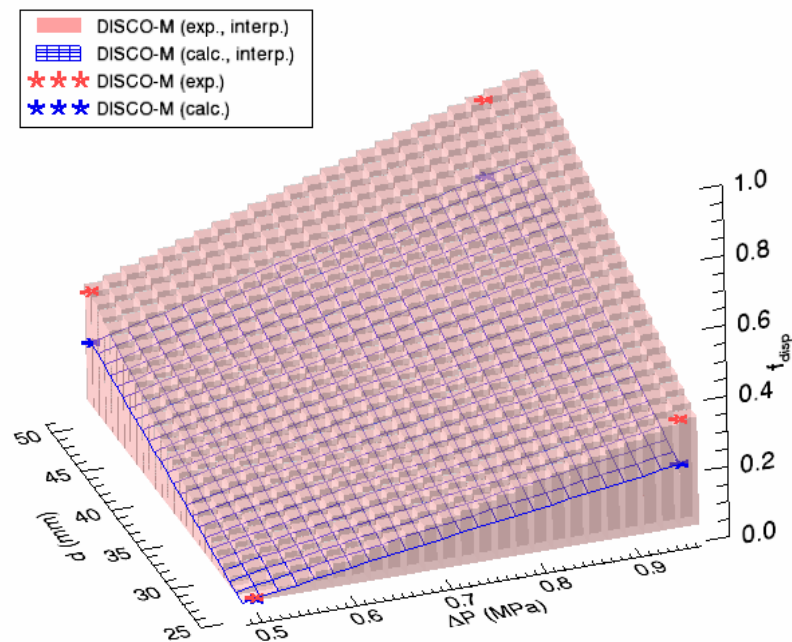


Abb. 3-5 **Abhängigkeit der ausgetragenen Schmelzefraktion f_{disp} von dem Lochdurchmesser d und der Druckdifferenz ΔP in Experimenten und Rechnungen für die kalten Versuche mit der Bismut-Blei-Legierung M01-M04.**

Der aus der Schmelzegrube während des Blowdown ausgetragene Anteil der Schmelze steigt mit zunehmendem Lochdurchmesser und zunehmender Druckdifferenz. Während in den Experimenten der ausgetragene Anteil auf ein Plateau von ca. 80 % begrenzt bleibt, wird in der Rechnung bei großen Lochdurchmessern und/oder großen Druckdifferenzen nahezu 100 % der Schmelze ausgetragen. Bis zu dem Erreichen eines solchen Plateaus gibt das Modell aber sehr gut das Verhalten von f_{disp} als Funktion von d und ΔP wieder. In den Experimenten M01-M04 mit der Modellflüssigkeit mit sehr hoher Dichte (Bismut-Blei-Legierung) wird im Vergleich zur Flüssigkeit mit niedriger Dichte (Wasser) sehr viel weniger Schmelze ausgetragen.

Die erfolgreiche Anwendung der Modelle in CONTAIN für das Ausströmen der Schmelze aus dem RDB sowie für den Austrag von Schmelze aus der Grube auf die Versuche im DISCO-C-Versuchsstand dokumentieren die Abb. 3-6 bis Abb. 3-11 der RDB-Drücke sowie die der abgelagerten Massen in Grube und Containment für die Versuche D11, D06 und M02.

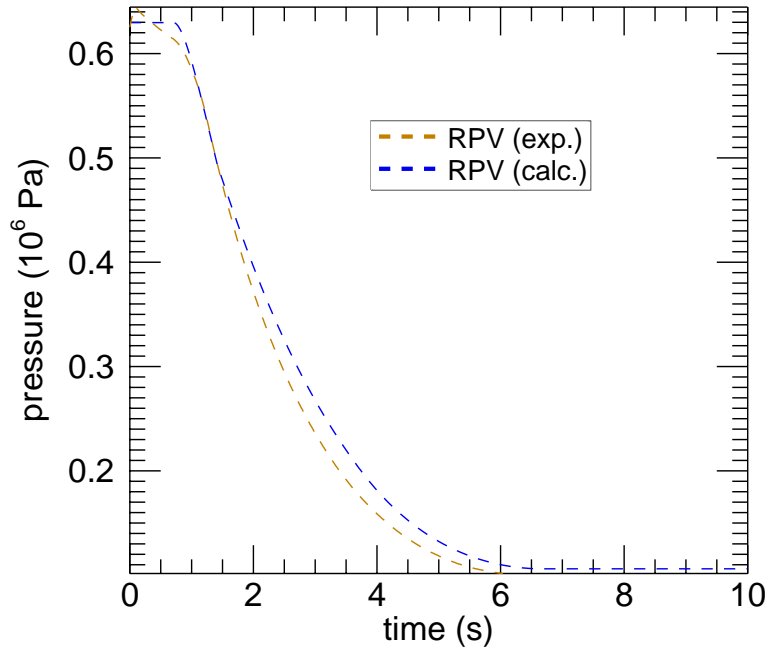


Abb. 3-6 Vergleich der RDB-Drücke in Experiment und Rechnung für DISCO-D11.

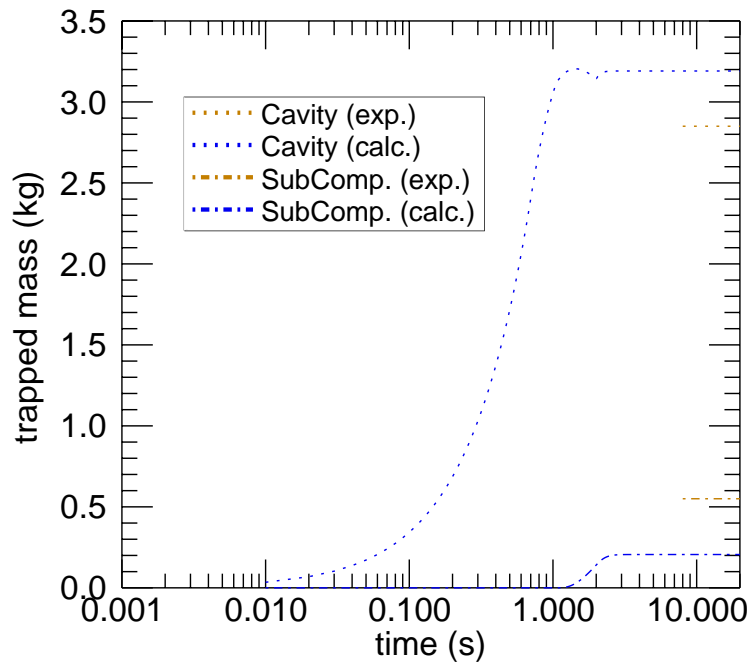


Abb. 3-7: Vergleich der abgelagerten Massen in Experiment und Rechnung für DISCO-D11.

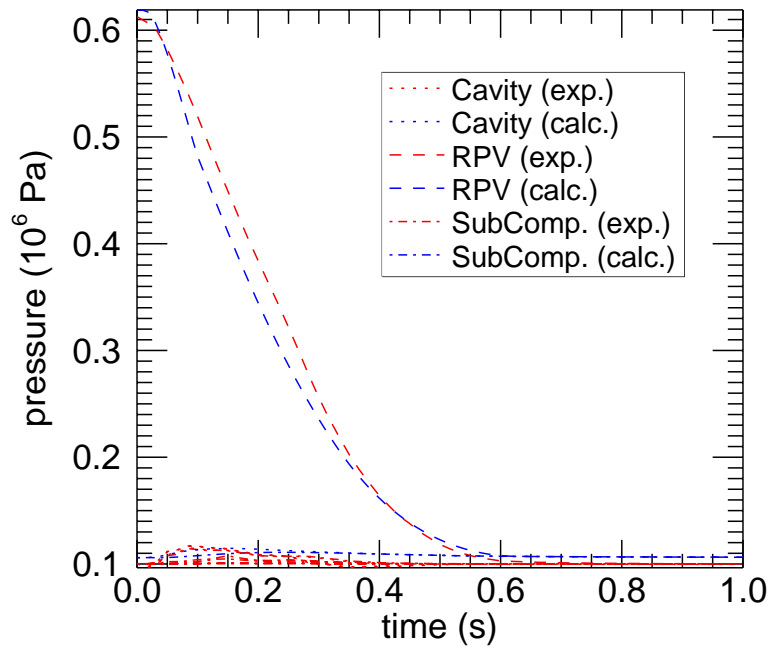


Abb. 3-8: Vergleich der RDB-Drücke in Experiment und Rechnung für DISCO-D06.

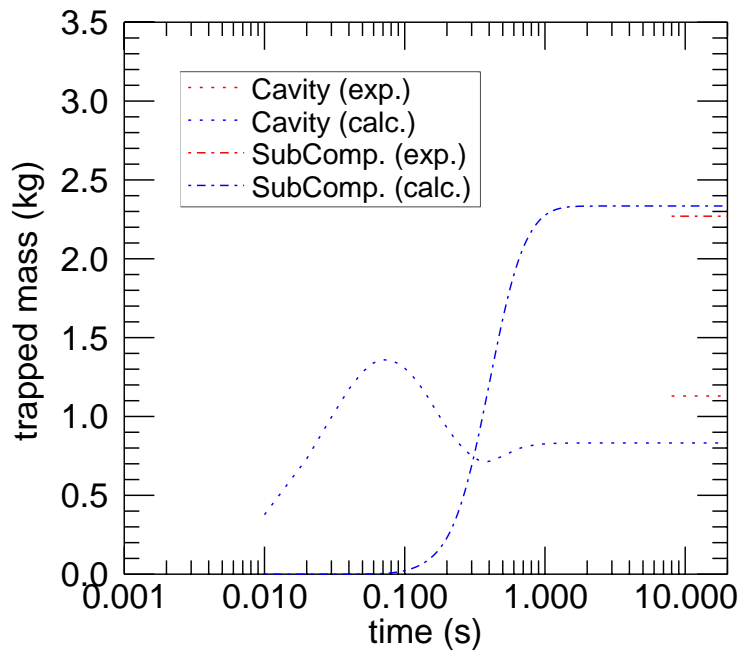


Abb. 3-9: Vergleich der abgelagerten Massen in Experiment und Rechnung für DISCO-D06.

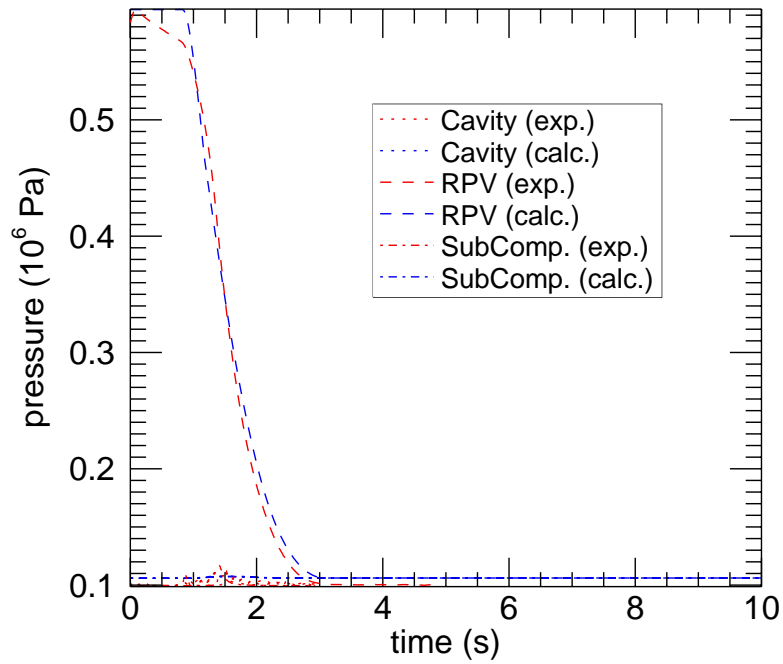


Abb. 3-10: Vergleich der RDB-Drücke in Experiment und Rechnung für DISCO-M02.

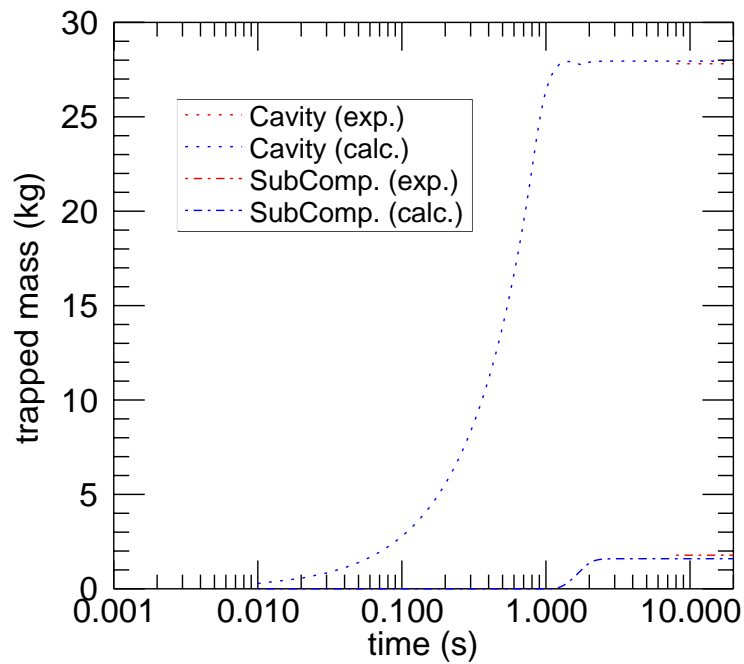


Abb. 3-11: Vergleich der abgelagerten Massen in Experiment und Rechnung für DISCO-M02.

3.2.2 Nachrechnung von Experimenten in französischer Geometrie (P'4)

Während die Simulation der Druckentlastung des RDB sowie des Blowthrough-Zeitpunktes t_b nur in geringem Maße von den entsprechenden Zylinder und Halbkugelgeometrien der Reaktordruckbehälter abhängig ist, spielt die tatsächliche Geometrie der Reaktorgrube und der Strömungswege in benachbarte Containment-Räume eine große Rolle für die realistische Simulation des Entrainments (Aufnahme von Schmelze in die Gasströmung und Mitriss in benachbarte Räume).

Für die Überprüfung der Modellierung mit einer anderen Reaktorgeometrie stehen im beschränkten Umfang einige weitere Daten von Experimenten in den DISCO-Versuchsständen zur Verfügung /MEI 05/: In einer Zusammenarbeit zwischen Forschungszentrum Karlsruhe und IRSN wurden in der Karlsruher Anlage sowohl heiße als auch kalte Experimente in der Geometrie der französischen Reaktorbaureihe P'4 durchgeführt.

Ein wesentlicher Unterschied zur in Abschnitt 3.2.1 behandelten Geometrie besteht hierbei in dem asymmetrischen Aufbau der Reaktorgrube mit einer Nische und einem Zugangskanal am Boden der Reaktorgrube. Den im Maßstab 1/16 skalierten Aufbau der Versuchsanlage zeigt die Abb. 3-12.

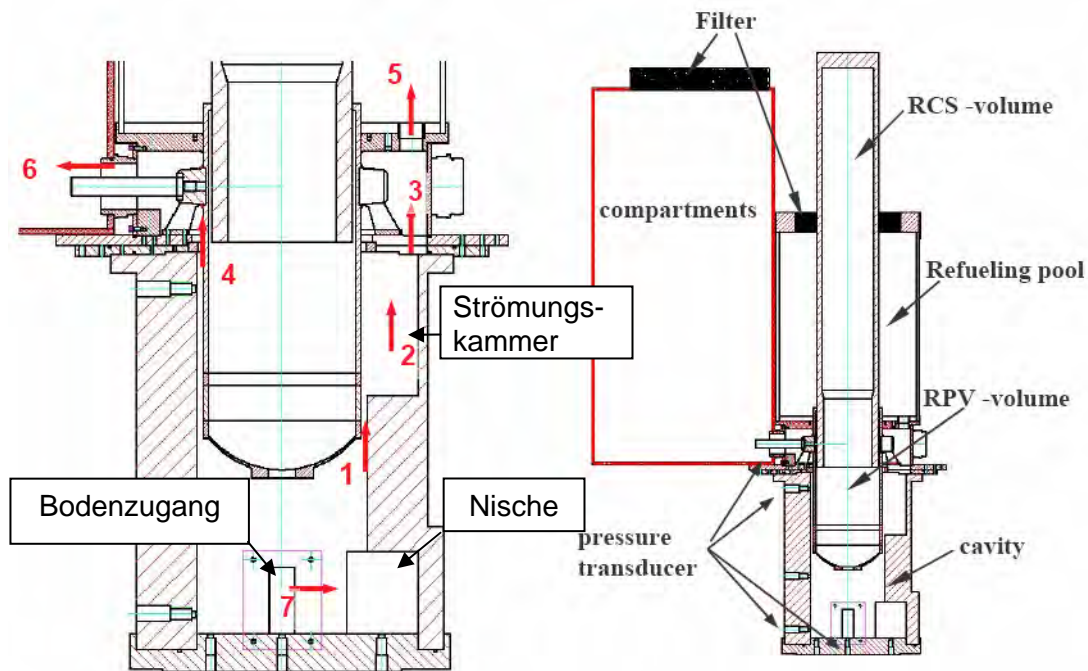


Abb. 3-12: Schematischer Aufbau der skalierten P'4-Geometrie in der Karlsruher DISCO-Anlage.

Weitere Unterschiede zur Geometrie aus Abschnitt 3.2.1 bestehen in dem größeren Abstand zwischen dem RDB-Boden und dem Boden der Reaktorgrube, des Weiteren in dem engeren Ringraum zwischen RDB und dessen Tragstruktur sowie den 8 radial um den RDB angeordneten, kammerförmigen Aufweitungen des Ringraumes.

Die Parameter für Entrainment und Ablagerung wurden bei der detaillierten Nachrechnung des Experimentes LACOMERA-DISCO-L1 auf diese spezielle Geometrie angepasst: Es ergab sich ein um einen Faktor $\frac{1}{2}$ verkleinerter Vorfaktor der Entrainment-Rate $K_c = 500$ gegenüber den Experimenten in der Geometrie aus Abschnitt 3.2.1, bei einer identischen Benutzervorgabe der Trapping-Rate von $\omega = 5 \text{ s}^{-1}$. Die Strömungsgeschwindigkeit zur Berechnung der Entrainment-Rate wird wie zuvor aus dem Mittelwert zwischen der Geschwindigkeit des Gases im RDB-Leck und der Geschwindigkeit im engen Bereich des Ringraumes ermittelt.

Tab. 3-2 fasst die Parameter d und ΔP für die 6 betrachteten, kalten Experimente in der französischen P'4-Geometrie mit den experimentellen und rechnerischen Ergebnissen für die Ausströmzeit t_b bis zum Einsetzen des Blowthrough und die aus der Grube ausgefragene Schmelzefraktion f_{disp} zusammen.

Tab. 3-2: Vergleich der Parameter d und ΔP sowie der Ergebnisse für die Ausströmzeit bis zum Blowthrough t_b und den aus der Grube ausgetragenen Schmelzeanteil f_{disp} für die DISCO-C-Experimente in P'4 Geometrie.

Experiment	ΔP (MPa)	d (mm)	$t_{b, Exp}$ (ms)	$t_{b, Rechnung}$ (ms)	$f_{disp, Exp}$	$f_{disp, Rechnung}$ (s)
F01	1,024	30	25	15	0,648	0,872
F02	1,511	30	19	2	0,804	0,934
F03	1,034	60	4	0	0,767	0,862
F04	1,524	60	-	0	0,878	0,925
F05	1,530	60	3,5	0	0,868	0,915
F06	1,075	30	12	0	0,621	0,762

Das Gluck-Kriterium für das Unterschreiten der kritischen Schmelzhöhe im RDB bei Einsetzen des Blowthrough ist in den Experimenten sehr rasch erreicht bzw. schon bei Beginn der Experimente erfüllt. Davon zeugen die vergleichsweise kurzen Zeiten für t_b in Experiment und Rechnung in Tab. 3-2. Dabei wird die von F01 nach F03 abnehmende Tendenz durch das analytische Modell bestätigt.

Alle Experimente der hier diskutierten F-Reihe bewegen sich auch hinsichtlich der ausgetragenen Schmelzemasse in einem engen Band, wie aus Abb. 3-13 zu entnehmen.

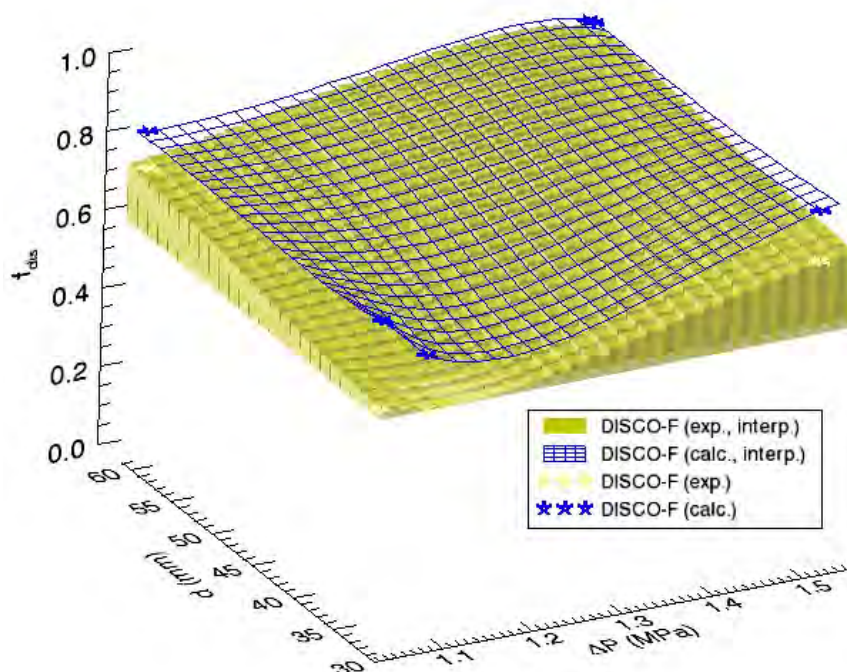


Abb. 3-13: Abhängigkeit der ausgetragenen Schmelzefraktion f_{disp} von dem Lochdurchmesser d und der Druckdifferenz ΔP in Experimenten und Rechnungen für die kalten Versuche mit Wasser F01-F06 in der P'4-Geometrie.

Bei gleichem Schmelzevolumen wird sowohl im Experiment als auch in der Rechnung die zunehmende Tendenz der aus der Reaktorgrube ausgetragenen Schmelzefraktion f_{disp} mit der Zunahme von d und ΔP bestätigt. Dabei wird die in den Sicherheitsbehälter ausgetragene Schmelzemasse vom Modell leicht überschätzt, was mit dem in Abschnitt 3.2.1 für eine andere Geometrie beobachteten Verhalten bei großen Leckdurchmessern/Druckdifferenzen (s. Plateaus in Abb. 3-4) übereinstimmt.

Als weiterer Parameter (in Tab. 3-2 nicht aufgeführt) geht zusätzlich die Schmelzemasse im RDB ein, deren Einfluss für den leicht welligen Verlauf in der Abb. 3-13 im Bereich $d = 30 \text{ mm}$ und $\Delta P = 1 \text{ MPa}$ ursächlich ist. Hier erzwingt die kleinere Schmelzemasse im RDB bei größerer Druckdifferenz ΔP beim Experiment F06 gegenüber dem Experiment F01 einen verkürzten Zeitraum für den Blowdown mit einer integralen Reduktion des ausgetragenen Masseanteils. Dies verdeutlicht die Komplexität der Abhängigkeiten bei dem Phänomen des Entrainment.

Sowohl die in CONTAIN verfügbaren Modelle für das Schmelzeausströmen aus dem RDB mit dem Gluck-Kriterium für das Einsetzen des Blowthrough als auch das Modell für den Austrag von Schmelze aus der Grube in den Sicherheitsbehälter wurden – nach Anpassung der Entrainment-Parameter an die unterschiedliche Geometrie – erfolgreich an dem Beispiel einer unterschiedlichen DWR-Anlage überprüft.

Im Hinblick auf die Geometrie des französischen Anlagentyps P'4 ist jedoch festzustellen, dass mit den vorliegenden Experimenten nur ein schmaler Parameterbereich durchfahren wurde, sodass die Belastbarkeit der Anwendung des Modells für andere Parameterkonstellationen (kleinere Drücke/Lochdurchmesser) noch mit Unsicherheiten behaftet ist.

3.3 Nachrechnung der heißen DISCO-Versuche

Die DISCO-H-Versuchsanlage wird benutzt, um die Freisetzung von Hochtemperaturschmelzen aus einem RDB-Leck in den Sicherheitsbehälter bei niedrigem Druck im Primärsystem zu untersuchen. Die Experimente sollen dazu dienen, fluiddynamische, thermohydraulische und chemische Prozesse zu identifizieren und zu untersuchen, die bei einer Schmelzefreisetzung bei RDB-Drücken von weniger als 20 bar von Bedeutung sind. Dabei sind Untersuchungen bei unterschiedlicher Versagensgeometrie be-

absichtigt. Als Simulationsmedien werden Thermit (Eisen-Aluminiumoxid-Schmelze) und Dampf bzw. Stickstoff benutzt.

Folgenden Aspekten wird im Unterschied zu den kalten Experimenten besonderes Augenmerk zugewandt:

- Verteilung der Schmelze im Sicherheitsbehälter nach Beendigung der Prozesse
- Druck- und Temperaturbelastungen des Sicherheitsbehälters
- Erzeugter und verbrannter Wasserstoff

Die Überprüfung und Bewertung der Modelle in CONTAIN soll folgende Detailinformationen einbeziehen:

- Druck- und Temperaturverläufe in RDB, Reaktorgrube und den modellierten Anlagenräumen
- Dauer der Schmelzefreisetzung
- Abschließende Verteilung der Schmelzepartikel in den verschiedenen Raumzonen und Größenverteilung der Partikel
- Wenn möglich Videoaufnahmen von den Vorgängen in der Reaktorzelle und dem Sicherheitsbehälter zur Erfassung der Schmelzeströmungen und der Wasserstoffverbrennung
- Gasanalysen vor und nach dem Experiment

3.3.1 Nachrechnung von Experimenten in EPR-Geometrie

Abb. 3-14 zeigt einen Vertikalschnitt durch die Versuchsanlage, während Abb. 3-15 die Details der Reaktorgrube besser verdeutlicht. Man erkennt den Bereich des Sicherheitsbehälters (türkisfarben), in die das Primärsystem repräsentierende rohrförmige Behälterkonstruktion (grün) hineinragt. Unterhalb des Primärsystems schließt der obere Bereich des RDB (violett) an. Der rot und weiß gekennzeichnete untere Teil des RDB ragt in die blau eingefärbte Reaktorgrube hinein. In ihrem oberen Bereich enthält die Reaktorgrube den seitlich wegführenden Stützenbereich. Die um die Stützen herum vorhandenen Öffnungen führen in das von den Experimentatoren mit „Subcompartment“ bezeichnete Volumen, welches einen Teil der Anlagenräume repräsentiert. Das

Primärsystem wird im oberen Teil über eine Rohrleitung mit dem Dampf aus dem dunkelblau gekennzeichneten Akkumulator versorgt.

Die den Sicherheitsbehälter repräsentierende Struktur ist ein TÜV-geprüfter Druckbehälter aus 15 mm starkem Stahlblech, ausgelegt auf 10 bar Innendruck und 200 °C mit einem äußeren Durchmesser von 2,20 m und einer Höhe von 4,60 m. Der untere Klöpperboden ist mit Beton ausgegossen und trägt die inneren, die einzelnen Raumzonen repräsentierenden Einbauten. Nach Herstellung gewünschter thermischer Vorbedingungen wird - während das im RDB befindliche (rot gekennzeichnete) Thermit abrennt - die Dampfleitung geöffnet bis der gewünschte treibende Druck hergestellt ist. Die Durchschmelzfolie im unteren Teil des RDB öffnet und der Dampf treibt die Schmelze in die Reaktorgrube und je nach Versuchskonstellation durch unterschiedliche Öffnungen und Strömungspfade durch das Subcompartment bis in den Sicherheitsbehälter.

Dabei sind folgende Strömungswege von Bedeutung (Abb. 3-14):

1. Strömungsweg entlang der Hauptkühlmittelleitungen in die Dampferzeuger-/Pumpenräume (als Subcompartment bezeichnet)
2. Strömungsweg aus dem Subcompartment in das Containment
3. Direkter, senkrecht nach oben gerichteter Strömungsweg aus der Reaktorgrube (in der realen Anlage möglich nach Versagen des Dichtbleches zwischen RDB und Traganker)

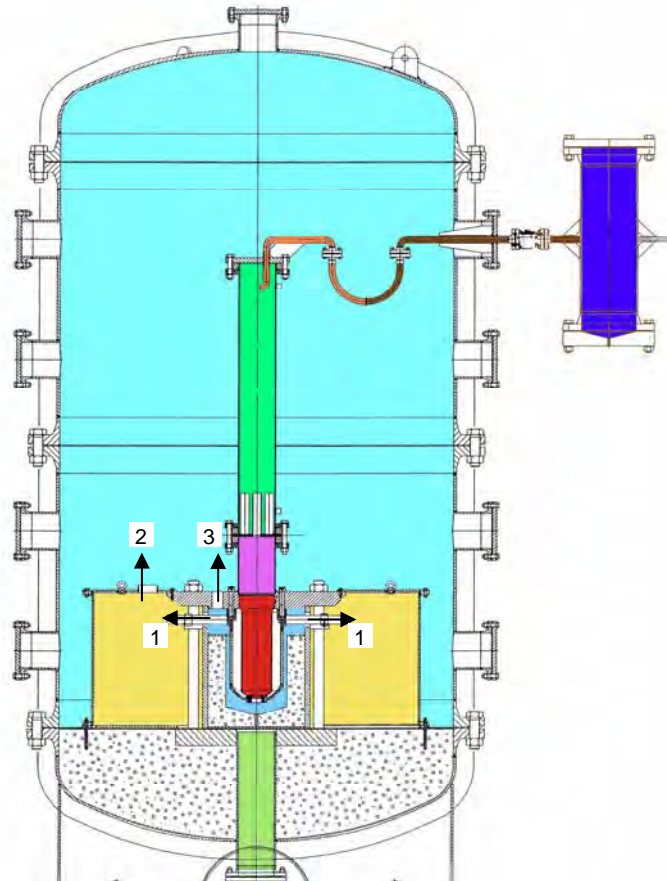


Abb. 3-14: Vertikalschnitt durch die DISCO-H-Versuchsanlage.

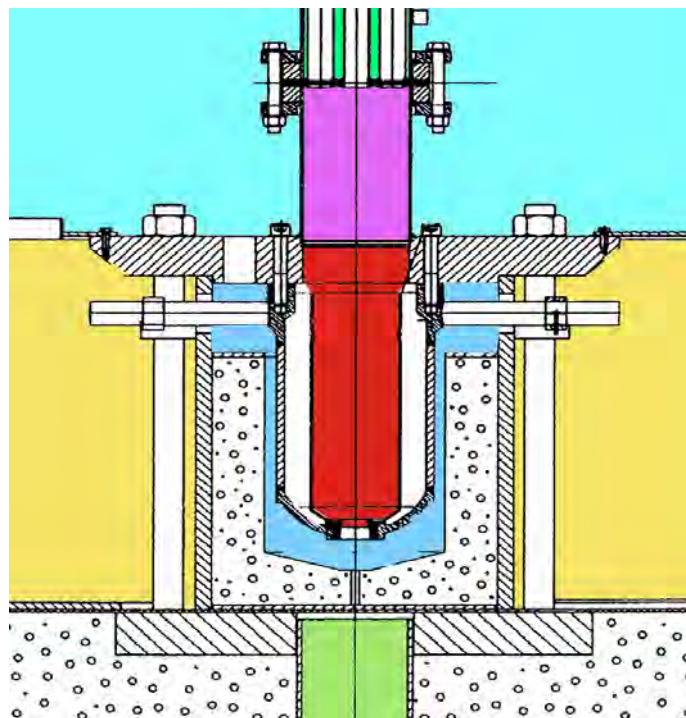


Abb. 3-15: Detailvergrößerung des Bereichs Reaktorgrube.

3.3.1.1 Vorgabe der Größenklassenverteilung

In Unterscheidung zu den Experimenten mit kalten Simulationsmaterialien (Abschnitt 3.2) tragen die Vorgänge bei der thermischen und chemischen Wechselwirkung zwischen der Schmelze – speziell den in die Gasströmung aufgewirbelten Tröpfchen und Partikeln – und der Atmosphäre maßgeblich zur Dynamik der Prozesse bei.

Der wichtigste Einflussparameter auf diese Wechselwirkungen ist die dafür zur Verfügung stehende Oberfläche. Ein bestimmtes Volumen an Schmelze, das von der Gasströmung mitgerissen wird, beschreibt in Form von luftgetragenen Tröpfchen eine gewisse Größenverteilung, welche durch eine Log-Normalverteilung angenähert werden kann. Die Parameter zur Beschreibung einer solchen Größenverteilung des mitgerissenen Materials können dabei dynamisch von Größen wie z. B. der Gasgeschwindigkeit abhängen.

Ein in CONTAIN verfügbarer Ansatz zur Simulation einer solchen dynamischen Verteilung der aufgewirbelten Schmelze in Größenklassen geht auf das Modell der Weber-Instabilität zurück: Der maximale, stabile Durchmesser ist gegeben durch die Beziehung

$$d_{\max} = \sigma \frac{We_{\text{crit}}}{\rho v_g^2}, \quad (3-1)$$

in welcher i. A. die kritische Weber-Zahl mit 12 angesetzt wird.

In der Anwendungserfahrung mit CONTAIN hat sich jedoch gezeigt, dass der Einsatz dieses Modells eine zusätzliche, hohe Komplexität in die ablaufenden Prozesse einbringt, die die Auswahl realistischer Modellparameter erschwert. Dies ist in Abb. 3-16 an einem Beispiel veranschaulicht: Die Wahl des kennzeichnenden Strömungsquerschnittes für das Entrainment in der Reaktorgrube beeinflusst die Ermittlung der Gasgeschwindigkeit zur Berechnung der Entrainment-Geschwindigkeit. Über den Term v_g^2 in Gl. (3-1) nimmt die Definition des Strömungsquerschnittes somit indirekt Einfluss auf die Größenklassenverteilung. Diese wird aber auch durch die kritische Weber-Zahl in Gl. (3-1) bestimmt, ein weiterer Input-Parameter in CONTAIN. Beide Größen (Strömungsquerschnitt in der Grube, kritische Weber-Zahl) nehmen somit Einfluss auf die zur Verfügung stehende Reaktionsoberfläche pro Masse. Der aufgrund der zur Verfügung stehenden Reaktionsoberfläche berechnete Temperatur- und Druckanstieg in der Reaktorgrube koppelt in der Folge zurück auf die Berechnung der Strömungsgeschwindigkeit.

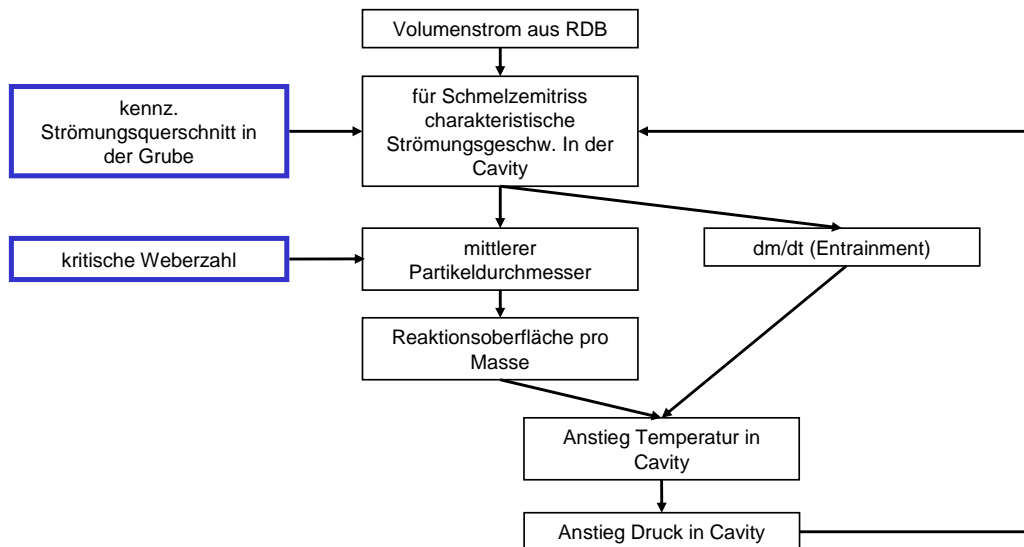


Abb. 3-16: Beispiel für komplexe Abhängigkeiten in dem Modell der Weber-Instabilität für die Bestimmung von Eingabeparametern (blau).

Die Dynamik der Prozesse lässt sich nur bedingt am Experiment überprüfen. Beispielsweise wurde die tatsächliche Größenverteilung der Partikel nur nach Ende des Experimentes ermittelt. Eine dynamische Entwicklung der Größenverteilung luftgetragener Partikel nach Gl. (3-1) lässt sich so nicht überprüfen. Da sich jedoch unter Benutzung des Weber-Modells die Schwierigkeiten bei der Parameterfindung wie weiter oben beschrieben sehr nachteilig auswirken, wird in den folgend dargestellten Experiment-Nachrechnungen mit CONTAIN auf eine dynamische Entwicklung der Größenklassenverteilung von neu mitgerissenem Schmelzmaterial verzichtet. Die Verteilung von neu mitgerissenen Schmelzetröpfchen auf bestimmte Durchmesserklassen wird dabei statisch berechnet, sodass die berechnete Größenverteilung jederzeit dem experimentellen Endergebnis entspricht.

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich, wenn statt einer Anzahl von Größenklassen zur Darstellung einer Log-Normalverteilung nur eine einzige Größenklasse unter Beibehaltung des mittleren Oberfläche-zu-Volumenverhältnisses benutzt wird. Der sogenannte Sauter-Durchmesser gibt die Größenordnung des Verhältnisses von mittlerem Volumen ($\sim d^3$) zu mittlerer Oberfläche ($\sim d^2$) einer Distribution (n_i, d_i) an:

$$d_{\text{Sauter}} = \frac{\sum n_i d_i^3}{\sum n_i d_i^2} \quad (3-2)$$

In der Auswertung der Experimente wird nicht die Anzahl von Teilchen n_i pro Klasse, sondern der rel. Massenanteil der Teilchen $r_i = m_i/M$ in jeder Klasse angegeben. Mit Ersetzen der n_i durch die m_i ,

$$n_i = \frac{6 m_i}{\pi \rho d_i^3},$$

folgt aus Gl. (3-2)

$$d_{\text{Sauter}} = \frac{1}{\sum r_i/d_i}.$$

Ein Teilchen mit diesem Durchmesser repräsentiert das mittlere Volumen-zu-Oberfläche-Verhältnis der zu Grunde liegenden Größenverteilung.

Durch Testrechnungen mit CONTAIN für die heißen DISCO-Versuche konnte gezeigt werden, dass die Phänomenologie der heißen DISCO-Versuche, inklusive der Modelle für die Wärmeübertragung und für die chemischen Reaktionen, unter Zugrundelegung der experimentellen Größenverteilung durch die Verwendung einer einzigen Größenklasse realistisch angenähert werden kann.

Allerdings kann mit einer solchen Reduktion auf eine monodisperse Verteilung der eingangs besprochenen, komplexen Dynamik bei dem Entrainment-Phänomen (mit kleinen Teilchendurchmessern bei hohen Gasgeschwindigkeiten und großen Teilchendurchmessern bei niedrigen Gasgeschwindigkeiten) keine Rechnung getragen werden.

In COCOSYS soll daher die Anlage einer diskreten Größenklassenverteilung mit den zugehörigen Differentialgleichungen vorgesehen werden, auch wenn nach derzeitigem Kenntnisstand in Nachrechnungen von Experimenten zunächst eine monodisperse Größenverteilung als realitätsnahe Näherung empfohlen wird.

3.3.1.2 Anpassung wichtiger Modell-Parameter

3.3.1.2.1 Entrainment

Sobald eine ausreichend große Gasströmung an der Schmelzeoberfläche in der Reaktorgrube existiert, gibt es einen Eintrag von Schmelzepartikeln in das Strömungsfeld

und einen Weitertransport luftgetragener Schmelzepartikel in benachbarte Raumbereiche.

Unter den in CONTAIN verfügbaren Modellen zur Berechnung einer dynamischen Entrainment-Rate bzw. zur Berechnung eines integralen Schmelzeanteils, der während des Blowdown aus der Reaktorgrube zusammen mit der Gasströmung in andere Raumbereiche des Containments gelangt, konnte in langwierigen Vorarbeiten keine besondere Qualifizierung eines speziellen Ansatzes festgestellt werden. Mit allen Modellen können prinzipiell, nach Anpassung von wichtigen Parametern, ähnliche quantitative Ergebnisse erzielt werden. Die experimentelle Datenbasis im Bezug auf die Variation der physikalischen Parameter ist zu klein, um die besondere Eignung einer der vorhandenen Korrelationen zweifelsfrei festzustellen.

Zur Berechnung des Entrainments wird daher ein Referenzmodell festgelegt, was für die Nachrechnungen mit CONTAIN benutzt und in COCOSYS übernommen werden soll. Es handelt sich um das Entrainment-Raten-Modell nach Whalley und Hewitt. Die Vorteile dieser Korrelation werden derzeit in ihrer guten Vorbewertung in amerikanischer Literatur /WIL 96/ sowie in ihrer numerischen Stabilität in der Anwendung auf die DISCO-Versuche gesehen.

Die Entrainment-Rate mit der Einheit kg/s/m^2 wird durch den Ausdruck

$$\varepsilon = 0,0025 K_c \left(1 + 360 \frac{\delta}{D_{\text{cav}}} \right) \left(\frac{\rho_g v_g^2 \eta_d}{\sigma} \right), \quad (3-3)$$

berechnet. Der Term δ/D_{cav} repräsentiert das Verhältnis von Schmelzefilm in der Grube, δ , zum Durchmesser der Grube D_{cav} . ρ_g und v_g stehen für die Dichte und die Geschwindigkeit des Gases, welches die Schmelze mitreißt. Die Größen η_d und σ repräsentieren die Viskosität der Schmelze sowie deren Oberflächenspannung. Der Einfluss der Viskosität schien mit den ursprünglichen experimentellen Daten von Whalley und Hewitt zu korrelieren, ist aber in diesem Zusammenhang umstritten, da es viele Argumente gibt, dass im Falle der DCH-Phänomenologie der in der Korrelation genannte Einfluss der Viskosität der Schmelze nicht realistisch sein kann. Sofern man sich jedoch auf realistische Werte für die Viskosität festgelegt hat, z. B. $0,1 \text{ Pa s}$ im Falle einer Aluminiumoxidschmelze bei $2200 \text{ }^\circ\text{C}$, kann die Korrelation mit dem Vorfaktor K_c auf ein Experiment angepasst werden. K_c ist ursprünglich zur Kompensation geo-

metrischer Effekte vorgesehen, die nicht durch die eigentliche Korrelation wiedergegeben werden. Für die DISCO-Experimente erwies sich unter diesen Bedingungen ein Vorfaktor in der Größenordnung $K_c \approx 1000$ als gute Näherung.

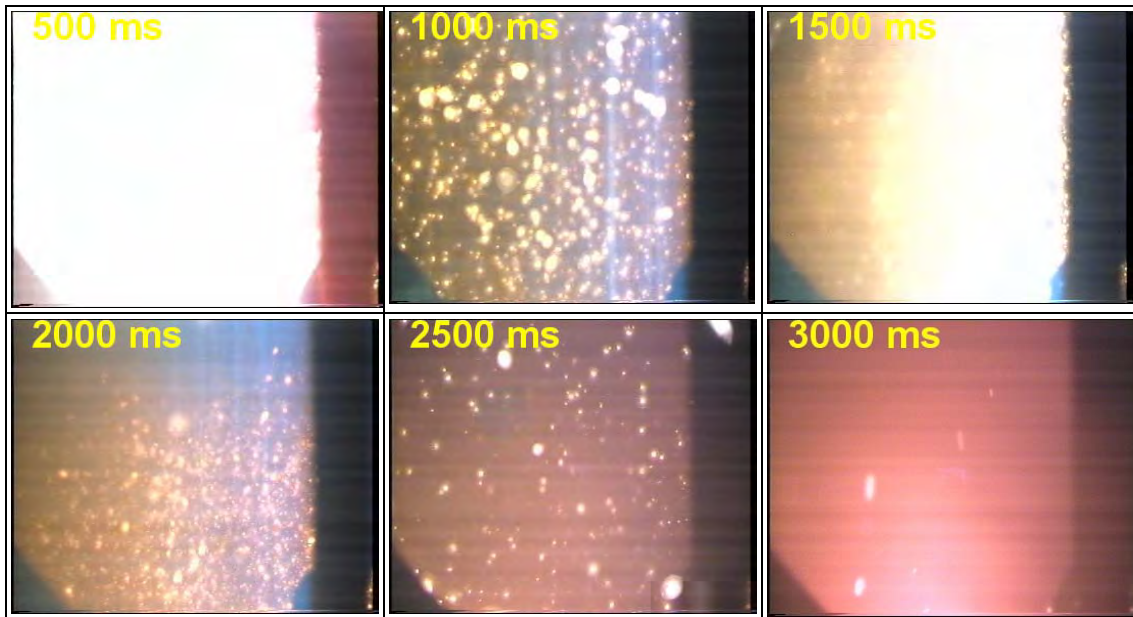
Die Entrainment-Rate aus Gl. (3-3) wird durch die Gasgeschwindigkeit v_g dominiert. Diese Geschwindigkeit wird auf der Basis der Summe von Gasvolumenströmen in der Reaktorgrube berechnet, die entsprechend der Vorgabe im Input entweder auf die Austrittsflächen in der Reaktorgrube bezogen wird (Vorgabe in Input „USEVOUT = ON“), oder einen mittleren Volumenstrom zwischen dem am Eingang der Grube und dem am Ausgang der Grube repräsentiert („USEVOUT = OFF“). Da beim Entrainment ein großer Einfluss der Geometrie vermutet wird, wird für die Nachrechnung der DISCO-Versuche der Parameter „USEVOUT = ON“ verwendet, da bei dem Bezug des Gasvolumenstroms auf den Ausgang der Reaktorgrube ein maximaler Einfluss der Geometrie berücksichtigt wird, der mit der gewählten Nodalisierung weitergehend beeinflusst werden kann. Zur Ermittlung der tatsächlichen Geschwindigkeit v_g für die Entrainment-Prozesse wird dieser Volumenstrom auf eine im Input vorgewählte Querschnittsfläche projiziert. Für diese Querschnittsfläche wird in den Nachrechnungen der DISCO-Versuche die Fläche des Ringraumes zwischen RDB und Grubenwand gewählt, da die austretenden Volumenströme mit hoher Geschwindigkeit diese Engstelle passieren müssen und dort vermutlich am meisten zum Entrainment beitragen.

Da die Gasgeschwindigkeit v_g quadratisch in Gl. (3-3) eingeht, ist die Wahl der Querschnittsfläche jedoch sehr sensibel für die Berechnung des Entrainments. In diesem Zusammenhang gibt es beträchtliche Unsicherheiten, da noch zuwenig über den Entrainment-Vorgang in einer komplexen Geometrie wie der einer Reaktorgrube bekannt ist. Zur Kompensation solcher Unsicherheiten ist es daher nicht verwunderlich, dass in der Anpassung des Modells an eine gewisse Geometrie der Vorfaktor K_c in Gl. (3-3) um Größenordnungen variiert.

3.3.1.2.2 Ablagerungsprozesse (Trapping)

Aus der Videobeobachtung von fliegenden Partikeln im Containment in den DISCO-Versuchen (Beispiel H04 in den Abbildungen der Tab. 3-3) kann auf einen Zeitraum von bis zu 3 s geschlossen werden, nach dem auch die letzten Schmelzetropfen ihren Flug beendet haben.

**Tab. 3-3: Videoaufnahmen vom Versuch DISCO-H04 von einem Raumbe-
reich im Containment direkt über der Strömungsverbindung
zwischen Subcompartment und Containment.**



Für die Anpassung der Modellparameter soll vorerst auf detaillierte Vorgänge zu den Ablagerungsprozessen (z. B. Ablagerung durch gravitationsgetriebenes Herabfallen oder direkter Aufprall auf bzw. Stöße mit Strukturen) nicht eingegangen werden. Zur Vereinfachung wird eine Benutzervorgabe der Ablagerungsrate ω in den Raumzonen berücksichtigt.

Entrainment wird in CONTAIN nur in der Reaktorgrube berechnet, Ablagerung jedoch in allen Raumzonen. Es stellt sich also die Aufgabe, die Modellparameter für Entrainment K_c und die Ablagerungsrate ω zugleich so vorzugeben, dass das Integral der in den Sicherheitsbehälter eingetragenen Schmelzemasse während des Blowdown dem experimentellen Ergebnis entspricht, und die Ablagerungsrate derart bemessen ist, dass alle luftgetragenen Teilchen zeitgleich mit dem Experiment ihren Flug beendet haben.

Da in der Reaktorgrube das Entrainment eine Quelle für die luftgetragene Masse der Schmelze darstellt, wohingegen die Ablagerung zeitgleich als Senke fungiert, kann die Anpassung der Parameter an die Experimente nur im Verbund dieser beiden Parameter gesehen werden und nicht separat validiert werden. Darüber hinaus bewirkt bei den heißen Experimenten die thermische und chemische Interaktion zwischen luftgetragener Schmelze und der Atmosphäre einen Temperatur- und Druckaufbau, der wiederum auf die Strömungsgeschwindigkeiten und damit auf das Entrainment rückkoppelt. Die

Parameteranpassung an eine Experimentreihe in einer speziellen Geometrie ist damit sehr komplex.

Eine Unsicherheit in den Modellen in CONTAIN ist die Charakterisierung der abgelagerten Schmelze in den Raumzonen. Hier muss im Input ein typischer Durchmesser der Teilchen definiert werden, da die Information über die Teilchengröße bei deren Ablagerung verloren geht. Wenn sich später herausstellen sollte, dass die Verfolgung eines Größenspektrums mit mehreren Größenklassen für die realistische Simulation der Phänomene unumgänglich sein wird, so kann unmöglich bereits im Input die Größe der abgelagerten Teilchen in den verschiedenen Raumzonen festgelegt werden. In COCOSYS sollen daher die Größenklassen der luftgetragenen Schmelze bei der Ablagerung der Tropfen übernommen werden. Zur Reduktion der unbekannt Parameter wird in CONTAIN die Wechselwirkung der abgelagerten Teilchen ausgeschaltet. Dies ist mit der Vorstellung verbunden, dass die Teilchen bei der Ablagerung durch den Aufprall all ihre Energie instantan und unmerklich an die Struktur übergeben und nicht weiter zur Aufheizung der Atmosphäre beitragen.

3.3.1.2.3 Wärmeübergänge

In den DISCO-Experimenten H04 und LACOMERA-L1 wird die Schmelzeaustragung aus dem RDB durch Stickstoff anstelle von Wasserdampf getrieben. Diese Experimente sind sehr gut geeignet, um die Wärmeübergangparameter in CONTAIN an die Thermohydraulik-Ergebnisse der Experimente anzupassen. Zwecks Reduktion der noch unbekannt Parameter wird für die CONTAIN-Rechnungen der konservative Fall angenommen, dass die Wärme von den Schmelzetropfen ausschließlich an die jeweilige Raumatmosphäre abgegeben wird und nicht direkt an die Strukturen. Indirekte Wärmeübergänge über die Atmosphäre an die Strukturen sind jedoch möglich.

Die modellseitig vorhandenen multiplikativen Parameter für die Strahlung zwischen Teilchen und Atmosphäre sowie für den konvektiven Wärmeübergang zwischen Teilchen und Atmosphäre können an die Temperatur- und Druckeskalation in den Experimenten angepasst werden wenn folgende Aspekte sichergestellt sind:

- Anfangsdrücke und -temperaturen sind hinreichend genau bekannt und in der Rechnung entsprechend vorgegeben.

- Die berechnete Größenverteilung der luftgetragenen Partikel stimmt mit dem Experiment überein bzw. die berechnete Größenverteilung repräsentiert ein mit dem Experiment übereinstimmendes Oberfläche-zu-Volumenverhältnis.
- Das Integral der in der Rechnung aus der Reaktorgrube ausgetragenen Masse stimmt mit dem Experiment überein.

3.3.1.2.4 Iterative Anpassung der Parameter für Entrainment, Trapping und Wärmeübergänge

Um die Überprüfung der Modelle in CONTAIN für die Entscheidung zur Übernahme in COCOSYS in akzeptablem Rahmen zu halten, wird unter den genannten Aspekten in den Abschnitten 3.3.1.2.1 bis 3.3.1.2.3 folgende Vorgehensweise verfolgt:

1. Gestartet wird von einem „Arbeitspunkt“ für K_c aus, bei dem in der vorgegebenen Geometrie (inklusive der zur Verfügung stehenden Strömungswege) und unter den vorgegebenen Rand- und Startbedingungen (Drücke, Lochgröße etc.) ein Entrainment berechnet wird, welches im Integral über die ausgetragene Masse dem Experiment möglichst nah kommt. Für die DISCO-Versuche kann als Startwert $K_c = 1000$ angesetzt werden.
2. Im zweiten Schritt wird die Ablagerungsrate ω so an das Experiment angepasst, dass die Flugzeiten der luftgetragenen Teilchen in Experiment und Rechnung ungefähr übereinstimmen. Gestartet wurde hier mit $\omega = 5 \text{ s}^{-1}$, was zu einer vergleichsweise kurzen Flugzeit von ungefähr 1 s führt.
3. Im dritten Schritt werden die Parameter RADGAS für den radiativen und HTCMUL für den konvektiven Wärmetransport zwischen Teilchen und Atmosphäre an die Druck- und Temperatureskalation in den Experimenten angepasst. Dies hat Rückwirkungen auf das Entrainment (Schritt 1), vgl. Abb. 3-16.
4. Iterative Bearbeitung der Punkte 1-3 bis ein zufrieden stellendes Ergebnis gefunden wurde.

3.3.1.3 Rechenergebnisse für DISCO-H04 nach Anpassung der Parameter

Das Experiment DISCO-H04 ist das einzige Experiment in EPR-Geometrie, in welchem die Austragung der Schmelze aus dem RDB mit Stickstoff als treibendem Gas erfolgte (Tab. 3-4). Infolge der verringerten Relevanz chemischer Vorgänge bei diesem Experiment eignet es sich im Besonderen zur Anpassung der Parameter für Entrainment, Ablagerung und Wärmetransport der luftgetragenen Schmelzeteilchen wie in 3.3.1.2 besprochen.

Der direkte Strömungsweg aus der Grube nach oben in das Containment war bei diesem Experiment geöffnet, was ein Versagen der Grubenabdichtung (durch das Dichtblech zwischen RDB und Traganker) simuliert. Der anfängliche RDB-Druck ist mit ca. 9 bar vergleichsweise niedrig. Der Soll-Durchmesser des zentralen Lecks am Boden des RDB betrug 56 mm.

Tab. 3-4 Überblick über die zur Verfügung stehenden heißen Versuche in der DISCO-Anlage.

	H02 (Basis-Fall)	H01	H03	H04	H05	H06	FH02 franz. Geo- metrie
RDB-Druck (MPa)	1,2	0,8	1,2	0,89	1,2	2,0	1,92
Öffnung der Grube nach oben	offen	offen	geschlos-sen	offen	geschlos-sen	offen	offen
Treibendes Gas	Dampf	Dampf	Dampf	Stick-stoff	Dampf	Dampf	Stick-stoff
Leckgröße	56 mm	56 mm	56 mm	56 mm	25 mm	25 mm	56 mm

Für die Rechnung wird aufgrund der Untersuchungen in Abschnitt 2.2.1.3 eine endliche Zeit von ca. 70 ms angesetzt, während der sich das Leck auf den Soll-Durchmesser von 56 mm linear aufweitet.

Die Nodalisierung der Versuchsanlage im Versuch H04 für CONTAIN ist in Abb. 3-17 skizziert.

Die Schmelze wird als Quelle für die abgelagerte Masse im RDB per Tabelle im Eingabedatensatz in einem kurzen Zeitraum vor Öffnen des Loches vorgegeben. Nach dem Öffnen des Loches bei $t = 0$ s erfolgt eine Umverlagerung der Schmelze gem. der Gl. (2-1) vom RDB auf den Boden der Reaktorgrube. Mit Einsetzen des Blowthrough wird

ein Austrag von Gas aus dem RDB in die Reaktorgrube berechnet und es ergeben sich nennenswerte Strömungsgeschwindigkeiten in der Reaktorgrube, die zu einem massiven Eintrag von Schmelze aus der Grube in die Gasströmung und zum Mitriss der Schmelze in andere Raumbereiche innerhalb des Sicherheitsbehälters führen.

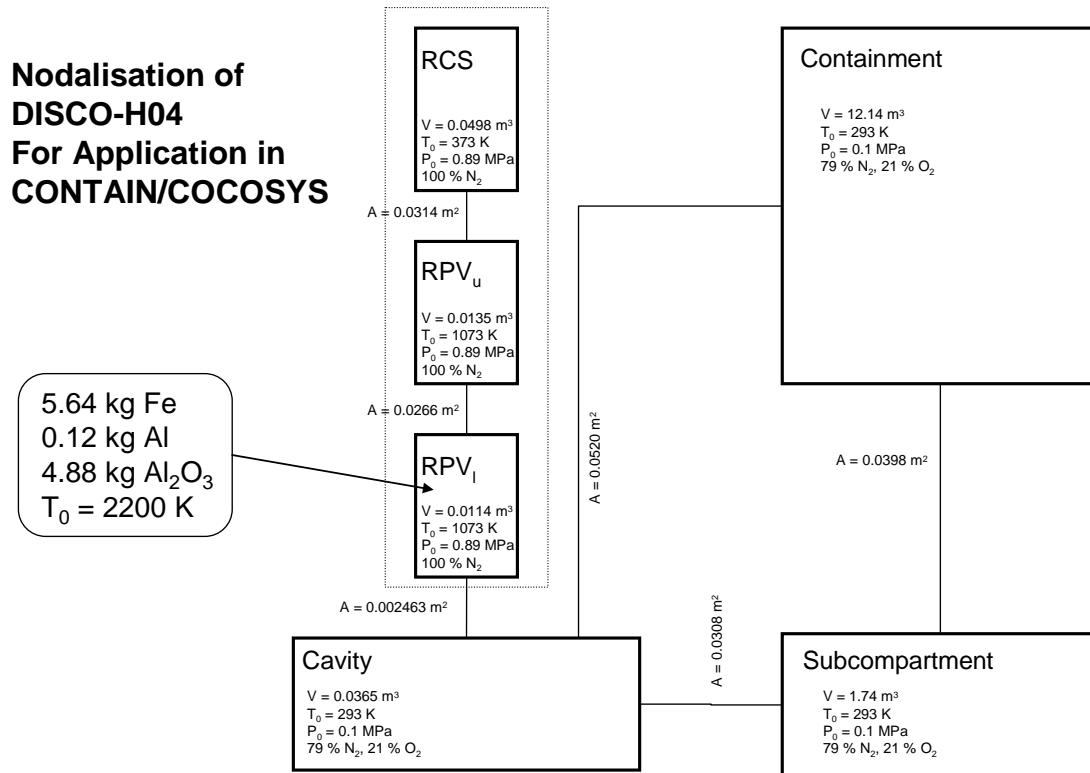


Abb. 3-17: Nodalisierung der DISCO-Versuchsanlage für den Versuch H04.

Die Ergebnisse der Anpassung von Modellparametern an H04 sind in Tab. 3-5 zusammengefasst.

Tab. 3-5: Ergebnis der Parameteranpassung für H04.

Parameter	Anpassung an DISCO-H04
K _c	200
ω	2 s ⁻¹
RADGAS	0,1
HTCMUL	0,1
DIFO2	1,0

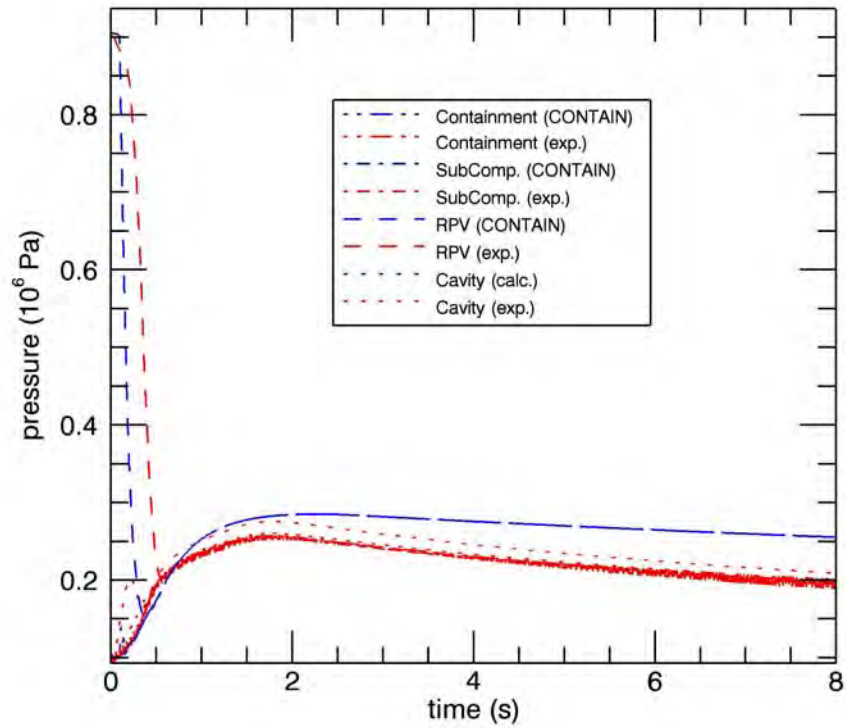


Abb. 3-18: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die Drücke nach Anpassung der Parameter.

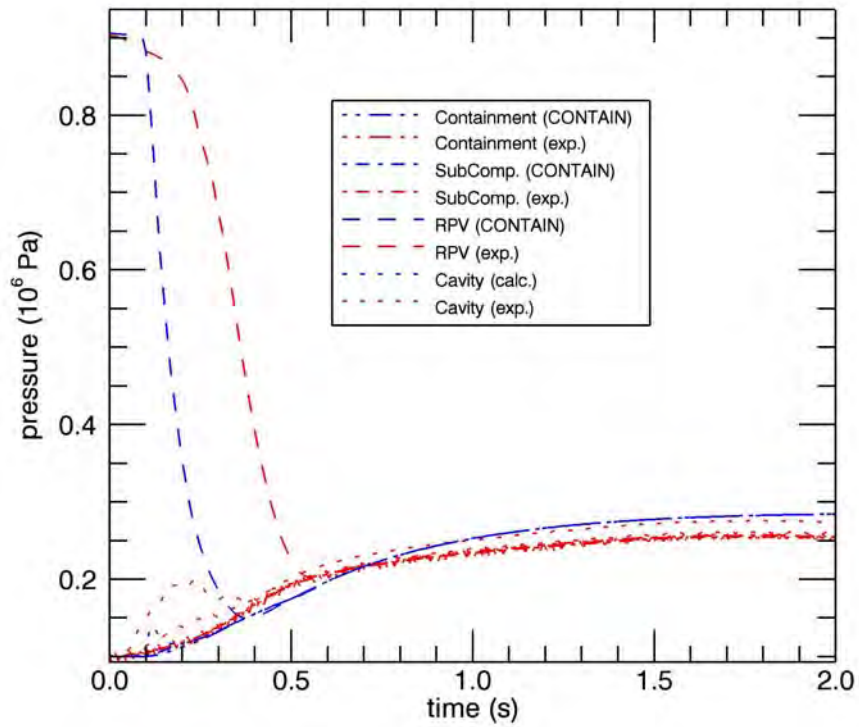


Abb. 3-19: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die Drücke in den ersten 2 s nach Anpassung der Parameter.

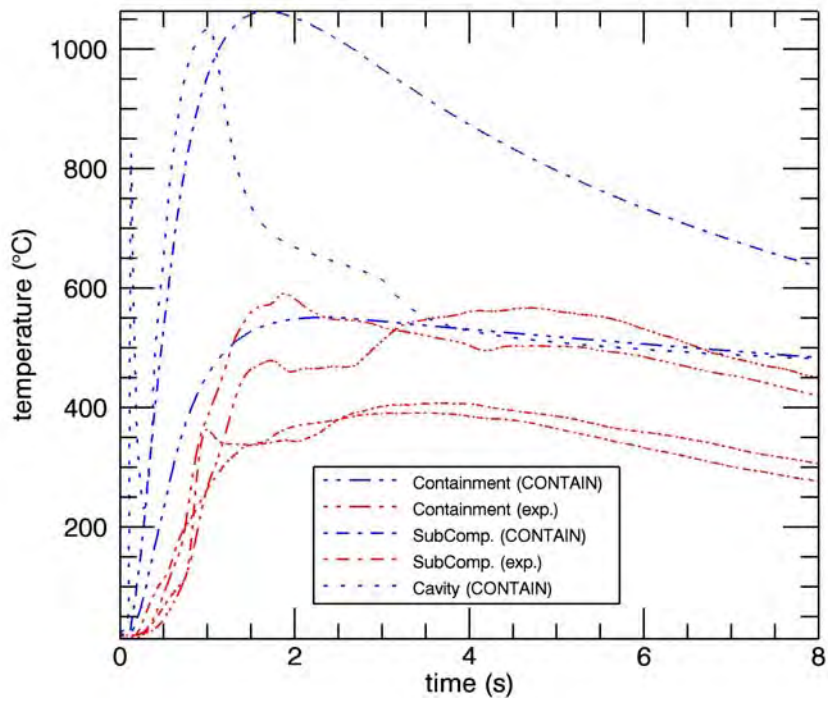


Abb. 3-20: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die Temperaturen nach Anpassung der Parameter.

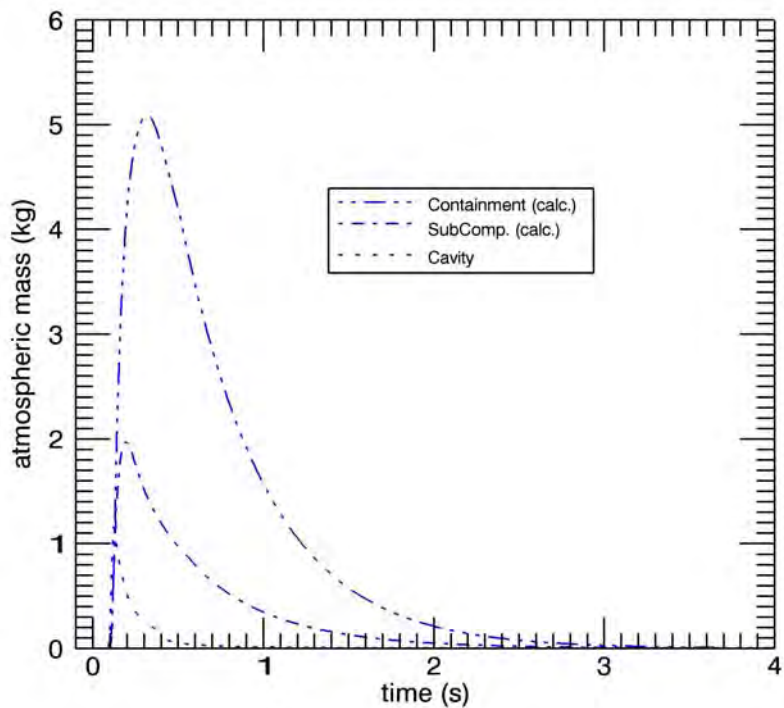


Abb. 3-21: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die atmosphärisch getragene Schmelzmasse nach Anpassung der Parameter.

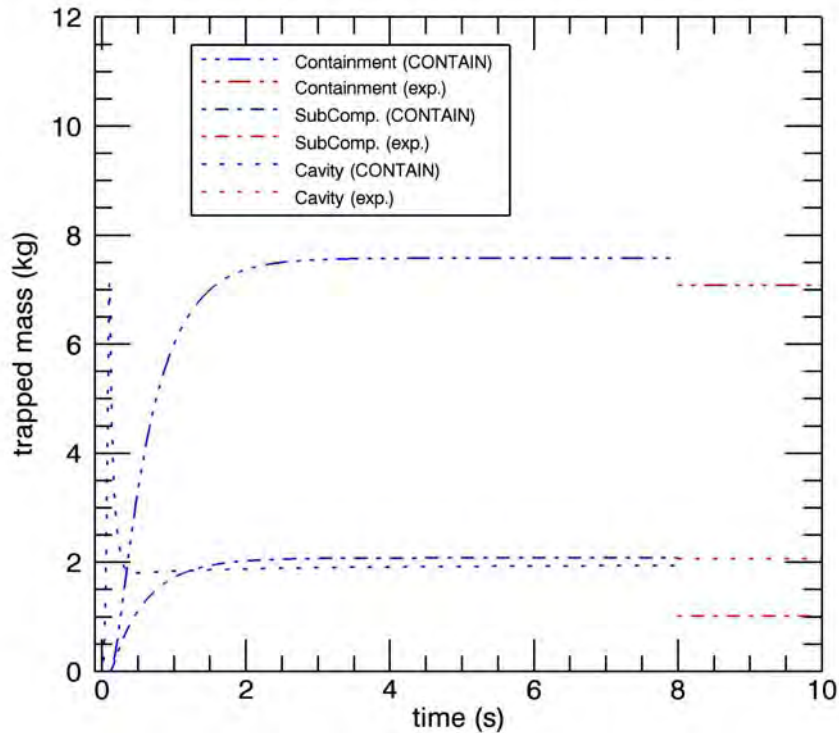


Abb. 3-22: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die abgelagerte Schmelzmasse nach Anpassung der Parameter.

Abb. 3-21 und Abb. 3-22 zeigen, dass das mit CONTAIN berechnete Integral der in den Sicherheitsbehälter ausgetragenen Schmelzmasse gut mit dem Experiment übereinstimmt, und dass die berechneten Flugzeiten der Partikel im Vergleich zu den Videobeobachtungen (Tab. 3-3) plausibel erscheinen. Die Größenverteilung wurde als monodispers angenommen mit einem Sauter-Durchmesser der Teilchen von $d_{\text{Sauter}} = 0,475 \text{ mm}$, der aus der experimentell ermittelten Größenverteilung der Partikel nach Ende des Experimentes berechnet wurde.

Der zeitliche Druckaufbau im Containment wird in guter Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, der maximale Druck sowie das Abklingen werden dabei leicht in der CONTAIN-Rechnung überschätzt (Abb. 3-18, Abb. 3-19). In der Grube wird in der Rechnung nur eine vergleichsweise kleine Druckspitze berechnet, wahrscheinlich aufgrund der Nodalisierung in der Rechnung, in der der untere Teil der Grube, der Ringraum um den RDB sowie der obere Bereich der Grube als ein zusammengefasstes Volumen aufgefasst wird. Im Experiment wird dagegen im kleinen Raum der unteren Grube ein stärkerer Druckpeak registriert als im größeren Teilvolumen des oberen Grubenbereiches. Eine Aufteilung der Grube in der Nodalisierung in drei Zonen (unten, Ringraum, oben) könnte diesen Sachverhalt genauer simulieren.

Bei den Atmosphärentemperaturen gelingt in der CONTAIN-Nachrechnung eine gute Approximation der Temperatur im Sicherheitsbehälter, wohingegen die Temperatur im Subcompartment deutlich überschätzt worden zu sein scheint (Abb. 3-20). Dies ist erklärbar durch die Überschätzung der Schmelzmasse, die in das Subcompartment gelangt und dort abgelagert wird (Abb. 3-22). Abb. 3-21 zeigt, dass in der CONTAIN-Rechnung die atmosphärisch getragene Schmelzmasse im Subcompartment zwischenzeitlich etwa 40 % von der atmosphärisch getragenen Masse im Sicherheitsbehälter beträgt. Im Experiment zeigt die vorgefundene Massenverteilung, dass das Gros der fliegenden Schmelzepartikel direkt in das Containment gelangt, und nur ein kleinerer Bruchteil als wie berechnet über den im Vergleich zum direkten Weg um 90° umgelenkten Strömungsweg entlang der Hauptkühlmittelleitungen in das Subcompartment gelangt.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die wesentlichen Phänomene bei dem Versuch DISCO H04 nach sorgfältiger Anpassung von Modellparametern zufriedenstellend wiedergegeben werden.

3.3.1.4 Rechenergebnisse für DISCO-H04 ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen

Den Einfluss der chemischen Reaktionen in den Modellen in CONTAIN am Beispiel des Versuches H04 zeigt die Abb. 3-23. In dieser Rechnung blieben alle chemischen Reaktionen und deren Energiefreisetzen in der Nachrechnung von H04 unberücksichtigt (erreicht wird dies mit der Parametereinstellung DIFO2 = 0). Die Drücke im Experiment wurden auf diese Weise stark unterschätzt. Mit Berücksichtigung der Energiefreisetzung (DIFO2 = 1; Rechnung in Abschnitt 3.3.1.3) ergeben die Modelle in CONTAIN eine Produktion von ca. 4,2 kg FeO durch Oxidation von Eisen mit Sauerstoff. Die Reaktionswärme, die aus der Produktion dieser Masse FeO resultiert, ist die Hauptursache für den Unterschied bei der Druckentwicklung in den beiden Rechenfällen. Leider kann die produzierte Masse an Eisenoxid innerhalb dieses Zeitraumes nicht mit dem Experiment verglichen werden.

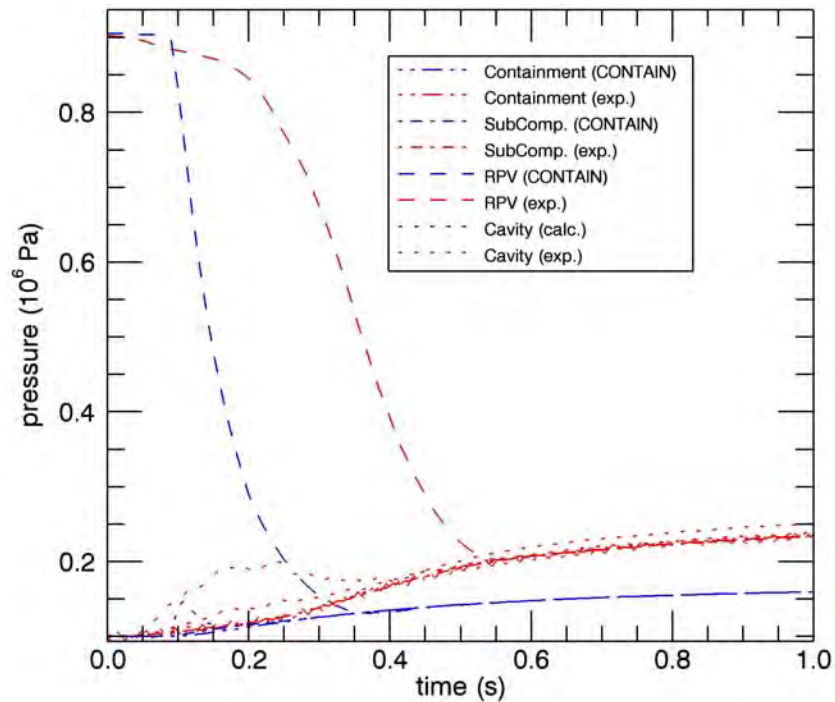


Abb. 3-23: DISCO-H04: Rechenergebnisse für die Drücke ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen.

3.3.1.5 Rechenergebnisse für DISCO-H02

Der nächste Schritt bei der Beurteilung der Modelle in CONTAIN erfolgt über die Nachrechnung eines Experimentes mit Wasserdampf, in dem die chemischen Reaktionen mit Wasserdampf einen zusätzlichen wesentlichen Beitrag zur Phänomenologie geben.

Das Experiment H02 ist dafür der geeignete Kandidat (siehe Tab. 3-4), da das Experiment bis auf den Ersatz von Stickstoff durch Dampf in allen Parametern nahezu ähnlich zu H04 ist.

3.3.1.5.1 Rechnung ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen

In einer ersten Nachrechnung hierzu wurden alle chemischen Reaktionen nicht berücksichtigt (Abb. 3-24 bis Abb. 3-27, Modellparameter $DIFO_2 = DIFH_2O = 0$). Da in der Rechnung alle wesentlichen Randbedingungen denen bei dem Versuch H04 entsprechen (bis auf den Ersatz von Stickstoff durch Wasserdampf und den etwas angehobenen RDB-Druck in H02) zeigt die Rechnung quantitativ ähnliche Ergebnisse. Wie erwartet werden die Drücke in den Räumen des Sicherheitsbehälters unterschätzt, da

die energetischen Beiträge der chemischen Reaktion im Vergleich zum Experiment unberücksichtigt bleiben.

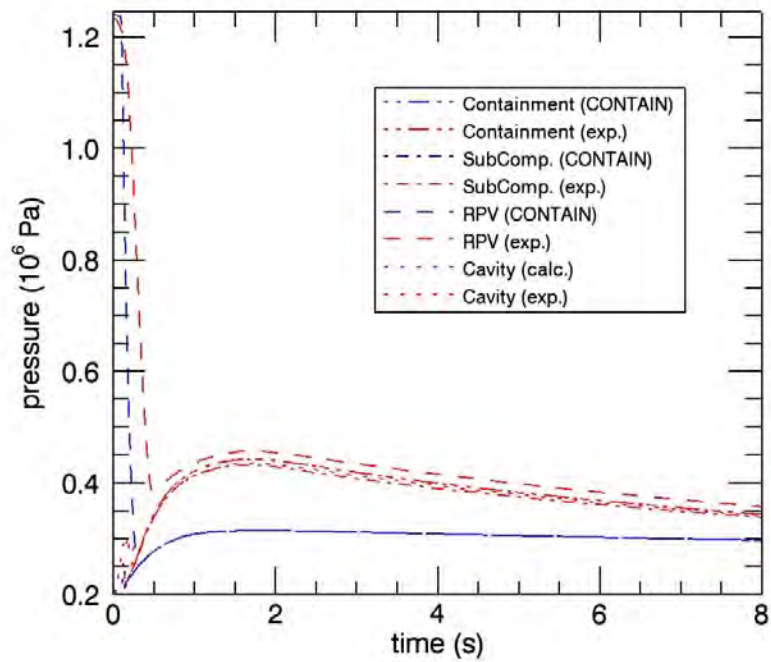


Abb. 3-24: DISCO-H02: Rechenergebnisse (ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen und mit $K_c = 200$) für die Drücke.

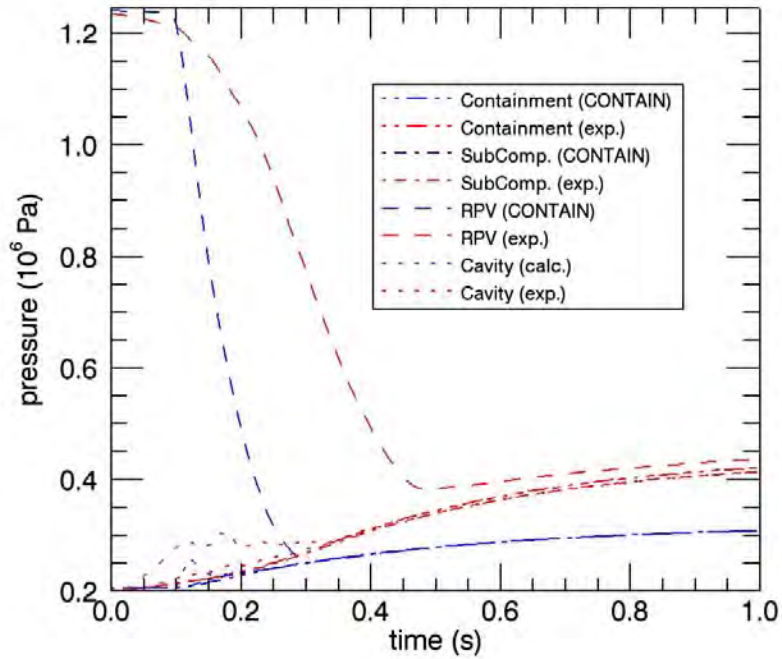


Abb. 3-25: DISCO-H02: Rechenergebnisse (ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen und mit $K_c = 200$) für die Drücke innerhalb der ersten Sekunde.

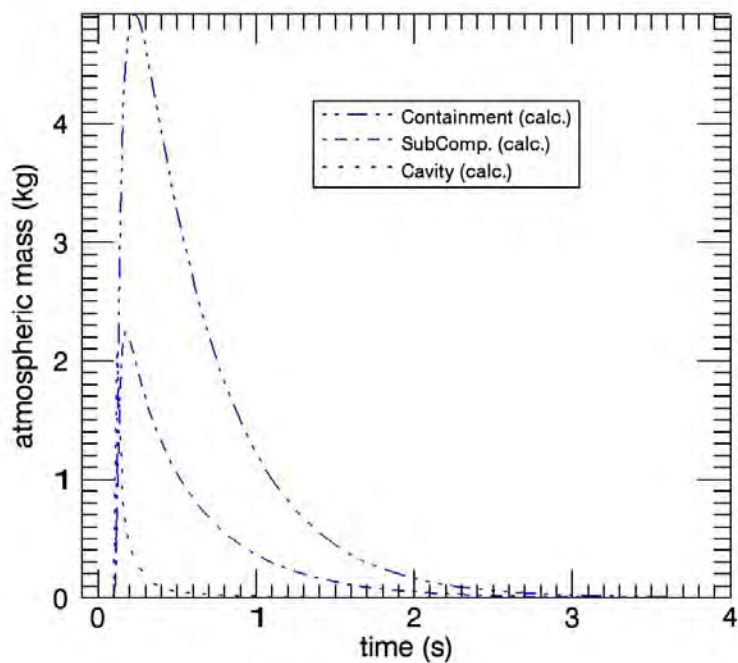


Abb. 3-26: DISCO-H02: Rechenergebnisse (ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen und mit $K_c = 200$) für die atmosphärisch getragene Schmelzmasse.

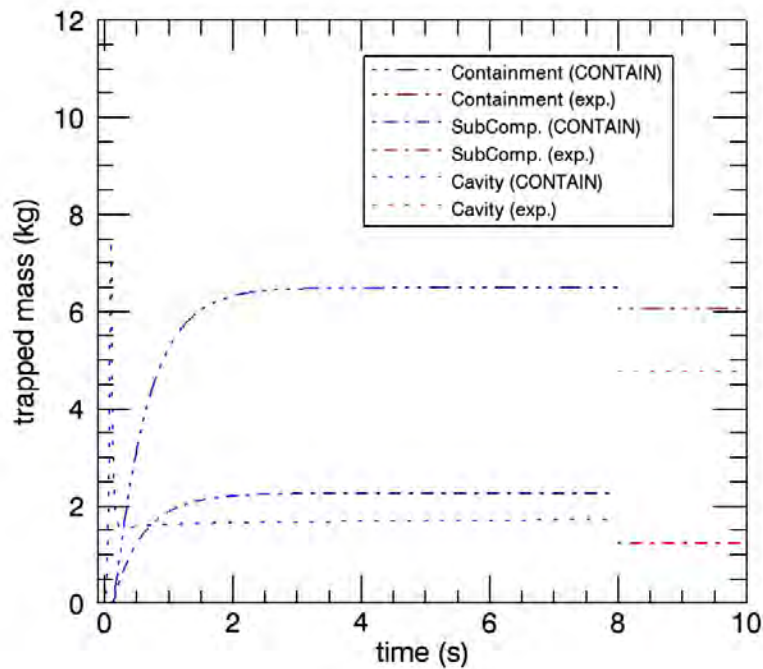


Abb. 3-27: DISCO-H02: Rechenergebnisse (ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen und mit $K_c = 200$) für die abgelagerte Schmelzmasse.

Im Vergleich zum Experiment wird in dieser Rechnung aber sehr viel mehr Masse aus der Grube ausgetragen als im Experiment (Abb. 3-27). Die Unterschätzung der Drücke in der Rechnung ist daher umso gravierender, weil in der Rechnung viel mehr fragmentierte Schmelze mit der Atmosphäre wechselwirkt als im Experiment.

3.3.1.5.2 Rechnung mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen

Bei der erstmaligen Nachrechnung eines Experiments mit Wasserdampf wie im Falle von DISCO-H02 sind zwei wichtige Parameter anzupassen:

1. Der Multiplikator für den Stoffübergangskoeffizienten für die gasseitige Diffusion von O_2 an die Oberfläche der Schmelzetröpfchen („DIFO2“).
2. Der Multiplikator für den Stoffübergangskoeffizienten für die gasseitige Diffusion von H_2O an die Oberfläche der Schmelzetröpfchen („DIFH2O“).

Da die chemischen Reaktionen direkten Einfluss auf den Druckaufbau in den Zonen haben, ist eine Anpassung der neuen Parameter nur möglich, wenn davon ausgegangen werden kann, dass alle anderen Modellparameter bereits korrekt bestimmt sind

und die berechnete Masse der aus der Grube in die Gasströmung mitgerissenen Schmelze – und damit die für chemische Reaktionen als Reaktionspartner in erster Linie zur Verfügung stehende Masse – in Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet wird.

Aufgrund der noch vorhandenen Unsicherheiten bei der Prognose des Entrainments ist jedoch ein gegenüber der Nachrechnung des Experimentes H04 geänderter Parameter K_c zur Erfüllung der vorgenannten Bedingung notwendig: $K_c \approx 100$ statt 200. Mit diesem geänderten Parameter wird für das Experiment H02 unter Beibehaltung aller anderen bereits festgelegten Parameter die richtige Masse der aus der Grube ausgetragenen Schmelze berechnet.

Mit dieser Korrektur wurden dann die gesuchten Parameter DIFO2 und DIFH2O im Wertebereich zwischen 0 und 1 so bestimmt, dass Druck und Temperaturverläufe mit den Messdaten im Experiment H02 einigermaßen übereinstimmen. Zur Vereinfachung wurden identische Werte für DIFO2 und DIFH2O angenommen. Das Ergebnis dieser Parameteranpassung ist in Tab. 3-6 zusammengefasst.

Die detaillierten Rechenergebnisse nach Anpassung von K_c sowie DIFO2 und DIFH2O sind den Abb. 3-28 bis Abb. 3-32 zu entnehmen.

Tab. 3-6: Ergebnis der Parameteranpassung für H02.

Parameter	Anpassung an DISCO-H02
K_c	100
ω	2 s^{-1}
RADGAS	0,1
HTCMUL	0,1
DIFO2	0,1
DIFH2O	0,1

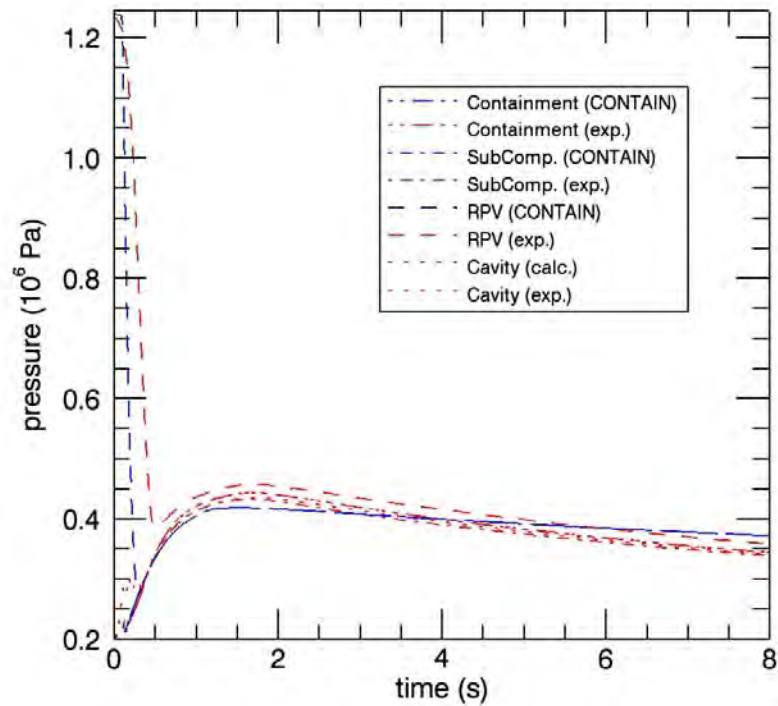


Abb. 3-28: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen und $K_c=100$) für die Drücke.

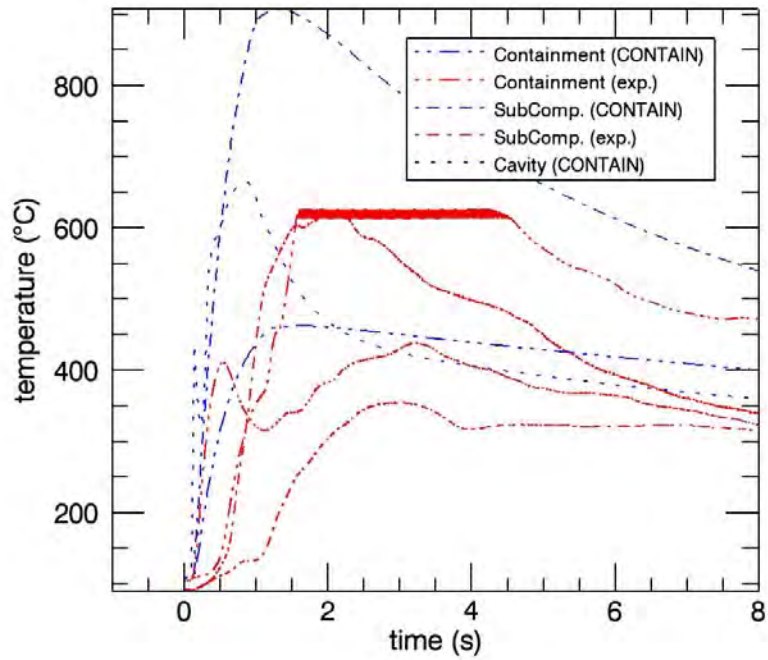


Abb. 3-29: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen und $K_c=100$) für die Temperaturen.

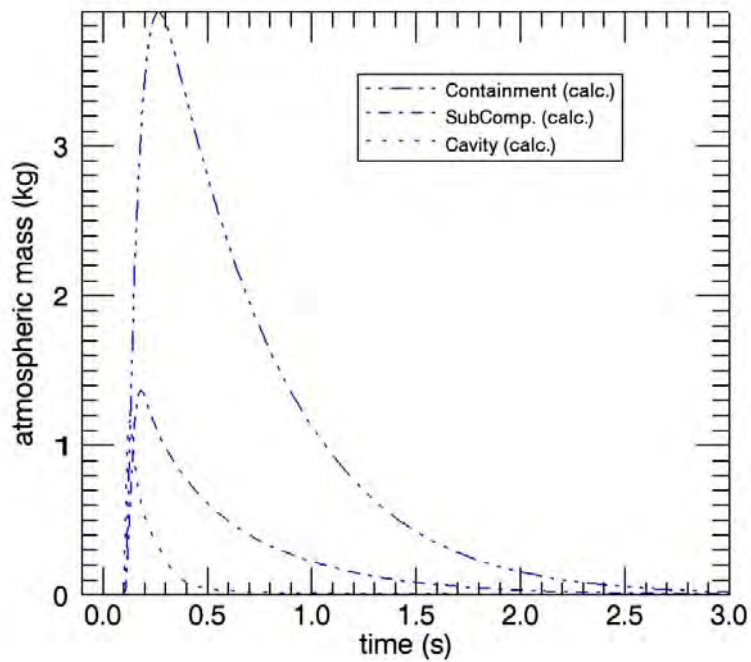


Abb. 3-30: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen und $K_c=100$) für die atmosphärisch getragenen Schmelzmassen.

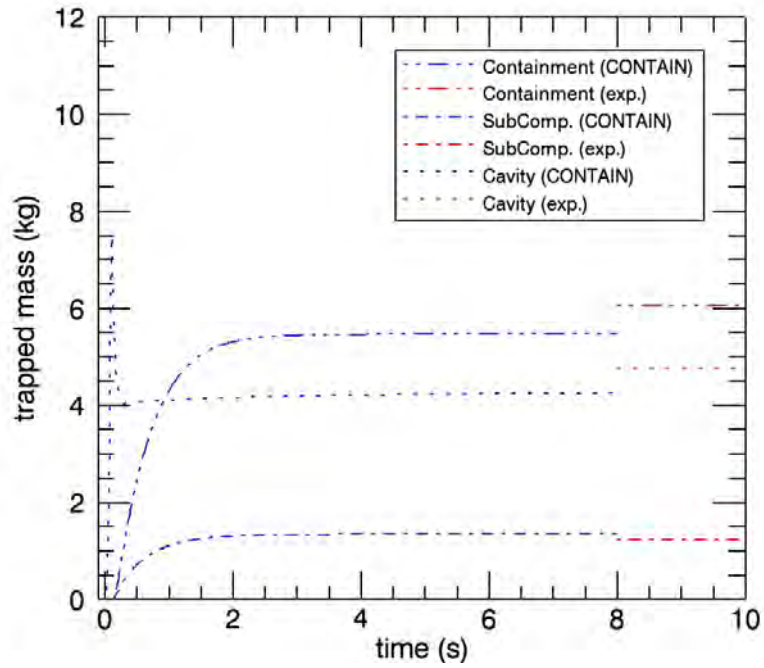


Abb. 3-31: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit Berücksichtigung chemischer Reaktionen und $K_c=100$) für die abgelagerten Massen.

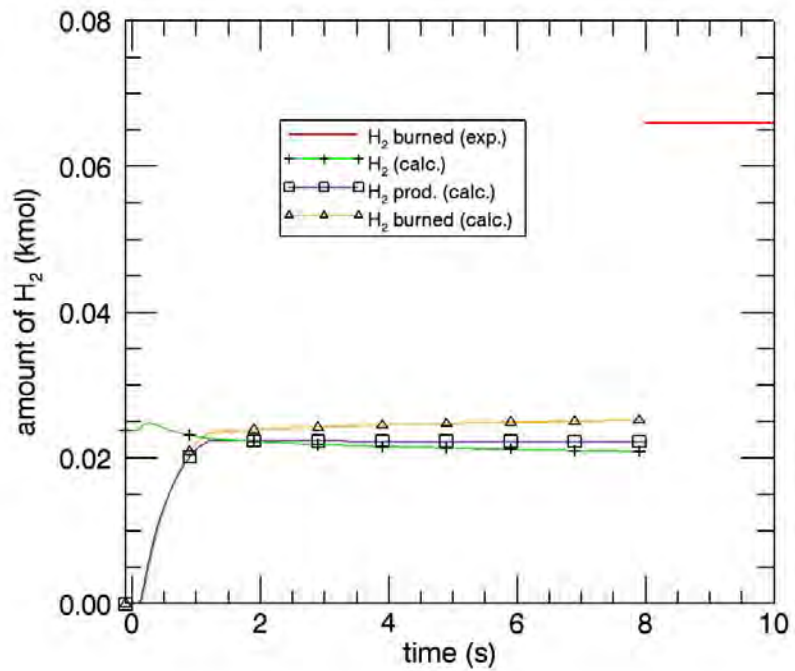


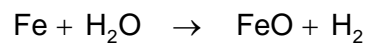
Abb. 3-32: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit $K_c=100$) für die produzierte und verbrannte Wasserstoffmenge.

Abb. 3-32 zeigt, dass trotz Übereinstimmung der wesentlichen Größen (Druck, Temperatur, aufgewirbelte Masse) die Menge an produziertem und verbranntem Wasserstoff

gegenüber dem Experiment unterschätzt wird. In der Rechnung werden 22 mol H₂ produziert und 25 mol H₂ verbrannt. Die Auswertung der Gaszusammensetzung im Experiment ergab, dass an H₂ ca. 54 mol produziert und ca. 66 mol verbrannt werden.

Dies stellt eine Inkonsistenz insofern dar, als mit einer größeren Menge an produziertem und verbranntem Wasserstoff in der Rechnung die Druckerhöhung größer ausfiel und diese dann nicht mehr in Übereinstimmung mit dem Experiment wäre.

Eine zweite Inkonsistenz betrifft die Menge an produziertem Eisenoxid: Aus der Menge an produziertem Wasserstoff von 54 mol im Experiment kann auf mindestens eine ebensolche Menge an produziertem Eisenoxid geschlossen werden, welches durch die Reaktion



entsteht. Darüber hinaus entsteht Eisenoxid auch durch die Oxidation mit dem Luftsauerstoff. Wird eine Mindestmenge von 54 mol FeO aufgrund der Reaktion mit Wasserdampf und der entsprechenden Produktion von Wasserstoff angesetzt, so ergibt sich mit der Molmasse von FeO von 72 g/mol eine Mindestmasse von 3,9 kg an produziertem FeO. Mit den wegen der zu starken Wärmeentwicklung auf den Wert 0,1 reduzierten Multiplikatoren DIFO₂ und DIFH₂O werden aber insgesamt nur 1,8 kg FeO produziert. Die Prognose von 4,2 kg an produziertem Eisenoxid in der Rechnung für H₀₄ mit DIFO₂ = DIFH₂O = 1 war im Gegensatz sehr realistisch.

Dass die Standardwerte für die Parameter DIFO₂ und DIFH₂O aus der Sicht der chemischen Bilanz bessere Übereinstimmungen zum Experiment ergeben zeigt die Rechnung in der Abb. 3-33, in der die Multiplikatoren DIFO₂ und DIFH₂O auf den Standardwert 1 gesetzt wurden. Hierfür wird eine Masse von ca. 2,83 kg an produziertem FeO berechnet (Vergleichswert aus dem Experiment: 3,9 kg). Auch die Mengen an umgesetztem Wasserstoff werden in besserer Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet, aber die Drücke eskalieren zu stark (Abb. 3-34) aufgrund der hohen freigesetzten Reaktionswärme aus der Oxidationen von Metallen sowie der Wasserstoffverbrennung.

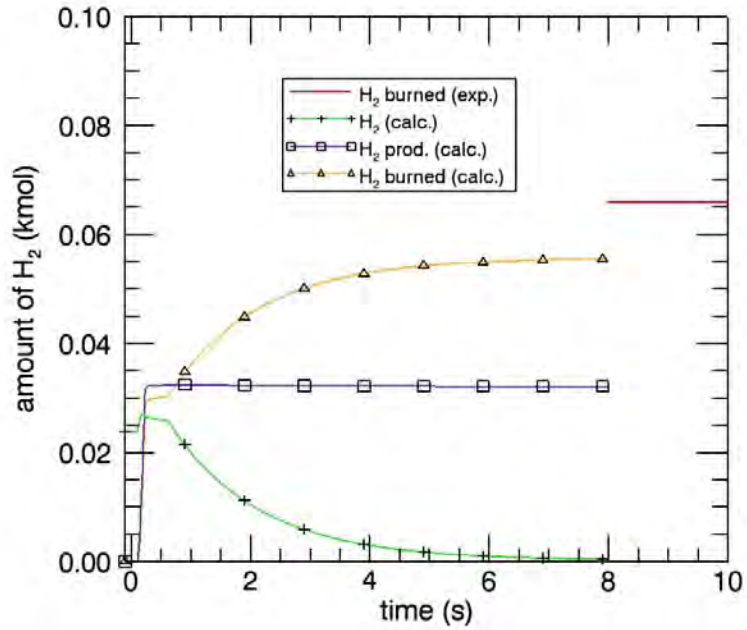


Abb. 3-33: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit $K_c=100$ sowie $DIFO_2 = DIFH_2O = 1$,) für die produzierte und verbrannte Wasserstoffmenge.

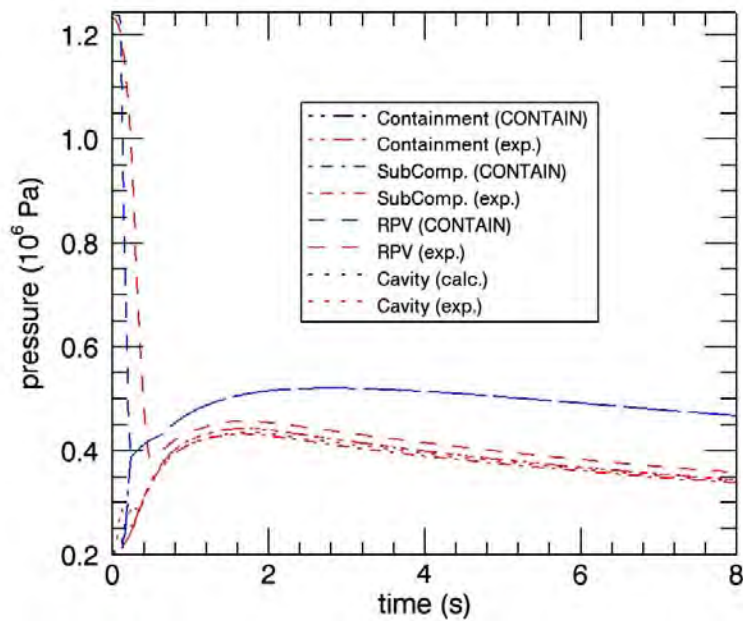


Abb. 3-34: DISCO-H02: Rechenergebnisse (mit $K_c=100$ sowie $DIFO_2 = DIFH_2O = 1$) für die Drücke.

Abgesehen von den skizzierten Problemen bei der Anpassung der Multiplikatoren $DIFO_2$ und $DIFH_2O$ für den gaseitigen Massenaustausch in der vergleichenden Be-

trachtung der Experimentnachrechnungen zu H02 und H04 kann als Ergebnis eine Empfehlung zur Übernahme der wesentlichen Modelle aus CONTAIN für COCOSYS ausgesprochen werden.

3.3.2 Nachrechnung von Experimenten in französischer Geometrie (P'4)

Die Anpassung der gefundenen Parameter wurde anhand der Versuche in der Geometrie einer französischen 1300 MW_e-Anlage überprüft. Im SARNET-Rahmen wurden allen interessierten Partnern die Daten des Experimentes LACOMERA-DISCO-L1 für einen internationalen Vergleich der existierenden Rechencodes zu DCH zur Verfügung gestellt.

Wie bei DISCO-H02 handelt es sich hierbei um ein Experiment mit Stickstoff als treibendem Gas. Als Schmelzesimulation wurde das gleiche Material (Fe und Al₂O₃) und die gleiche Menge wie bei DISCO-H04 verwendet. Auch sonst sind einige Parameter, die in der Input-Vorgabe für eine nulldimensionale Modellierung benötigt werden, ähnlich wie bei DISCO-H04 (Tab. 3-7). Einen wichtigen Unterschied in den Randbedingungen stellt der höhere RDB-Druck dar.

Die tatsächlichen Unterschiede in den detaillierten Geometrien der Anlagen können – abgesehen von den Parametern der Tab. 3-7 – in einer nulldimensionalen Modellierung nur teilweise erfasst werden. Quantitativ müssten die Rechenergebnisse daher weitgehend vergleichbar mit einer fiktiven Rechnung in der Geometrie von DISCO-H04 sein, welche bei größerem Druck als bei H04 durchgeführt worden wäre (1,92 MPa statt 0,89 MPa). Die gewählte Nodalisierung trägt dem engeren Ringraum gegenüber DISCO-H04 Rechnung, indem die Grube als zwei über diesen Ringraum verbundene Volumina aufgefasst wird („Cavity“ und „Intermediate Space“ in Abb. 3-35). Die Nische (vgl. Geometrie der Versuchsanlage in Abb. 3-12 auf Seite 48) wird als zusätzliches Volumen der Grube zugeordnet. Am Boden der Reaktorgrube kann Schmelze über einen Kanal in den sogenannten „Bottom Access“ getrieben werden. Von dort kann sie – vorausgesetzt dass sie luftgetragen ist – über einen Lüftungskanal in das große Volumen des Sicherheitsbehälters gelangen.

Abweichend von den Nachrechnungen für die DISCO-Versuche H04 und H02 wurde die tatsächliche Größenverteilung der Schmelzepartikel, die nach Ende des Experimentes vorgefunden wurden, mit 10 Größenklassen in der Rechnung angenähert, statt

nur eine Größenklasse mit dem Sauter-Durchmesser der Partikelverteilung zu verwenden.

Für die Nachrechnung von DISCO-L1 wurden dieselben Modellparameter gewählt, die zuletzt an das heiße Experiment DISCO-H02 angepasst worden waren (Tab. 3-6). Die Ergebnisse in den Abb. 3-36 bis Abb. 3-39 zeigen, dass die Rechenergebnisse sehr gut mit den experimentellen Daten übereinstimmen. Allerdings wird auch hier der Zeitpunkt des Blowthrough unterschätzt, wie bereits umfassend in Abschnitt 2.2.1.3 diskutiert.

Die Ergebnisse des Versuchs DISCO-L1 scheinen insgesamt konsistent zu DISCO-H02 zu sein (beide Experimente konnten mit identischen Modellparametern zufriedenstellend gerechnet werden). Beide Versuche können aber nicht mit identischen Modellparametern wie für H04 gerechnet werden. Für H04, das ein ausgeprägtes Entrainment zeigte, war im Modell ein doppelt so großer Vorfaktor K_c für die Entrainment-Rate nötig, wie für L1 und H02. Dies unterstreicht, dass in den Modellen noch einige Unsicherheiten bestehen. Andererseits ist zu bedenken, dass auch die Experimente eine gewisse Streuung aufweisen.

Tab. 3-7: Vergleich von ähnlichen Geometrieparametern in DISCO L1 und H04.

Geometrischer Parameter	DISCO L1	DISCO H04
Summe der Volumina von RPV und RCS	0.0759 m ³	0.0747 m ³
Leckdurchmesser	60 mm	56 mm
Summe der Querschnittsflächen die aus der Grube führen	0.0595 m ²	0.0828 m ²
Volumen des Sicherheitsbehälters	11.429 m ³	12.14 m ³

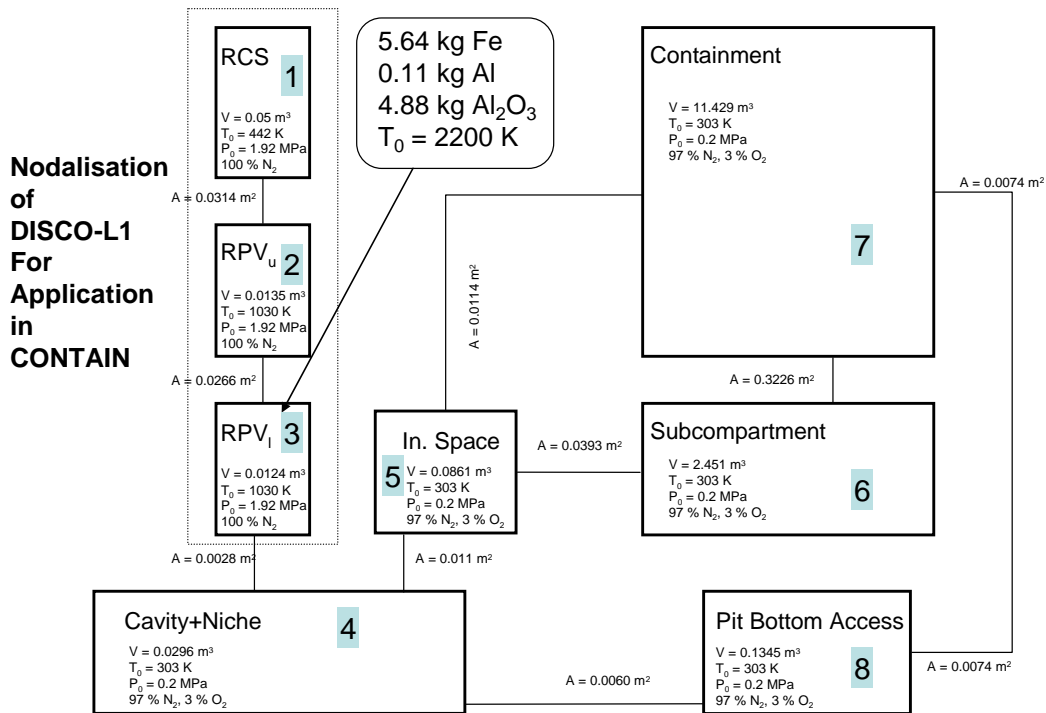


Abb. 3-35: Nodalisierung der Geometrie von LACOMERA-DISCO-L1 für die Nachrechnung mit CONTAIN.

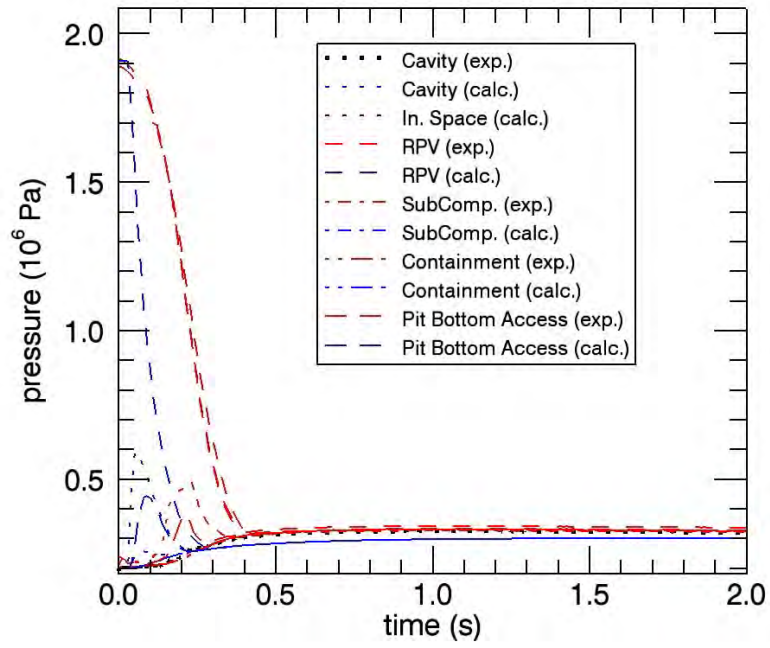


Abb. 3-36: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die Drücke.

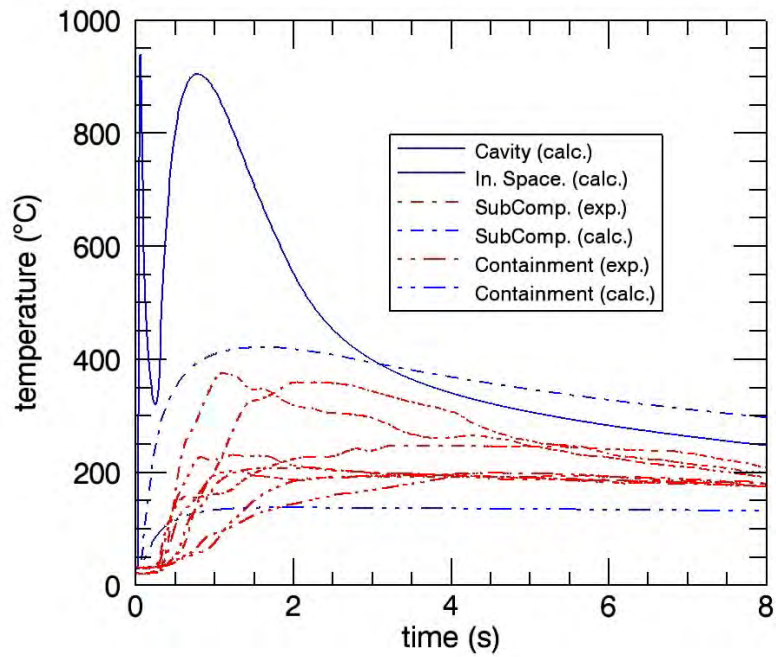


Abb. 3-37: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die Temperaturen.

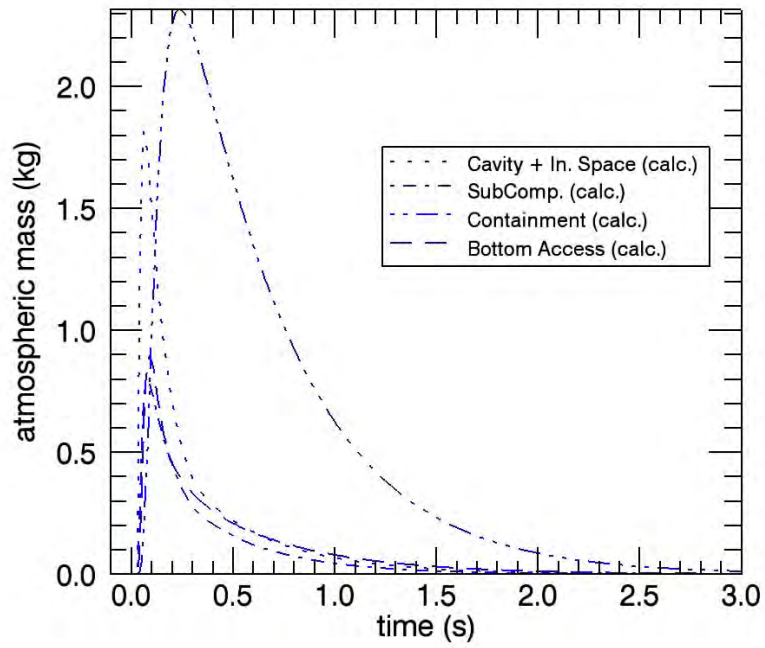


Abb. 3-38: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die atmosphärisch getragenen Massen.

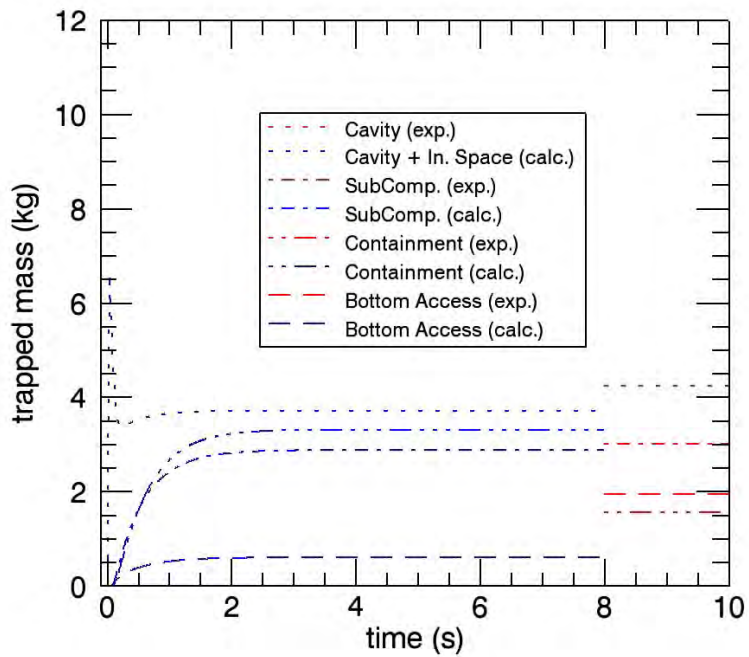


Abb. 3-39: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die abgelagerten Massen.

Der Schmelzeeintrag in den Bottom Access wird in der Rechnung stark unterschätzt (Abb. 3-39). Dies ist darauf zurückzuführen, dass im Experiment Schmelze direkt auf dem Boden (in Form eines trägen Films) in den Kanal zum Bottom Access gelangen konnte, während sie in der Rechnung aufgrund der Hypothese der Nodalisierung nur in atmosphärisch getragener Form in den Bodenzugang gelangen kann. Die Gasströmung in den Bodenzugang (und damit der Transport von Schmelze) bleibt aber aufgrund des schnellen Druckaufbaus in dem kleinen Volumen und der geringen Querschnittsfläche der Strömungsverbindung begrenzt.

4 Modellentwicklung für COCOSYS-DCH

Die Analyse der Modellierung in CONTAIN in den vorangegangenen Kapiteln 2 und 3 hat gezeigt, dass die Philosophie und Anlage der Modelle für DCH-Phänomene in CONTAIN nach derzeitigem Kenntnisstand eine ausreichende Plattform darstellen, um die wichtigsten Phänomene realitätsnah und mit ausreichendem Detaillierungsgrad zu simulieren. In einer internationalen Zusammenarbeit zum Thema DCH in SARNET wurde bestätigt, dass CONTAIN unter allen bislang verfügbaren DCH-Codes über die bei weitem mechanistischeren Ansätze verfügt /MEI 06/. Allerdings ist die Suche nach geeigneten Modellparametern aufgrund der Komplexität der Prozesse und der sehr dynamischen Abhängigkeiten schwierig. Nach derzeitigem Kenntnisstand kann allerdings noch keine wesentliche Modell-Vereinfachung vorgeschlagen werden, die entscheidend über das im Rahmen dieser COCOSYS-Entwicklung vorgenommene Maß hinausgeht und eine deutliche Reduktion der Parameterzahl zulässt, ohne Gefahr zu laufen, dass dabei gerade entscheidende Einflussgrößen vernachlässigt werden.

Für COCOSYS werden daher viele Teilmodelle analog zu den in CONTAIN vorhandenen Modellen angelegt (siehe /LAN 06/). Die Modellentwicklung für COCOSYS wird hier in einer Übersicht zusammengefasst, da eine ausführliche Darstellung im Referenzhandbuch von COCOSYS gegeben wird:

- Das Ausströmen der Schmelze aus einem Leck im RDB erfolgt über die Blenden-gleichung (2-1).
- Während dieser Ausströmung ist bereits ein Entrainment (Aufwirbeln von Schmelze-partikeln in die Gasströmung) zu erwarten. Im Unterschied zu CONTAIN, wo das Aufwirbeln erst beim Blowthrough-Zeitpunkt beginnt, wird in COCOSYS über einen Input-Parameter ein Bruchteil der ausströmenden Schmelze festgelegt, der wäh-rend des Ausströmens bereits in den atmosphärisch getragenen Zustand übergeht.
- Der Zeitpunkt des Blowthrough wird über das Kriterium nach Gluck Gl. (2-5) be-rechnet.
- Das zweiphasige Ausströmen von Gas/Dampf und Schmelze wird ähnlich wie in CONTAIN über ein Nebeneinander von Öffnungsquerschnitten für Gas/Dampf und Schmelze berechnet, wobei die in CONTAIN verwendete Korrelation nach Pilch die relativen Größen der beiden Öffnungsquerschnitte unter Einbezug von Grenzbe-dingungen festlegt. Hierbei wird die interne Wechselwirkung zwischen der trägen Schmelze und dem Gas vernachlässigt. Für die kalten Experimente mit Stickstoff

und Wasser sowie mit Stickstoff und Woods' Metall ergab sich eine ausreichende Genauigkeit. Für die heißen Experimente der DISCO-H-Versuche bestehen allerdings noch ungeklärte Unsicherheiten. Die momentan bestehenden Abweichungen zwischen Experiment und Rechnung bei den DISCO-H-Versuchen betreffen das Blowthrough-Kriterium und das zweiphasige Ausströmen. Da auch experimentelle Unsicherheiten bestehen (Aufschmelzen eines Verschlussstopfens) konnte eine eindeutige Ursache für die Abweichungen bislang nicht gefunden werden.

- In der Grube bildet die Schmelze einen zusammenhängenden Pool, der an den Schnittstellen mit der Containment-Atmosphäre sowie mit den Strukturen wechselwirkt.
- Die in CONTAIN verfügbaren Korrelationen für die Entrainment-Rate $\dot{\epsilon}$ bzw. für den integralen, aus der Reaktorgrube ausgetragenen Anteil von Schmelze konnten im Verlauf des Vorhabens nicht eingehend bewertet werden. Eine wissenschaftliche Beurteilung der besonderen Qualifikation einer dieser Korrelationen auf Basis von CONTAIN-Anwendungen konnte nicht erfolgen. Dies gilt insbesondere deswegen, weil verschiedene Korrelationen mit unterschiedlich gewählten Vorfaktoren zu ähnlichen Rechenergebnissen in CONTAIN geführt haben. Aus pragmatischen Gründen wurde der Ansatz der Entrainment-Raten-Korrelation nach Whalley-Hewitt als Referenzmodell gewählt. Dieser Ansatz stellt nach der Beurteilung aus früherer Arbeit /WIL 96/ eine akzeptable Näherung dar und erwies sich zudem als recht stabil in Beispielanwendungen mit CONTAIN. Dieser Ansatz wird für COCOSYS in Verbindung mit einem Kutateladze-Kriterium vorgesehen, welches den Start bzw. das Ende des Entrainment-Vorganges als Funktion der Gasgeschwindigkeit berechnet.
- Sobald Schmelzeanteile in das luftgetragene Feld übergehen, werden diese in Größenklassen eingeordnet. Die Einordnung in die Größenklassen kann dynamisch über eine Log-Normalverteilung unter Zugrundelegung des Weber-Kriteriums erfolgen oder auch statisch durch Vorgabe einer Verteilungsfunktion im Input.
- Ablagerung der Teilchen (Trapping). Die zu dem Ablagerungsvorgang zugehörige Senke in den Massengleichung für luftgetragene Teilchen wird als eine Art „Zerfallsprozess“ berechnet, d. h. die Änderung der Größe ist proportional zur Größe selbst:

$$\left. \frac{dm_{L,(i,n,k)}}{dt} \right|_{\text{trap}} = -\omega_{i,n} m_{L,(i,n,k)}$$

Aufgabe der Modelle für die Ablagerungsvorgänge ist es, die Ablagerungsrate $\omega_{i,n}$ zu berechnen. Die Ablagerungsrate $\omega_{i,n}$ hat die Einheit s^{-1} und hängt vom Kontrollvolumen i und von der Größenklasse n ab, da auch die Strömungsgeschwindigkeiten für luftgetragene Partikel nur von der Größenklasse abhängen, nicht aber von der Stoffsorte.

Da eine Bewertung von Modellen für Einzelphänomene (Beispiele: Herabfallen durch die Schwerkraft, direkter Aufprall) aufgrund der mangelnden Überprüfbarkeit gegenüber dem Experiment nicht bewertet werden können, soll in COCOSYS als Referenz das Herabfallen durch Schwerkraft (Gravitational Fall Time = GFT-Modell) verwendet werden.

Dazu wurden die Näherungen aus CONTAIN nach Korrekturen in COCOSYS übernommen. Die Korrekturen umfassen die Berücksichtigung einer endlichen Zonen-Fallhöhe bei der Berechnung der stationären Sinkgeschwindigkeit sowie die Berechnung dieser nach dem klassischen Newtonschen Ansatz, siehe /LAN 06/.

- Luftgetragene und in anderen Räumen als der Reaktorgrube abgelagerte Schmelzmassen werden durch ein Feld $m_{i,n,k}$ repräsentiert, wobei die Indizes i , n und k auf die Zone i , die Größenklasse n und die Spezies k verweisen.
- Maßgeblich für die thermischen und chemischen Wechselwirkungen ist das gebildete Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis der luftgetragenen Partikel während ihrer Flugzeit. Alternativ zur Verwendung einer Größenklassenverteilung kann eine gute Annäherung auch durch eine monodisperse Verteilung mit dem Sauter-Durchmesser als charakteristischem Durchmesser der Partikel erzielt werden.
- Bei den thermischen Wechselwirkungen werden Konvektion (zwischen Teilchen und Atmosphäre) und Strahlung (zwischen Teilchen und Atmosphäre sowie zwischen Teilchen und Strukturen) analog der Korrelationen in CONTAIN berücksichtigt. Durch zusätzliche Vorfaktoren bei der Berechnung der Wärmeübergänge können die Modelle/Korrelationen wie bei CONTAIN an die Experimente angepasst werden.

– Bei den chemischen Wechselwirkungen werden die Reaktionen mit Sauerstoff:

- $\text{Zr} + \text{O}_2 \rightarrow \text{ZrO}_2$
- $\text{Al} + 3/4 \text{O}_2 \rightarrow \text{AlO}_{1,5} (\text{Al}_2\text{O}_3)$
- $\text{Cr} + 3/4 \text{O}_2 \rightarrow \text{CrO}_{1,5} (\text{Cr}_2\text{O}_3)$
- $\text{Fe} + 1/2 \text{O}_2 \rightarrow \text{FeO}$

und mit Wasserdampf:

- $\text{Zr} + 2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{ZrO}_2 + 2 \text{H}_2$
- $\text{Al} + 3/2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{AlO}_{1,5} + 3/2 \text{H}_2$
- $\text{Cr} + 3/2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CrO}_{1,5} + 3/2 \text{H}_2$
- $\text{Fe} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{FeO} + \text{H}_2$

berücksichtigt.

Bei der Modellierung wird beachtet,

- dass eine Oxidationsreihenfolge beginnend bei den „unedleren“ Metallen hin zu den „edleren“ erfolgt,
- dass die Partikeltemperatur und meist auch die Temperatur der Zonenatmosphäre derart hoch sind, dass von gleichzeitiger Oxidation mit Sauerstoff und Wasserdampf ausgegangen werden muss,
- dass alle Partikelgrößen gleichzeitig am Oxidationsvorgang teilnehmen und keine Präferenz für kleinere Partikel besteht.

Unter Annäherung der Diffusionsprozesse werden die Ableitungen für die Speziesmassen (Metalle, Oxide) und deren Energieinhalte wie in CONTAIN berechnet. Die davon betroffenen Differentialgleichungen werden in COCOSYS innerhalb der Lösung mit dem Lösungsalgorithmus FEBE gemeinsam (geschlossen) mit den übrigen thermohydraulischen Variablen und Differentialgleichungen gelöst.

Von einer entkoppelten Lösung der Differentialgleichungen per Euler-Ansatz - wie in CONTAIN erfolgt - wird für COCOSYS abgesehen, da eine zu enge Kopplung der betroffenen Vorgänge zu erwarten ist.

– Für die Verbrennungsvorgänge von Wasserstoff können in COCOSYS bereits vorhandene Modelle eingesetzt werden (DECOR/Rekombinatoren).

5 Basisabsicherung von COCOSYS-DCH

Die folgenden Arbeitspunkte stellen eine Basis-Absicherung von COCOSYS-DCH dar, anhand welcher die vorhandene Modellierung einer eingehenden Bewertung unterzogen wird.

5.1 Detailanalyse ausgewählter Experimente

5.1.1 Implikationen aus dem Zusammenspiel energetischer Prozesse bei den DISCO-Versuchen

Tab. 5-1 zeigt die wichtigsten Randbedingungen der DISCO-Versuche. Die hier betrachteten DISCO-Versuche sind bei RDB-Drücken zwischen ca. 9 bar (H04) und 19 bar (DISCO-L1) durchgeführt worden. Dabei wurde entweder Stickstoff (H04) oder Wasserdampf als treibendes Gas verwendet. In einigen Experimenten (H02) war ein direkter Strömungsweg aus der Grube nach oben in die Kuppel des Sicherheitsbehälters möglich, was ein Versagen der Abdichtung zwischen RDB und RDB-Tragstruktur simulieren sollte. In anderen Versuchen war dieser Weg verschlossen und die Strömung war ausschließlich zunächst entlang der Kühlmittleitungen in untergeordnete Anlagenräume (Subcompartment) und von dort in die Kuppel des Sicherheitsbehälters möglich (H03), siehe auch Abb. 3-14 auf Seite 53.

Tab. 5-1: Überblick über die Randbedingungen der DISCO-Versuche. Mit COCOSYS gerechnete Fälle sind farbig unterlegt.

	Basis-Fall H02	H01	H03	H04	H05	H06	DISCO-L1 franz. Geometrie
Druck (MPa)	1,2	0,8	1,2	0,89	1,2	2,0	1,92
Verbindung zwischen Grube und Containment-Kuppel	offen	offen	geschlossen	offen	geschlossen	offen	offen
Treibendes Gas	Dampf	Dampf	Dampf	Stickstoff	Dampf	Dampf	Stickstoff
Lochgröße	56 mm	56 mm	56 mm	56 mm	25 mm	25 mm	56 mm

Abb. 5-1 (entnommen aus /MEY 03b/) zeigt die gemessenen Drucktransienten in den Versuchen H02 und H03. Die Versuche H02 und H03 zeigen verschiedene Druckdifferenzen ΔP zwischen Ausgangsdruck im Sicherheitsbehälter und maximalem Druck aufgrund der Prozesse während der Eintragung von Schmelze in den RDB. Im Versuch

H03, wo keine direkte Strömung aus dem RDB nach oben in den Sicherheitsbehälter möglich war, ist diese Druckdifferenz kleiner als bei dem Versuch H02 mit ansonsten ähnlichen Randbedingungen.

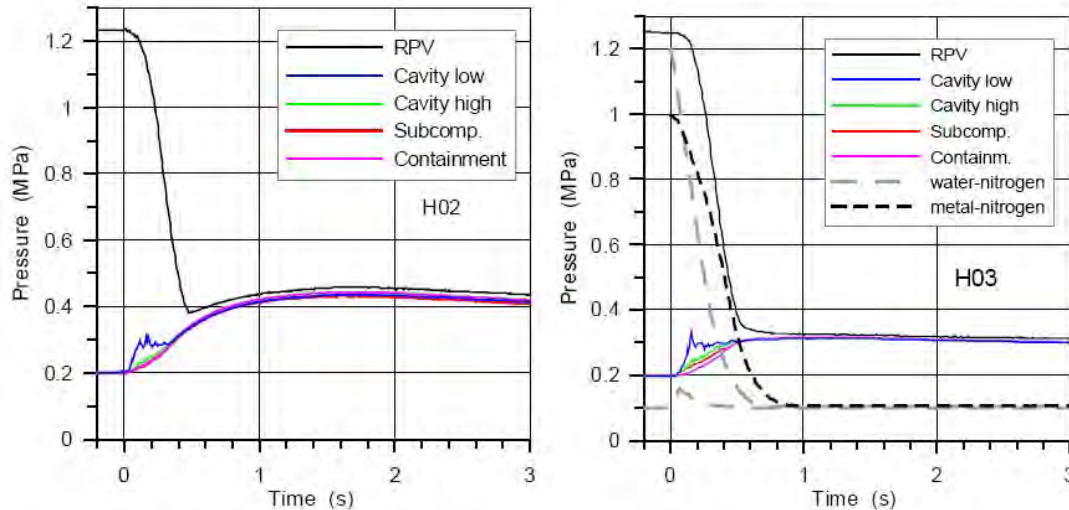


Abb. 5-1: Drucktransienten in den DISCO-Versuchen H02 und H03 (aus /MEY 03b/).

In beiden Versuchen dauerte der Blowdown bis zum Druckausgleich zwischen RDB und Sicherheitsbehälter ca. 0,5 s. Im Versuch H02 war die Zeitdauer bis zum Druckmaximum mit ca. 1,75 s um mehr eine halbe Sekunde größer als bei H03 (1,2 s). In H02 wurden 50 % der aus dem RDB frei gesetzten Schmelze in den Sicherheitsbehälter ausgetragen, in H03 dagegen nur 2 %. Es zeigt sich also ein erheblicher Einfluss der in den Sicherheitsbehälter ausgetragenen Schmelzemasse auf die Druckdifferenz ΔP .

In der Analyse gilt es daher, mit den Modellen für die Freisetzung von Schmelze aus dem RDB, für den Eintrag von Schmelze in die Gasströmung, für die Ablagerung von Schmelze aus der Gasströmung sowie für die Strömung des Gas-Schmelze-Gemisches möglichst genau den in den Experimenten beobachteten Austrag von Schmelze in den Sicherheitsbehälter nachzuvollziehen.

Der Druckanstieg bis zum Erreichen des Druckmaximums und der anschließende flach abfallende Druckverlauf resultiert aus der Überlagerung von verschiedenen schnellen energetischen Prozessen:

- Mit dem aus dem Druckbehälter ausströmenden heißen Gasgemisch wird die thermische Energie $\Delta E_{\text{blowdown}}$ in den Sicherheitsbehälter eingetragen. Dieser Prozess dauert ca. 0,5 s.
- Das durch die Reaktorgrube strömende Gas reißt Schmelzepartikel mit, was zu einer feinen Fragmentation der Schmelze im luftgetragenen Zustand führt. Über die stark vergrößerte Oberfläche der im Flug befindlichen Partikel erfolgt eine effiziente Übertragung der Wärme ΔE_d an die Atmosphäre. Die experimentellen Flugzeiten der Partikel betragen nach Auswertung von Videoaufnahmen ca. 2-3 s in den Experimenten H02 und H04 (s. auch Tab. 3-3 auf Seite 59).
- Neben der Abgabe der in den Partikeln gespeicherten Wärme tragen die metallischen Anteile der fein fragmentierten, luftgetragenen Schmelzepartikel durch exotherme Oxidationsreaktionen mit Sauerstoff bzw. Wasserdampf zur Aufheizung der Atmosphäre bei. Hierbei wird ein Beitrag ΔE_{ox} an die Atmosphäre übertragen. Die Geschwindigkeit der Reaktion wird durch die Stofftransporteigenschaften des Gases (Diffusion von O_2 und H_2O an die Schmelzetropfenoberfläche) sowie der Schmelze (Diffusion von Metall aus dem Inneren des Tropfens an die Tropfenoberfläche) bestimmt.
- Die Verbrennung von Wasserstoff, der durch die Oxidation von metallischen Schmelzeanteilen mit Wasserdampf produziert wird, liefert einen zusätzlichen Beitrag ΔE_{burn} an die Atmosphäre. Auch hier ist eine Zeitskala von wenigen Sekunden realistisch.

Nach /PIL 96/ kann der Druckanstieg ΔP im Sicherheitsbehälter mit einem adiabatischen Ein-Zellen-Modell angenähert werden. Durch Kombination der kalorischen Zustandsgleichung mit der idealen Gasgleichung für die Atmosphäre erhält man die Beziehung

$$\frac{\Delta P}{P_0} = \frac{\Delta E}{E_0 (1 + \Psi)} \quad (5-1)$$

Die anfängliche innere Energie E_0 der Containment-Atmosphäre wird dabei mit der Gleichung

$$E_0 = \frac{P_0 V}{R} c_v \quad (5-2)$$

angenähert. Die Klammer $(1 + \Psi)$ enthält das Verhältnis der Wärmekapazitäten von Schmelze und Atmosphäre und berücksichtigt, dass die thermische Energie der Schmelze unterhalb der Gleichgewichtstemperatur für die Aufheizung der Atmosphäre nicht verfügbar ist. Für den absoluten Druckanstieg in den DISCO-Versuchen mit einheitlichem Volumen des Sicherheitsbehälters V folgt daraus eine direkte Proportionalität zu den umgesetzten Energiebeiträgen ΔE :

$$\Delta P \propto \Delta E .$$

In dem Term ΔE summieren sich die zuvor genannten Beiträge der energetischen Prozesse. Aufgrund des schnellen Erreichens des Druckmaximums in den DISCO-Versuchen wird geschlossen, dass hinsichtlich der Beiträge ΔE_d und ΔE_{ox} größtenteils die im Flug befindliche fein dispergierte Schmelze einen nennenswerten Beitrag liefert. Dies wird bestätigt durch Nachrechnungen der Versuche mit COCOSYS, bei denen sich zeigt, dass, wenn thermische und chemische Wechselwirkungen von bereits abgelagerter Schmelze unter Zugrundelegung einschlägiger Wärmeaustauschmechanismen (Strahlung, Konvektion) zwischen Atmosphäre, abgelagerter Schmelze und Strukturen Berücksichtigung finden, dies zu einer kontinuierlichen Eskalation des Druckes im Sicherheitsbehälter führt und daher nicht mit dem raschen Druck-Peak in den Experimenten übereinstimmt. Eine sehr viel bessere Übereinstimmung bekommt man mit COCOSYS, wenn man die thermische und die chemische Wechselwirkung von abgelagerter Schmelze in den Räumen des Sicherheitsbehälters (ausgenommen: Reaktorgrube) vernachlässigt. Dies würde bedeuten, dass die auf eine Struktur bei der Ablagerung aufprallenden und deformierten Partikel einen prompten, vollständigen Wärmeaustausch mit der Struktur durchführen, was aber bislang in COCOSYS nicht modelliert ist. Eine Annäherung mit COCOSYS an diesen Vorgang wird für die korrekte Erfassung der Thermohydraulik des Sicherheitsbehälters dadurch erzielt, dass in der COCOSYS-Rechnung die abgelagerten Partikel bei der Berechnung von Wärmeübertragung an die Atmosphäre und chemischen Reaktionen vorerst ausgenommen werden.

Für die zukünftige Entwicklungsarbeit von COCOSYS-DCH ist eine Korrektur des energetischen Austausches zwischen Partikel und Struktur bei der Ablagerung zu berücksichtigen.

Die zeitliche Lage des Druckmaximums ($t < 2$ s) ist mit der beobachteten maximalen Flugzeit der Partikel (2-3 s) konsistent. Nur unter Vernachlässigung der energetischen Prozesse von wieder abgelagerter Schmelze ist es gelungen, für die unten genannten Versuche einen Parametersatz zu finden, mit dem alle Versuche in der Nachrechnung konsistent wiedergegeben werden können.

Die Basisabsicherung von COCOSYS-DCH wurde mit dem Versuch H04 begonnen, da durch die Verwendung von Stickstoff als treibendem Gas in H04 eine wesentliche Unsicherheit, nämlich die des Beitrages von ΔE_{burn} zum Druckanstieg ΔP , fehlt. Im Falle von H04 bestätigt sich, dass die Beiträge von $\Delta E_{\text{blowdown}}$, ΔE_d und ΔE_{ox} keineswegs vernachlässigbar sind. Dies zeigt die Abb. 5-2, wo die Druckanstiege ΔP in den Versuchen H02, H03, H05 und H06 durchaus mit der Menge an verbranntem Wasserstoff linear korrelieren. Der Versuch H04 mit 0 mol an verbranntem Wasserstoff passt jedoch nicht in diese Korrelation. Abb. 5-2 ohne H04 könnte in diesem Zusammenhang fehlinterpretiert werden, da die Menge an verbranntem Wasserstoff offensichtlich nicht die primär kausale Größe für die Erzielung des maximalen Druckes im Sicherheitsbehälter repräsentiert.

Abb. 5-3 zeigt, dass die Versuche H01, H02 und H06 viel besser mit der insgesamt aus der Grube ausgetragenen Schmelzemasse korrelieren. Diese Abbildung kann jedoch nicht die Unterschiede zu den Versuchen H03 und H05 sowie zu H04 erklären.

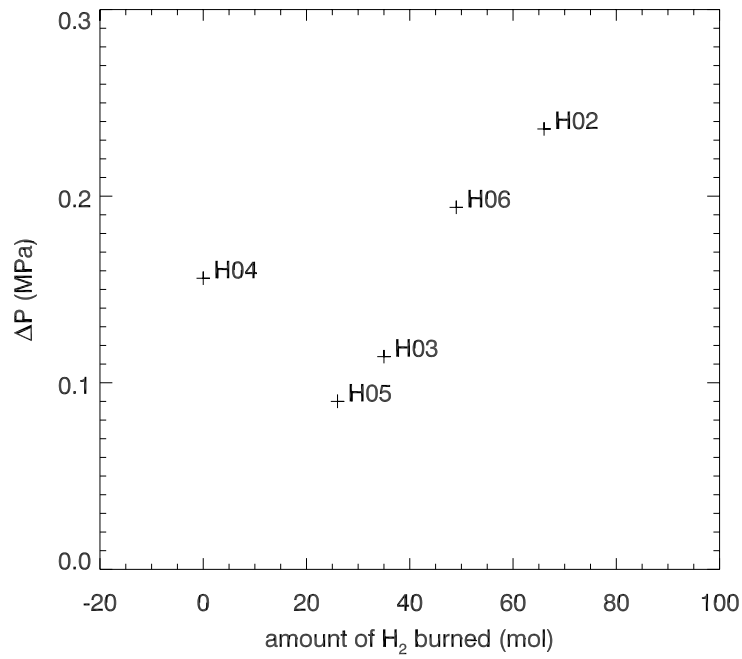


Abb. 5-2: Druckanstieg ΔP im Experiment als Funktion der Menge an verbranntem Wasserstoff in den DISCO-Versuchen.

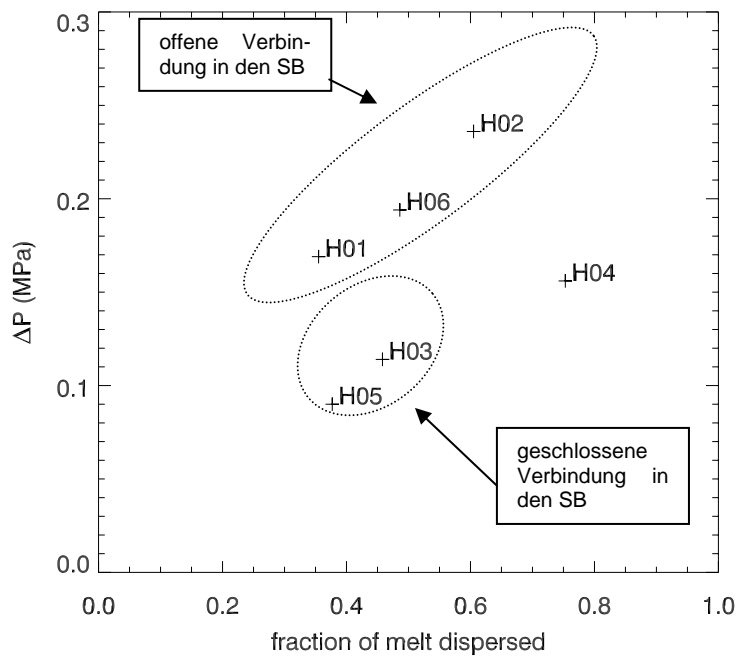


Abb. 5-3: Druckanstieg ΔP im Experiment als Funktion des Bruchteils an aus der Grube ausgetragener Schmelze.

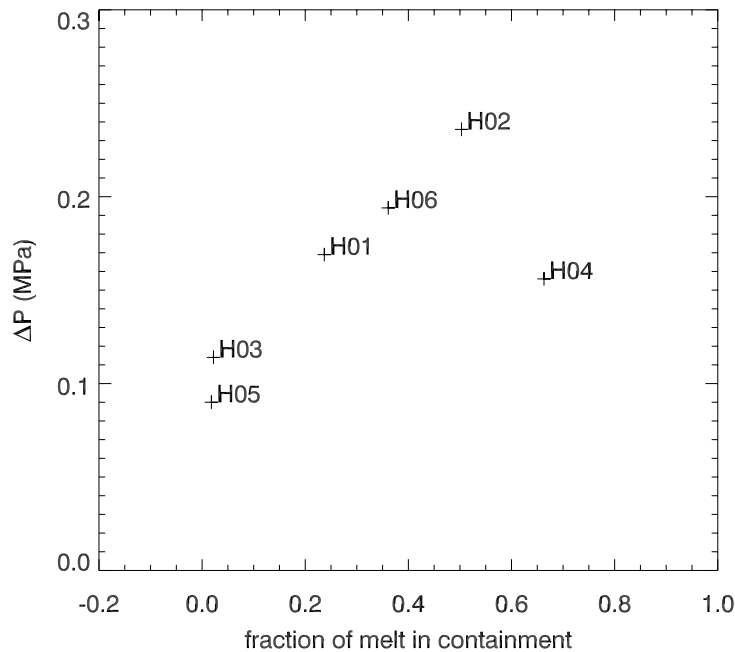


Abb. 5-4: Druckanstieg ΔP im Experiment als Funktion des Bruchteils an in den Sicherheitsbehälter eingetragener Schmelze.

Der Hauptunterschied zwischen der Gruppe der Experimente H01, H02 und H06 einerseits sowie der Gruppe H03 und H05 andererseits ist die fehlende direkte Strömungsverbindung zwischen Reaktorgrube und Sicherheitsbehälter bei der letztgenannten. In den Experimenten H03 und H05 wird weniger Schmelze aus der Grube ausgetragen und es gelangt weniger Schmelze in den Sicherheitsbehälter. Es liegt also nahe, den Anteil der in den Sicherheitsbehälter eingetragenen Schmelze f_{cont} mit dem Druckanstieg ΔP zu korrelieren. Abb. 5-4 zeigt einen linearen Zusammenhang zwischen f_{cont} und ΔP für alle DISCO-Versuche außer H04 mit einem „Nulldurchgang“ von f_{cont} bei $\Delta P \sim 0,1$ MPa.

Dies kann folgenderweise interpretiert werden: Wird alle Schmelze in der Grube zurückgehalten, d. h. gelangt keine Schmelze in den Sicherheitsbehälter so leisten der Eintrag von $\Delta E_{\text{blowdown}}$, die Aufheizung der Atmosphäre durch die Schmelze in der Reaktorgrube sowie chemische Vorgänge in der Reaktorgrube und die Verbrennung von anfänglich vorhandenem Wasserstoff einen Beitrag von $\Delta P \sim 0,1$ MPa. Gelangen zusätzlich nicht vernachlässigbare Anteile von Schmelze in den Sicherheitsbehälter, so tragen nennenswerte Prozesse von Oxidation und Wasserstoffverbrennung sowie der effiziente Energieaustausch zwischen Schmelze und Atmosphäre im Sicherheitsbehälter

ter einen zusätzlichen Beitrag, der von der Menge der ausgetragenen Schmelze abhängig ist.

Für H04 sind allerdings nur die Beiträge aus der Oxidation der Metalle mit dem Luftsauerstoff und aus der Wärmeübertragung zwischen Schmelze und Atmosphäre relevant, wohingegen bei H01, H02 und H06 auch die Oxidation der Metalle mit Wasserdampf und anschließend die Verbrennung des produzierten Wasserstoffs erfolgen kann. Energetisch gesehen liegt jedoch die Folge der Reaktion von Metall mit Wasserdampf und anschließender Verbrennung des Wasserstoffes einerseits mit der Reaktion der Metalle mit dem Luftsauerstoff andererseits gleichauf.

Da die beiden möglichen Reaktionswege für die Produktion von FeO energetisch gesehen äquivalent sind und im Experiment H04 sogar eine größere Masse an Schmelze in den Sicherheitsbehälter ausgetragen wird und diese für die Oxidation höchst effizient zur Verfügung steht, muss der größere Druckanstieg in der Rechnung zu Experimenten mit Wasserdampf in Abb. 5-4 vor allem auf die Verbrennung des anfänglich im Experiment vorhandenen Wasserstoffs zurückzuführen sein.

5.1.1.1 Abschätzung der Größenordnung der energetischen Beiträge

Dem adiabaten Ein-Zellen-Modell von /PIL 96/ folgend kann man die energetischen Beiträge der Vorgänge in folgender Weise am Beispiel des Versuchs H02 abschätzen (Tab. 5-2):

- Blowdown-Gas:

$$\Delta E_{\text{blowdown}} \approx \frac{V_{\text{RCS}} P_{0,\text{RCS}}}{\gamma - 1} \left[1 - \frac{P_0}{P_{0,\text{RCS}}} \right]$$

Mit $V_{\text{RCS}} = 0,076 \text{ m}^3$ (= Summe von RCS und RPV), $P_{0,\text{RCS}} = 1,22 \text{ MPa}$, $P_0 = 0,206 \text{ MPa}$ und dem Isentropenexponenten für Wasserdampf $\gamma \approx 1,4$ berechnet sich ein Wert von $\Delta E_{\text{blowdown}} = 193 \text{ kJ}$.

- Thermische Energie der ausgetragenen Schmelze:

$$\Delta E_d = N_d c_{p,d} (T_{0,d} - T_{\text{ref}})$$

Mit $f_{\text{cont}} = 0,503$, $N_d = f_{\text{cont}} \cdot 153 \text{ mol}$, $c_{p,d} = 83 \text{ J/mol/K}$, $T_{0,d} = 2200 \text{ K}$, $T_{\text{ref}} = 298 \text{ K}$ ergibt sich $\Delta E_d = 12,15 \text{ MJ}$.

- Oxidation der Metalle (Annahme: ausschließlich durch Wasserdampf):

$$\Delta E_{\text{ox}} \approx N_{\text{FeO,prod.}} \cdot h_{\text{ox,Fe}}$$

Mit $N_{\text{FeO,prod.}} = N_{\text{H}_2,\text{prod.}} = 54 \text{ mol}$, $h_{\text{ox, Fe}} = 0,002 \text{ MJ/mol}$ berechnet sich ein Wert von $\Delta E_{\text{ox}} = 108 \text{ kJ}$.

- Wasserstoffverbrennung

$$\Delta E_{\text{H}_2} = N_{\text{H}_2,\text{burned}} \cdot h_{\text{ox,H}_2}$$

Mit $N_{\text{H}_2, \text{burned}} = 66 \text{ mol}$ und $h_{\text{ox,H}_2} = 0,24 \text{ MJ/mol}$ folgt $\Delta E_{\text{H}_2} = 15,84 \text{ MJ}$.

- Die Experimentatoren nennen Werte für die verbrannte Menge an Wasserstoff, die auf der Abnahme des Sauerstoffs in der Atmosphäre beruhen /MEY 04/. Hierbei ist die Oxidation des Metalls mit Sauerstoff nicht berücksichtigt und kann auch nicht differenziert werden.

Tab. 5-2: Abschätzung der Energiebeiträge der einzelnen Vorgänge am Beispiel des Versuches DISCO-H02.

Vorgang	Energiebeitrag
Blowdown-Gas	193 kJ
Thermische Energie der Schmelze	12,15 MJ
Oxidation der Metalle	108 kJ
Wasserstoffverbrennung	15,84 MJ

Aus der vorgenommenen Abschätzung geht hervor, dass zum Druckanstieg die chemischen Prozesse (Oxidation, Wasserstoffverbrennung) zu 56 % beitragen, der thermische Eintrag durch die Wärme der Schmelze zu 43 % und die thermische Energie des Blowdown-Gases nur zu 1 %. Unter diesem Aspekt lässt sich erklären, dass der Druckanstieg bei H04 (ohne Verbrennung eines anfänglichen Wasserstoffinventars, aber mit größerem Eintrag von Schmelze in den Sicherheitsbehälter) niedriger ausfällt als bei den Experimenten mit Wasserstoffverbrennung, selbst wenn eine größere Menge an Schmelze ausgetragen wird.

Für die korrekte Wiedergabe des Druckanstiegs sollte die in den Sicherheitsbehälter ausgetragene Masse der Schmelze und der Zeitraum im luftgetragenen Zustand korrekt vom Rechencode ermittelt werden. Diese Schmelzemasse im luftgetragenen Zustand trägt durch Wärmeabgabe an die Atmosphäre direkt zur Aufheizung bei und indirekt durch die zur Verfügung gestellte Reaktionsoberfläche. Mit der Ablagerung der Teilchen scheinen alle hochenergetischen Prozesse rasch zum Erliegen zu kommen,

wie aus der Lage der Druckmaxima relativ zum beobachteten Partikelflug zu entnehmen ist.

5.1.2 Anpassung der wichtigsten Modell-Parameter in COCOSYS-DCH

Wie im vorhergehenden Abschnitt ausgeführt, hat die Masse der ausgetragenen Schmelze großen Einfluss auf die kurzzeitige Druckbelastung im Sicherheitsbehälter. Erste Zielsetzung ist es daher, mit dem Rechenmodell den Austrag von Schmelze aus der Grube in die Räume des Sicherheitsbehälters sicher abzuschätzen. Der berechnete Transport von Schmelze hängt einerseits von den Rand- und Anfangsbedingungen ab, andererseits wird er modellseitig bestimmt durch die Prozesse des Eintrags in die Gasströmung (Entrainment), Transport mit der Gasströmung in andere Raumbereiche und der Ablagerung aus der Gasströmung (Trapping). Für die komplizierten Vorgänge des Entrainments und Trapping sind in COCOSYS Referenzmodelle vorgesehen, mit denen grundsätzlich realistische Ergebnisse erzielt werden können, deren Parameter jedoch an eine spezielle Geometrie angepasst werden müssen. Vorgesehen für Nachrechnungen sind in dieser Arbeit Versuche in Reaktorgeometrien, die ausschließlich über Öffnungen nach oben eine Strömung des Schmelze-Gas-Gemisches aus der Grube in den Sicherheitsbehälter zulassen. Es handelt sich hierbei um die Versuche in der DISCO-Anlage beim Forschungszentrum Karlsruhe sowie die Supplementary-Tests 1 und 2 in der Surtsey-Versuchsanlage der Sandia National Laboratories in den USA. Eine solche nach oben offene Geometrie weist Ähnlichkeiten zu den in Deutschland vorhandenen Reaktoren auf.

Da für die Strömung in der Anlage die zeitlichen Druckdifferenzen in den Räumen maßgeblich sind, und diese von den energetischen Prozessen zwischen Schmelze und Atmosphäre abhängen, ist eine Anpassung der Parameter für Entrainment und Trapping nicht separat möglich. Die Anpassungsmethode ist vielmehr ein iterativer Vorgang, der mit einem gewissen „Arbeitspunkt“ (= Parameterkonstellation, für die eine ungefähre Näherung erzielt wird) beginnt, und darauf aufbauend die Anpassung der Parameter verfeinert.

- Ablagerung. In den Rechnungen mit CONTAIN in Abschnitt 3.3 wurde die Ablagerungsrate durch Benutzervorgabe für alle Anlagenräume im Input festgelegt. Aufgrund der Betrachtungen im vorhergehenden Abschnitt 5.1.1 muss jedoch von dieser Vorgehensweise abgewichen werden. Die Unterschiede zwischen den Ex-

perimenten H03 und H05 mit geschlossenem senkrechten Ausgang aus der Grube und den Experimenten mit geöffnetem direkten Strömungsweg aus der Grube in die Kuppel des Sicherheitsbehälters (H01, H02, H04, H06) können nur mit einem effizienteren Einfang von Schmelze in den Räumen des Subcompartments erklärt werden. Hierbei spielt die Größe der Räume bzw. der freie Strömungsweg entlang einer Richtung eine große Rolle, was durch eine globale Ablagerungsrate von Tropfen nicht wiedergegeben werden kann. Daher kommt in den COCOSYS-Nachrechnungen das Referenzmodell der gravitationsgetriebenen Ablagerung (GFT) für die Ablagerung in den Zonen zum Einsatz. Die Höhe für die Ablagerung wird entsprechend der Raumhöhen der Zonen gewählt. Im Subcompartment wird mit einer verkürzten Höhe von 10 cm gerechnet, um dem effizienten Einfang von Teilchen Rechnung zu tragen.

$$L_{\text{GFT}} = \begin{cases} \text{charak. Abmessung (Höhe) der Zone} & \text{für Zone} \neq \text{Subcompartment} \\ 0,1 \text{ m} & \text{für Zone} = \text{Subcompartment} \end{cases}$$

- Entrainment. Die COCOSYS-Rechnungen werden mit dem Entrainment-Modell von Whalley-Hewitt, Gl. (2-22), durchgeführt. Mit CONTAIN wurden mit diesem Modell gute Ergebnisse mit einem Vorfaktor K_c zwischen ca. 100 und 1000 in Verbindung mit einer vom Benutzer vorgewählten Ablagerungsrate von $\omega = 2 \dots 5 \text{ s}^{-1}$ erzielt (vgl. Abschnitt 3.3). Für die COCOSYS-Nachrechnungen wurde von dieser Konstellation aus zwei Gründen abgegangen: Zum einen wird in COCOSYS die Bedingung für Entrainment-Vorgänge durch die Prüfung eines Kutateladze Kriteriums mit der kritischen Kutateladze-Zahl $Ku = 10$ realistischer ermittelt. Beliebig kleine Gasgeschwindigkeiten in der Grube können in diesem Sinne kein Entrainment hervorrufen. Zum anderen beziehen sich geeignete Parameterkonstellationen nur auf eine spezielle Kombination aus Parametern für Entrainment und Ablagerung. Aufgrund der Verwendung des GFT-Modells für die Ablagerung muss auch K_c neu angepasst werden. Beide Änderungen (Kutateladze-Kriterium, GFT-Trapping in der kleinen Reaktorgrube) erzwingen eine starke Vergrößerung von K_c gegenüber den Nachrechnungen mit CONTAIN. Für COCOSYS wurde als geeigneter Wert $K_c = 10\,000$ gefunden.

$$K_c = 10000$$

Die Geschwindigkeit des Gases zur Berechnung der Entrainmentrate in Gl. (2-22) wird dabei auf die engste Stelle in der Grube, auf den Ringraum zwischen RDB und Wandfläche, umgelegt.

$$\text{AVELO} = \text{Fläche des Ringraumes}$$

- Energieaustausch zwischen Schmelze und Atmosphäre. Da das Entrainment sehr kurzfristig während des Blowdown erfolgt, trägt die Effizienz des Wärmeübergangs zwischen luftgetragener Schmelze und Atmosphäre stark zur Zeitskala des Druckaufbaus bzw. zum Timing des Druckmaximums bei. Diese Effizienz hängt auch von dem Oberfläche-zu-Volumenverhältnis der Schmelzeteilchen ab. Um die Parameterfindung zu vereinfachen wird in den COCOSYS-Nachrechnungen nur eine einzige Größenklasse bilanziert, deren Größe durch den Sauter-Durchmesser der tatsächlich in den Experimenten vorgefundenen Verteilung gegeben ist. In den Rechnungen wird basierend auf den experimentellen Daten /MEY 04/ ein Sauter-Durchmesser von $d_{\text{Sauter}} = 0,475$ mm vorgegeben. Bei diesem Sauter-Durchmesser wurden beste Werte in den Nachrechnungen erzielt, wenn für die Vorfaktoren im Input für den Strahlungswärmeübergang und für die Konvektion 30 % vorgegeben werden.

$$\text{EPSDG} = \text{LCONV} = 0,3$$

Es wird kein Wärmeübergang zwischen abgelagerter Schmelze und Atmosphäre berechnet. Es erfolgt kein direkter Wärmeübergang von luftgetragener Schmelze auf die Strukturen.

$$\text{EPSDS} = 0$$

- Chemische Reaktionen. Es hat sich gezeigt, dass in COCOSYS die Schnelligkeit der Oxidationsreaktionen auch durch die Diffusionskonstante auf der flüssigen Seite der Metalle bestimmt wird. Hier gibt es allerdings eine beträchtliche Unsicherheit von mindestens einer Größenordnung. Literaturwerte für die Diffusionskonstanten in flüssigen Schmelzen liegen um 1×10^{-9} m²/s. Hinsichtlich des Timings des berechneten Druckmaximums wurden in COCOSYS gute Werte mit

$$D_{\text{LIQ}} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

erzielt.

- Wasserstoffverbrennung. Die Verbrennung des Wasserstoffes wird im Rahmen dieser Arbeit mit dem Modell eines virtuellen Rekombinators berechnet. Es hat sich gezeigt, dass der ungleich höhere numerische Aufwand, den das präzisere Modell DECOR mit sich bringt, für die benötigten vielen Parameterrechnungen hier nicht akzeptabel ist. Vereinfachend wird daher in jeder COCOSYS-Rechenzone ein Rekombinator vom Typ SIEMENS FR90-1500 (vgl. /KLE 06/) angelegt, dessen K_2 -Wert für die Zwecke einer effizienten spontanen Verbrennung im Raum von 0,167 auf 10 erhöht wird.

$$K_2 = 10,0 \text{ g/s}$$

Die Rekombination wird entsprechend der Standardvorgabe des Rekombinatormodells bei H_2 -Konzentrationen $> 2,76$ Vol.-% an- und bei kleineren Konzentrationen als $0,05$ Vol.-% ausgeschaltet.

5.1.3 DISCO H04

Weil sich in Experiment und Nachrechnung gezeigt hat, dass sich die Drücke in den Teilvolumina der Reaktorgrube unterschiedlich verhalten, wurde für die Nachrechnung der heißen DISCO-Versuche mit COCOSYS das Volumen der Reaktorgrube in drei Zonen unterteilt: Untere Reaktorgrube, Ringraum, oberer Bereich der Reaktorgrube (Abb. 5-6, Abb. 5-5).

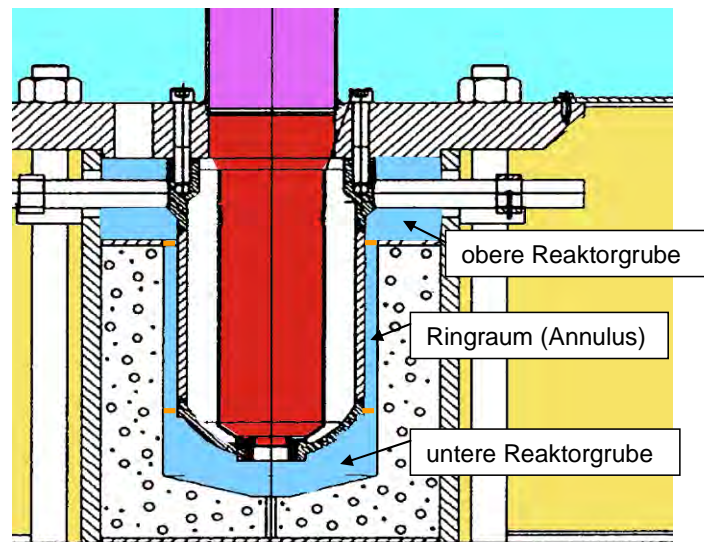


Abb. 5-5: Aufteilung der Reaktorgrube in drei Teilzonen.

Nodalisation of DISCO-H04 For Application in CONTAIN/COCOSYS

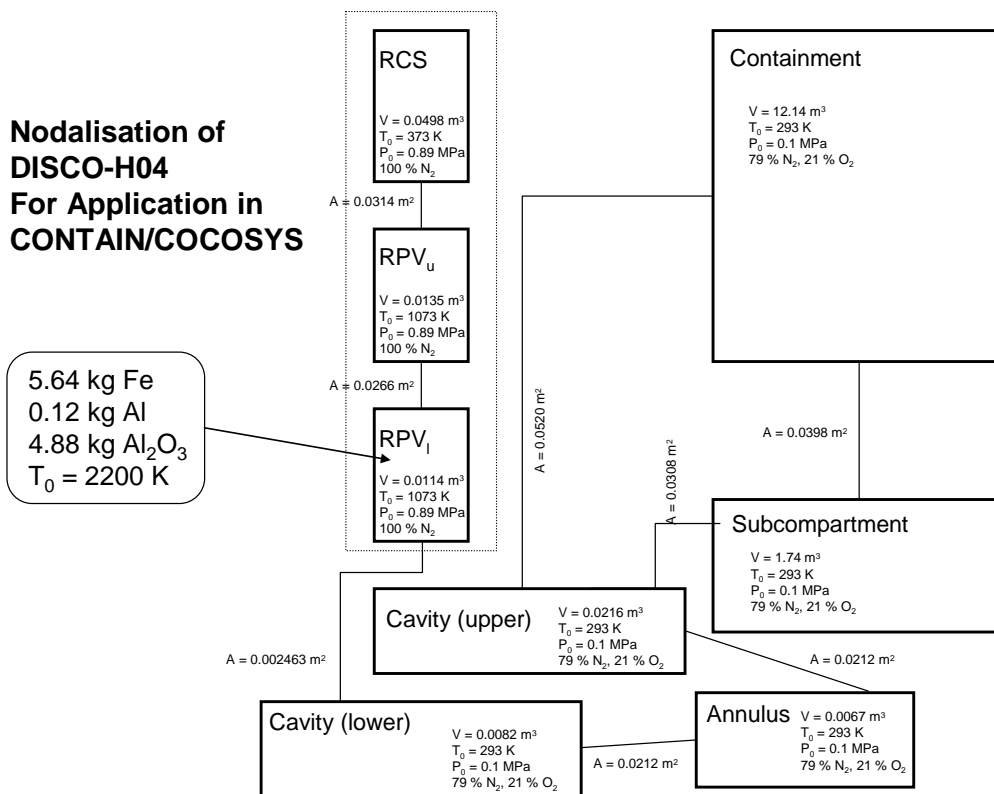


Abb. 5-6: DISCO-H04: Nodalisierung für die Nachrechnungen mit COCOSYS.

Wie in Abschnitt 2.2.1.3 ausgeführt, wird in der Nachrechnung der heißen DISCO-Versuche das Einsetzen des Gasdurchbruches unterschätzt. Im Falle von H04 wird eine Zeit bis zum Blowthrough von $t_b = 0,1$ s berechnet, wohingegen im Experiment eine Zeit von $t_b = 0,145$ s angegeben wird.

In der Rechnung wird für die untere Reaktorgrube kurz nach Einsetzen der Gasströmung ein bemerkenswerter, relativ scharfer Druckpeak von ca. 0,45 MPa ermittelt, wohingegen im Experiment der gemessene Druckanstieg in dem unteren Bereich der Reaktorgrube nur ca. 0.2 MPa beträgt und sich auf einen größeren Zeitraum verteilt (Abb. 5-7). Dieser Druckpeak resultiert aus der transienten Zunahme der effektiven Dichte des Gas-Schmelze-Gemisches in der Reaktorgrube bei nachdrückendem Gas aus dem Primärkreislauf. Diese Dichte nimmt entsprechend der luftgetragenen Masse in Abb. 5-11 zu. Sobald in der Rechnung der Gasdurchbruch erfolgt (bei $t_b = 0,1$ s), eskaliert der berechnete Druck in der unteren Reaktorgrube stark. Die Überschätzung des Druckes in Reaktorgrube, sowie die anfängliche Überschätzung der Druckentlastung im RDB („scharfkantiger“ Abfall des RDB-Druckes in der COCOSYS-Rechnung

gegenüber zunächst ‚weichem‘ Abfall im Experiment) zeigt die derzeitige Modell-schwäche bei der zweiphasigen Ausströmung aus dem RDB.

Später wird die Druckentlastung im RDB mit gleicher Geschwindigkeit wie im Experiment berechnet, dabei liegt die berechnete Kurve des Ausgleichsdruckes sehr gut auf der experimentellen Kurve. Der Maximaldruck und sein Abklingen wird in der Rechnung in guter Übereinstimmung zum Experiment wiedergegeben (Abb. 5-8).

Die gemessenen Zonentemperaturen werden in der Rechnung im Niveau nicht ganz erreicht, die maximalen Zonentemperaturen im Experiment liegen mit 600 °C (im Containment) knapp 100 °C höher als in der Rechnung (ca. 500 °C im Containment, Abb. 5-9).

Der Austrag von Material aus der Grube in die Räume des Sicherheitsbehälters wird in der Rechnung mit einem Rest von 23,8 %, der in der Grube verbleibt, in akzeptabler Übereinstimmung zum Experiment berechnet, wo ca. 20 % der Schmelze in der Grube vorgefunden werden (Abb. 5-10). Bei der Verteilung der ausgetragenen Schmelze zwischen Subcompartment und Containment wird die Masse im Subcompartment mit 25,6 % gegenüber ca. 10 % im Experiment stark überschätzt, die Schmelzemasse im Containment mit ca. 50,6 % gegenüber fast 70 % stark unterschätzt.

Der Beitrag aus chemischen Reaktionen kann leider nicht überprüft werden, da mangels Gasanalyse im Experiment keine Rückschlüsse auf die Oxidation von Eisen zu Eisenoxid gemacht werden können. In der Rechnung werden 16,5 mol FeO produziert. Diese Reaktion ist in der erste Sekunde nach Beginn der Schmelzefreisetzung aus dem RDB sehr stark und dauert bis ca. 2 s (Abb. 5-12).

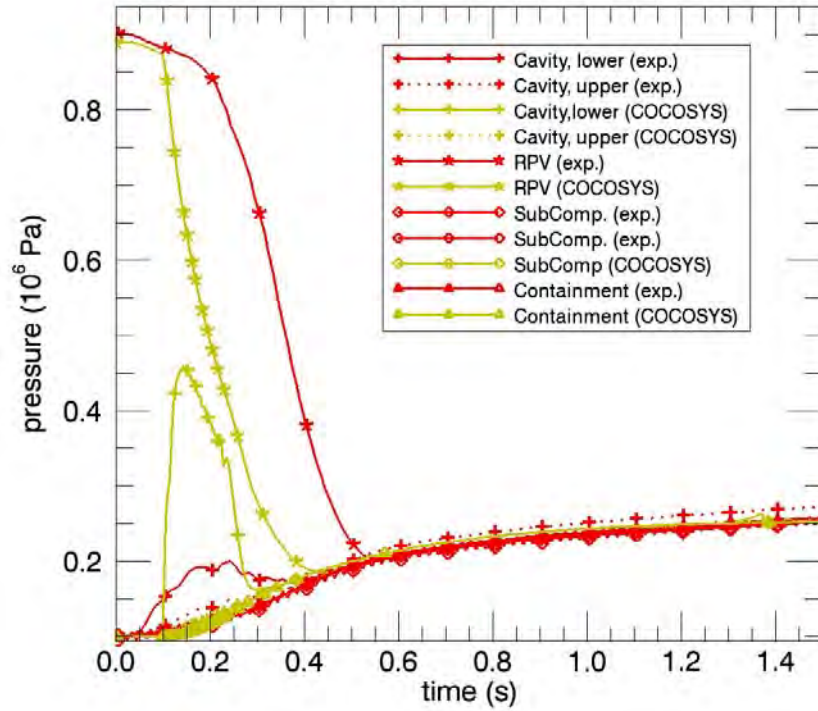


Abb. 5-7: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in den ersten 1,5 s.

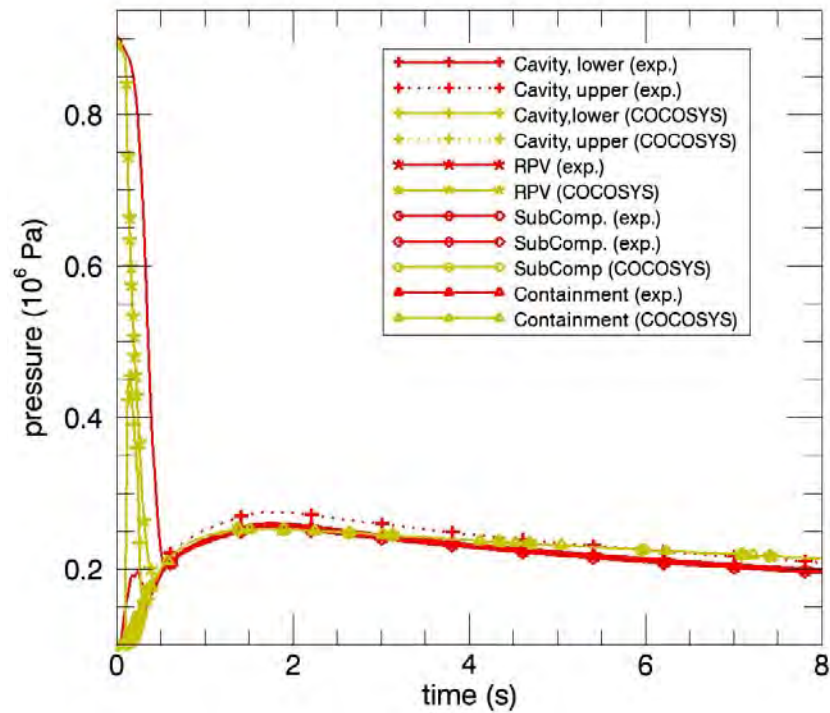


Abb. 5-8: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

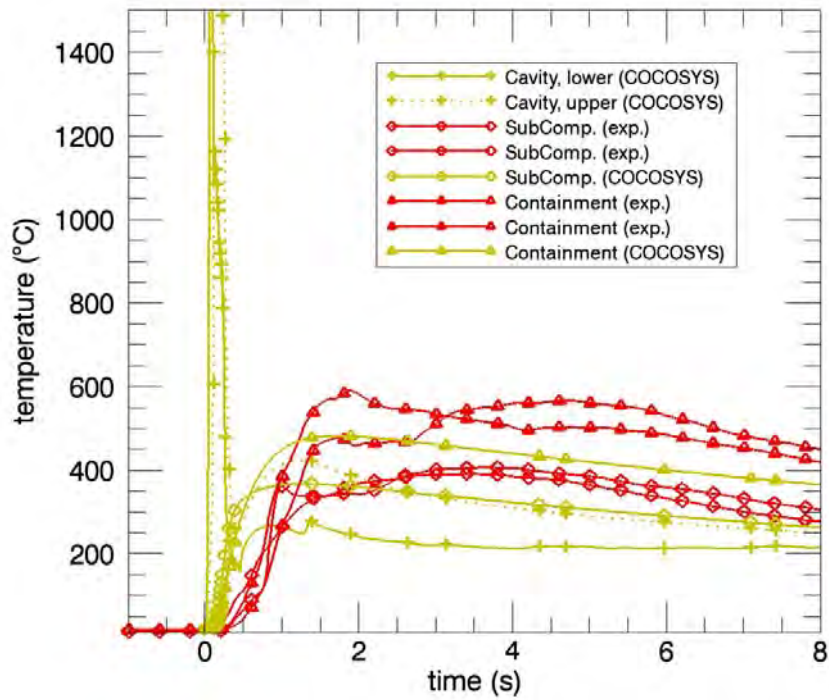


Abb. 5-9: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Zonen-temperaturen im Vergleich zum Experiment

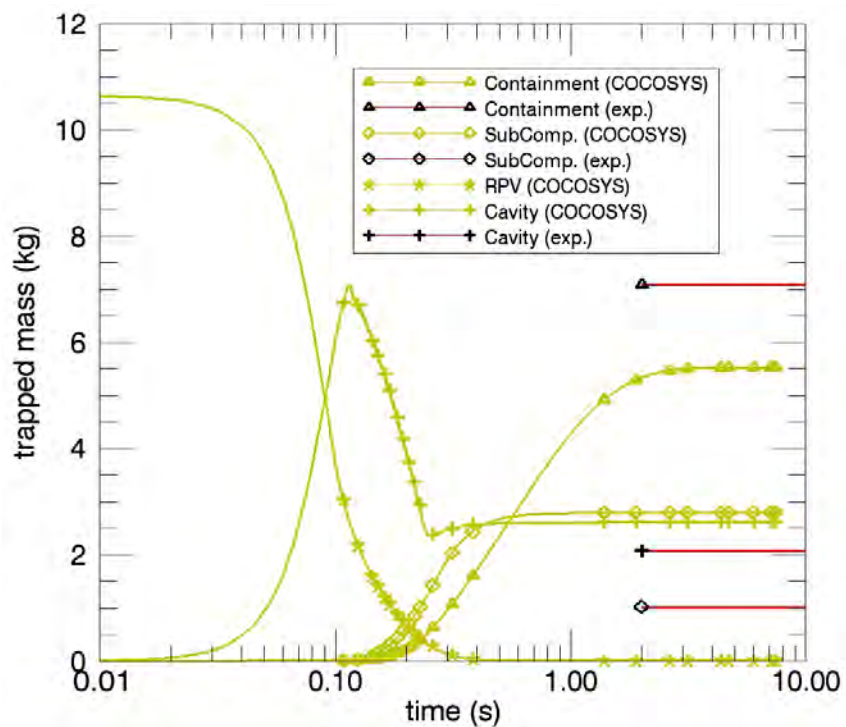


Abb. 5-10: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die abgelagerte Schmelzemasse in den Räumen.

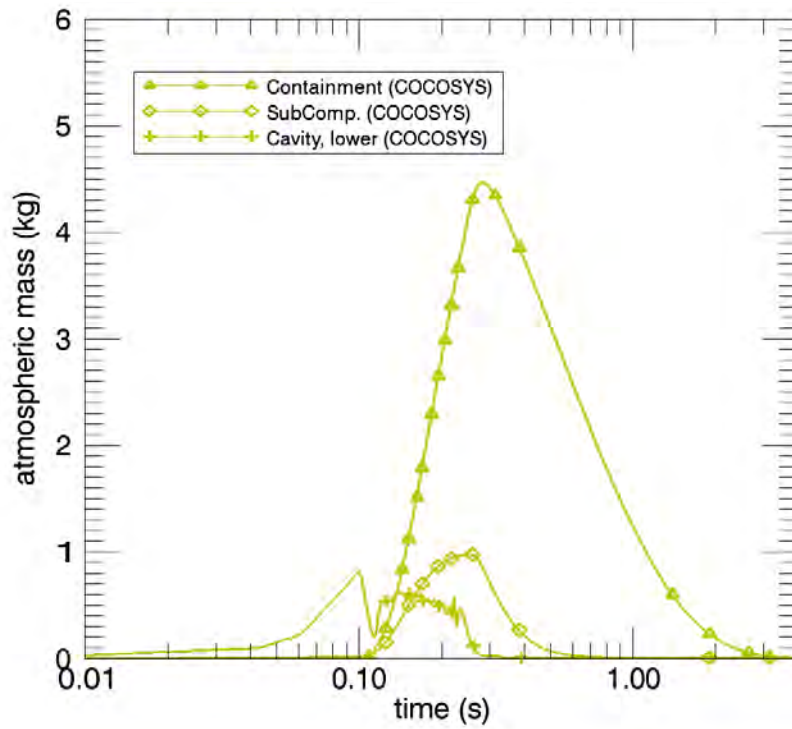


Abb. 5-11: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die luftgetragene Schmelzemasse in den Räumen.

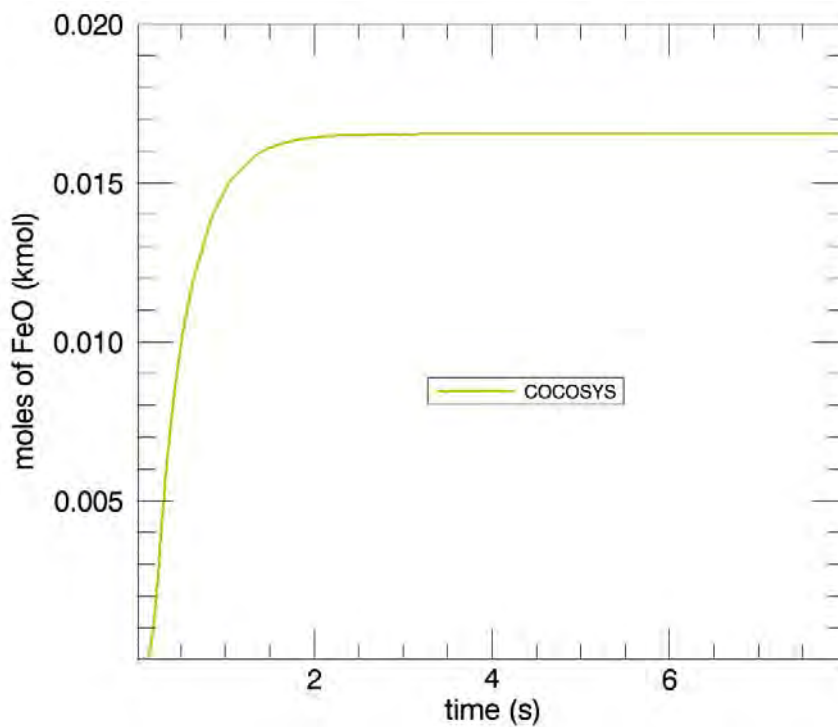


Abb. 5-12: DISCO-H04: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die produzierte Menge an Eisenoxid.

5.1.4 DISCO H02

Das DISCO-H02-Experiment ist von den Experimentatoren des FZK zum Basisexperiment für die H-Serie ausgewählt worden. Neben bereits zuvor genannten Gegebenheiten für diese Serie (vgl. Abschnitt 3.3) sind die dieses Experiment kennzeichnenden Besonderheiten in Tab. 5-3 zusammengestellt.

Mit diesen Randbedingungen wurden die in den nachfolgenden Abbildungen zusammengestellten Ergebnisse erzielt.

Tab. 5-3: Wichtige Randbedingungen für das H02-Experiment.

Beschreibung	Medium	Einheit	Wert
Strömungspfad zum Sicherheitsbehälter			offen
RDB-Druck bei Öffnen des Lecks		MPa	1.22
Gaszusammensetzung im RDB	Dampf	Mol	15.0
	Stickstoff		2.0
Sicherheitsbehälter-Ausgangsdruck		MPa	0.206
Sicherheitsbehälter-Ausgangstemperatur		°C	102.0
Gaszusammensetzung im Sicherheitsbehälter	Dampf	Mol-%	36.65
	Stickstoff		47.43
	Sauerstoff		12.76
	Wasserstoff		2.56

Bis auf den Ersatz von Stickstoff durch Dampf ist das Experiment H02 in allen Parametern nahezu ähnlich zu H04. Es eignet sich daher sehr gut für die Überprüfung des für die DISCO-Anlage gefundenen und zuvor am Experiment H04 (siehe Abschnitt 5.1.3) getesteten Datensatz.

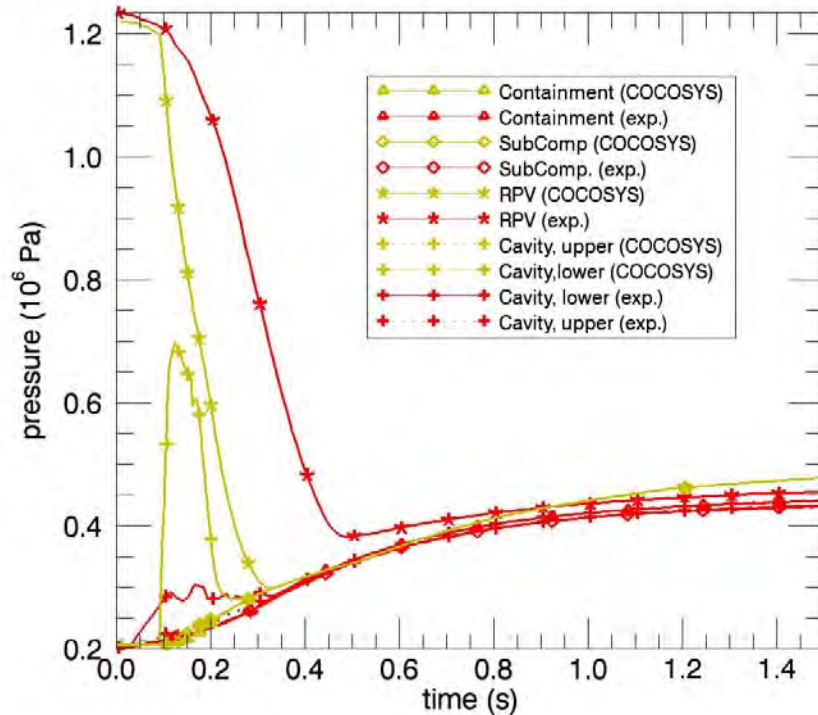


Abb. 5-13: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in den ersten 1,5 s.

Wie für H04 wird der Druckpeak in der Reaktorgrube in der Rechnung mit 0,69 MPa gegenüber 0,3 MPa im Experiment stark überschätzt (Abb. 5-13). Die berechnete Blowthrough-Zeit stimmt mit der experimentell ermittelten Zeit sehr gut überein, allerdings wird der Druckverlust im RDB bei zweiphasigem Ausströmen zu schnell und scharfkantig berechnet. Der maximale Druck im Sicherheitsbehälter wird von COCOSYS recht gut wiedergegeben (Abb. 5-14), allerdings ist das Abklingen des Druckes in der Rechnung zu langsam. Eine mögliche Ursache ist in der Berechnung der Wärmeübertragung von der Atmosphäre an die Strukturen zu suchen. Abb. 5-18 zeigt die noch zu späteren Zeiten anhaltende Verbrennung von Wasserstoff. Die berechneten Temperaturen sind in den Maximalwerten in akzeptabler Übereinstimmung zum Experiment (Abb. 5-15).

Die Summe aus produzierter Eisenoxidmenge (20,8 mol) und verbranntem Wasserstoff (25 mol) in der Rechnung ist hinsichtlich der umgesetzten Energien aus chemischen Reaktionen mit der Menge an verbranntem Wasserstoff aus dem Experiment zu vergleichen (66 mol), da die experimentelle Auswertung unter der Annahme erfolgte, dass im Experiment sämtliches Eisenoxid durch die schwach exotherme Oxidation mit Wasserdampf erfolgte. Da die aufgeführten Reaktionen energetisch ungefähr äquivalent

sind werden hinsichtlich des Energieeintrags durch chemische Reaktionen die Angaben der Experimentatoren also im Verhältnis $(21+25)/66 = 70\%$ unterschätzt. Da in der Rechnung ungefähr die Menge an Wasserstoff verbrennt wird, die vorher in der Anlage vorhanden war, erfolgen nahezu alle Oxidationsvorgänge von Eisen in der Rechnung durch die starke Reaktion mit Sauerstoff, d. h. es wird kein zusätzlicher Wasserstoff produziert.

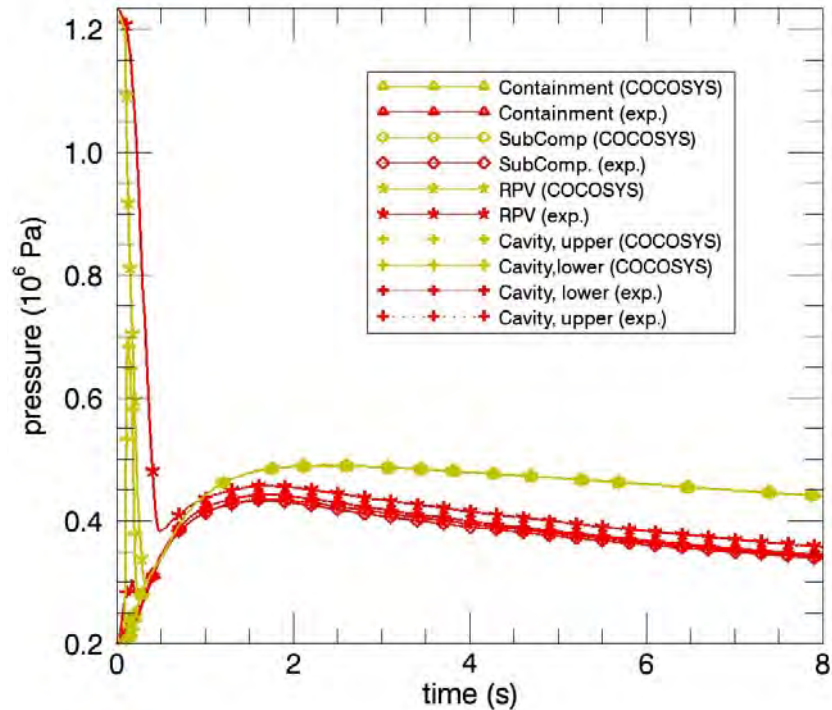


Abb. 5-14: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

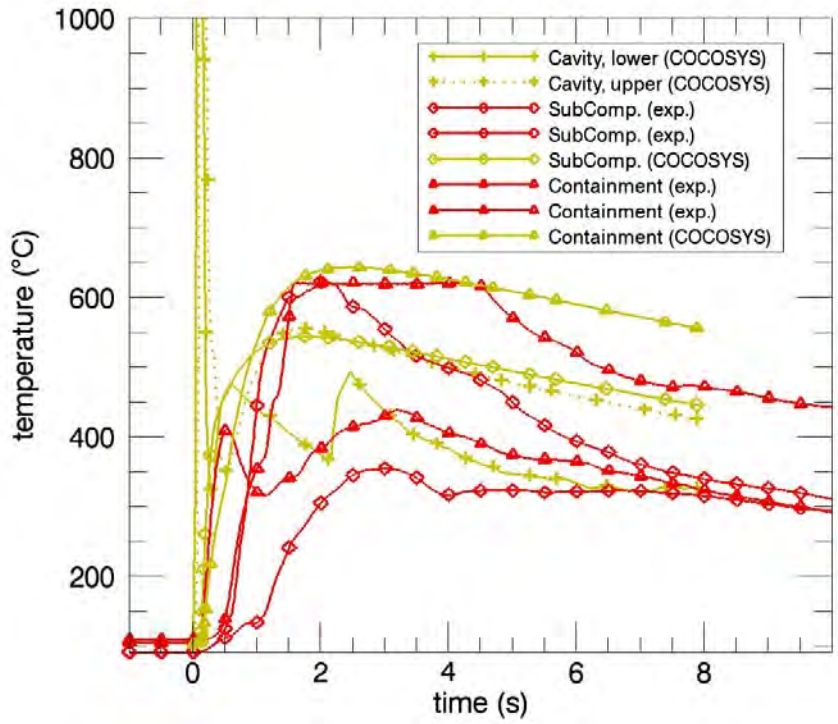


Abb. 5-15: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Zonen-temperaturen im Vergleich zum Experiment

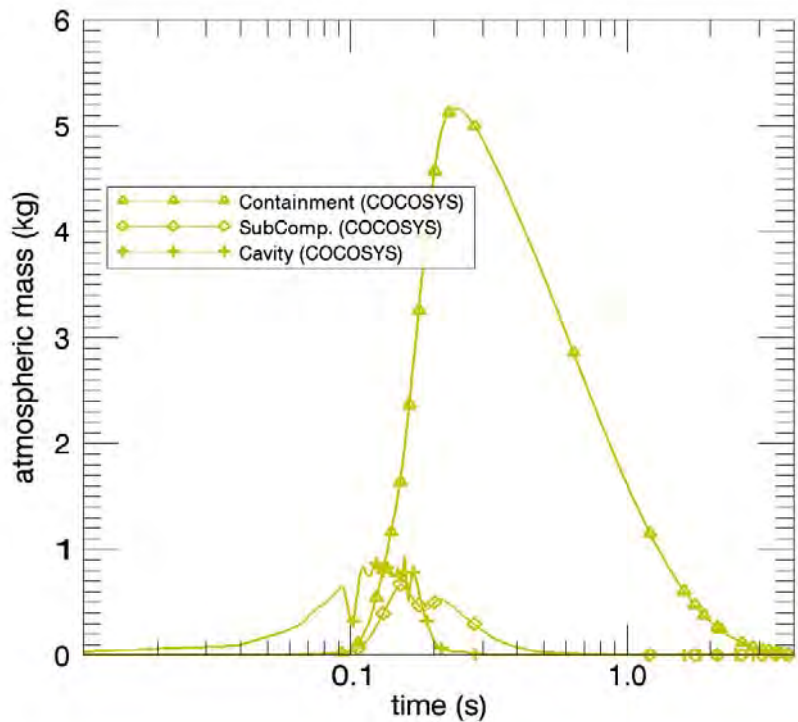


Abb. 5-16: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die luftgetragene Schmelzemasse in den Räumen.

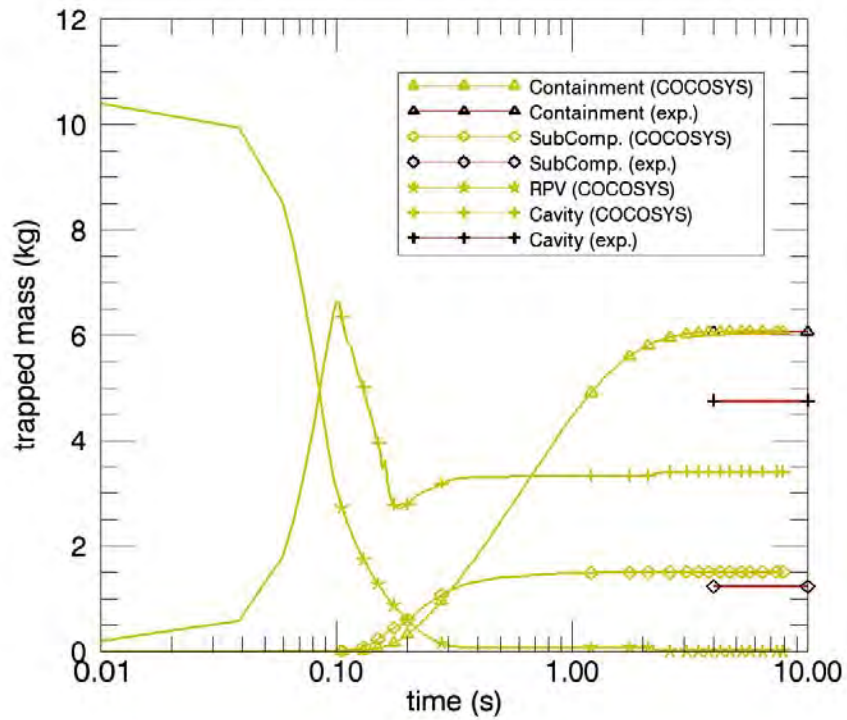


Abb. 5-17: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die abgelagerte Schmelzmasse in den Räumen.

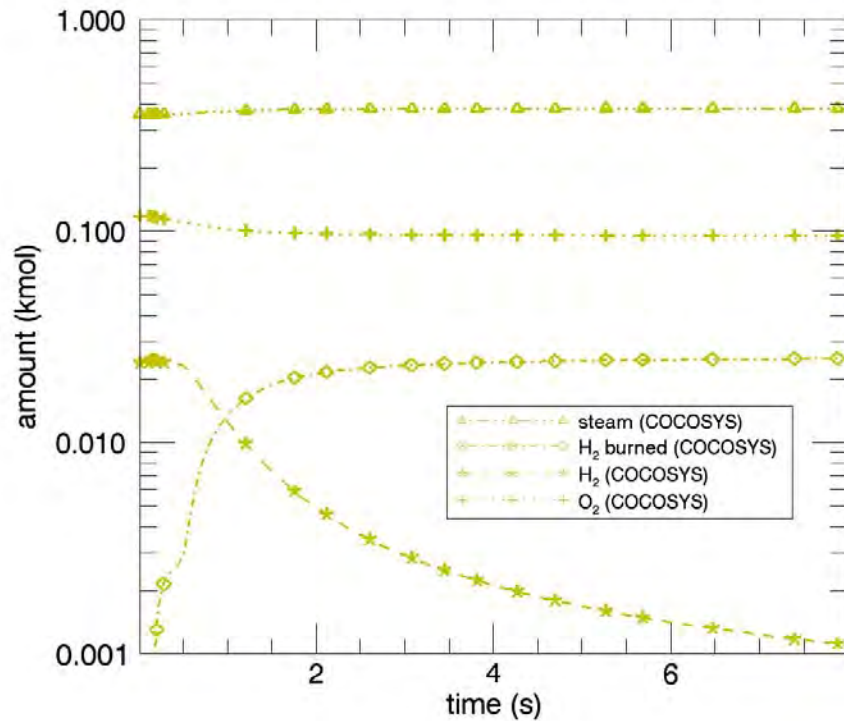


Abb. 5-18: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Mengen der wichtigsten Gase.

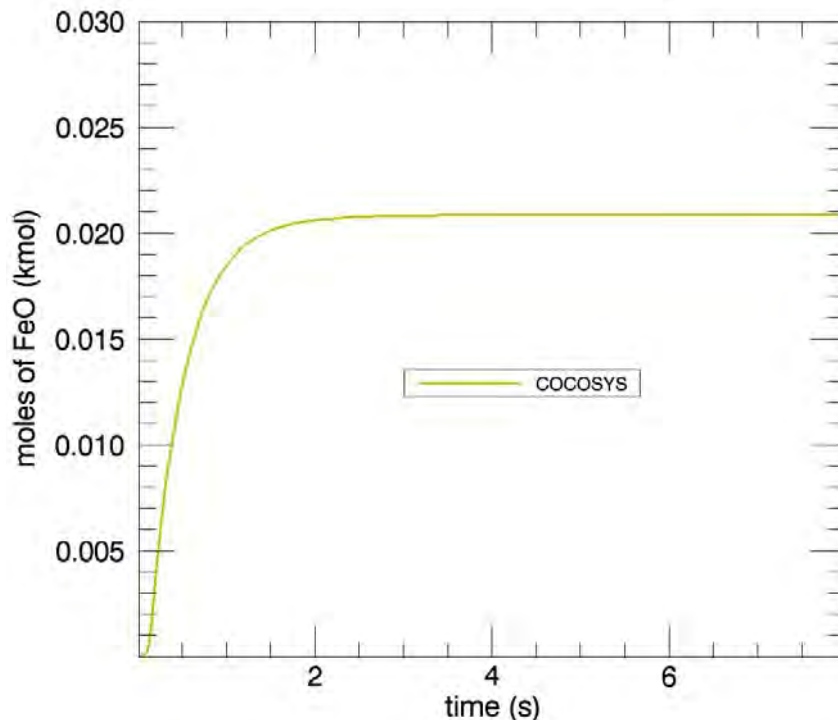


Abb. 5-19: DISCO-H02: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die produzierte Menge an Eisenoxid.

5.1.4.1 Einfluss der H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit

Die Dynamik des H₂-Verbrennungsprozesses kann am Experiment nur bedingt validiert werden. Zum einen ist das Integral des verbrannten Wasserstoffes im Experiment nicht bekannt, da der Sauerstoff auch durch direkte Oxidation des Eisens verringert werden kann und auf diesem Weg kein zusätzlicher Wasserstoff produziert wird. Zum anderen schlagen sich zeitabhängige Verbrennungs-Raten nur in der Überlagerung mit anderen Prozessen (Oxidation des Eisens, Wärmeübergang auf die Strukturen) in der wie im Experiment gemessenen Druckkurve nieder.

Der Einfluss der H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit wurde in einer zusätzlichen Rechnung für das Experiment H02 untersucht. Hierzu wurden die Standard-Kriterien für das Ein- und Ausschalten der Rekombinatoren auf 0 gesetzt, d. h. in der Rechnung startet die Verbrennung von Wasserstoff von Beginn des Experimentes an in allen Räumen. Der Parameter K_2 , der für den ‚virtuellen‘ Rekombinator die Rekombinationsrate in Abhängigkeit der H₂-Konzentration bestimmt, wurde gegenüber der vorherigen Rechnung von 10,0 auf 20,0 verdoppelt, um eine größere H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit zu simulieren.

Der zu frühe Anstieg des Druckes mit größerer Verbrennungsgeschwindigkeit gegenüber dem Experiment, wie in Abb. 5-20 dargestellt, lässt eine oder mehrere der folgenden Schlussfolgerungen zu:

- Die Verbrennungsgeschwindigkeit ist in Wirklichkeit kleiner als wie hier berechnet.
- Die Verbrennung setzt in Wirklichkeit etwas später ein als wie hier berechnet (Einfluss von Zündkriterien).
- Die Reaktionswärme geht nicht vollständig in die Atmosphäre sondern in die Schmelze oder in die Strukturen.

Die schnellere H₂-Verbrennung führt wie in der Abb. 5-21 zu sehen zu einem früheren und stärkeren Druckmaximum im Sicherheitsbehälter, die langfristige Abklingkurve des Druckes wird allerdings kaum beeinträchtigt. Abb. 5-22 zeigt die raschere Abnahme des H₂-Inventars in der Anlage bei entsprechender Zunahme der verbrannten Menge gegenüber der ursprünglichen Rechnung. Für das Abklingen des Druckes ist die Verbrennungsgeschwindigkeit nicht maßgeblich.

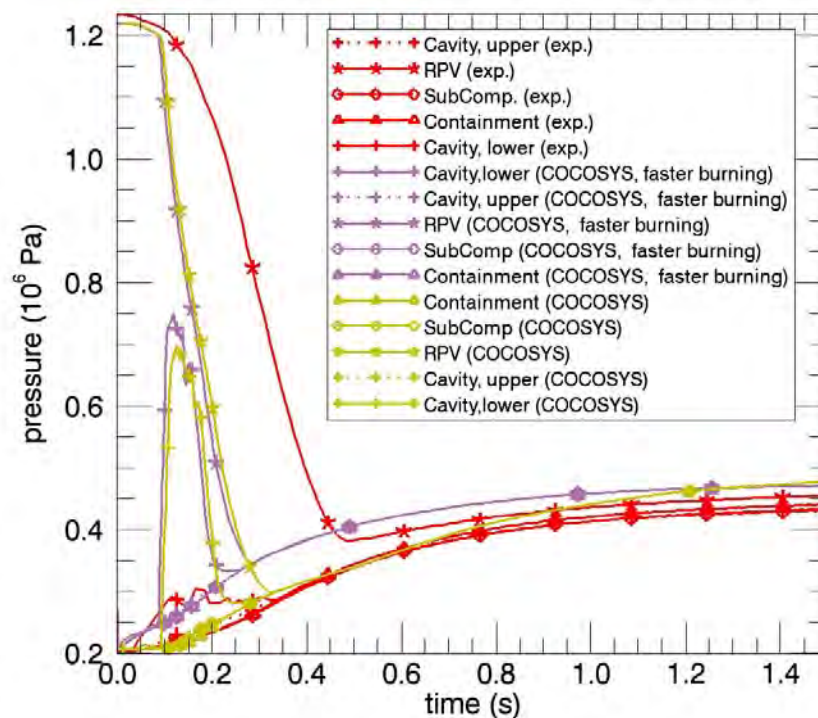


Abb. 5-20: DISCO-H02: COCOSYS-Rechnenergebnisse für die Drücke bis t = 1,5 s bei vergrößerter H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit.

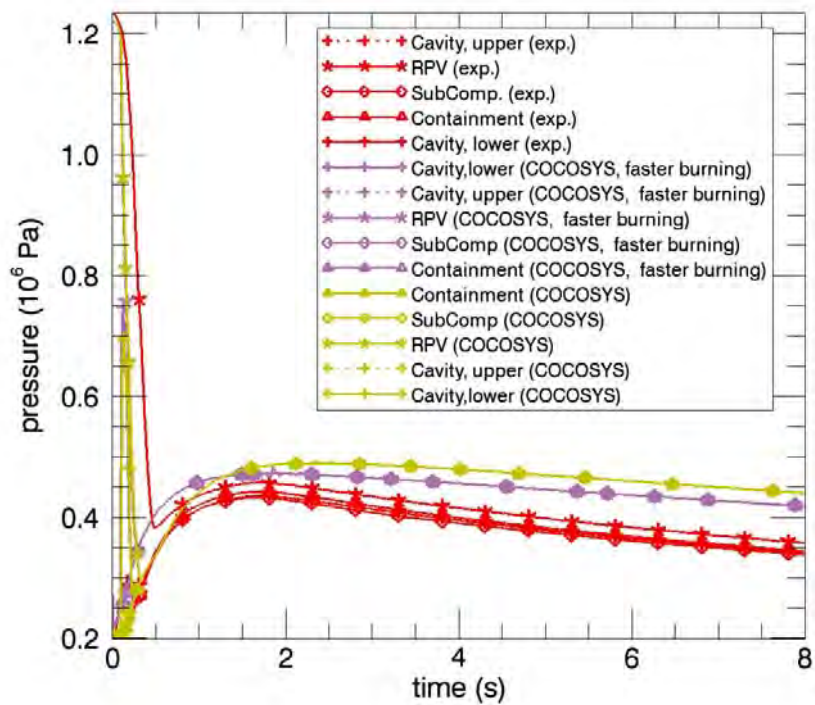


Abb. 5-21: DISCO-H02: COCOSYS-Rechenergebnisse für die Drücke bis t = 8 s bei vergrößerter H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit.

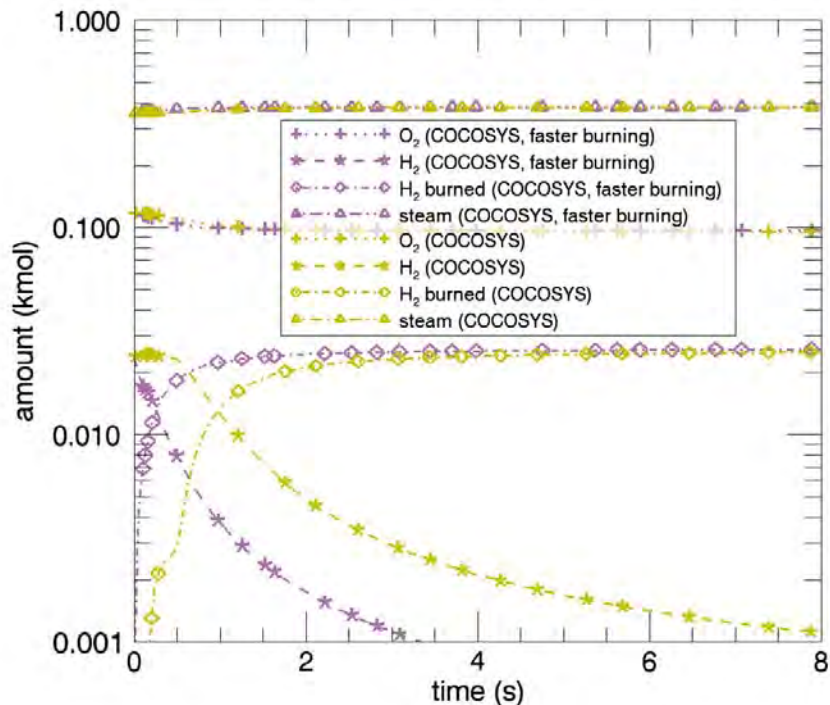


Abb. 5-22: DISCO-H02: COCOSYS-Rechenergebnisse für die wichtigsten Gasmengen bei vergrößerter H₂-Verbrennungsgeschwindigkeit.

5.1.4.2 Einfluss des Wärmeübergangs auf die Strukturen

Da im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, dass die lang anhaltende H₂-Verbrennung in der Rechnung nicht ursächlich für die unterschätzte Druckabsenkung im Sicherheitsbehälter nach Ende des Blowdown ist, muss die Ursache im Zusammenhang mit der Berechnung von Wärmeübergängen von der Atmosphäre an die Strukturen liegen.

Die Modelle in COCOSYS für die Wärmeübergänge zwischen Atmosphäre und Strukturen müssen jedoch als im Rahmen der COCOSYS-Validierung ausreichend abgesichert angesehen werden. Diesbezügliche mögliche Fehler reduzieren sich dann u. a. auf die korrekte Erfassung der beteiligten Flächen in der Versuchsanlage für die Wärmeübertragung. Da im Rahmen dieses Vorhabens die Wärmesenken in Form der Einbauten und Strukturen in der Versuchsanlage nicht als primär relevant angesehen worden sind, ist es durchaus möglich, dass durch Vereinfachungen im Eingabedatensatz für die Versuchsanlage nicht alle Verwinkelungen und detaillierten Einbauten korrekt abgebildet worden sind.

Der Einfluss der Wärmesenken wurde daher in einer zusätzlichen Rechnung untersucht. Hierbei wurden alle im ursprünglichen Datensatz vorgegebenen Strukturen hinsichtlich der Fläche um einen Faktor 2 vergrößert.

Die Rechnung zeigt, dass der Einfluss der Wärmesenken auf Zeit und Amplitude des Druckmaximums sehr gering ist, hingegen zeigt sich in der Rechnung mit den um einen Faktor 2 vergrößerten Festkörperoberflächen nach Ende des Blowdowns eine schnellere Druckabsenkung (Abb. 5-23) bzw. Abkühlung der Atmosphäre (Abb. 5-24), mit besserer Übereinstimmung zum Experiment.

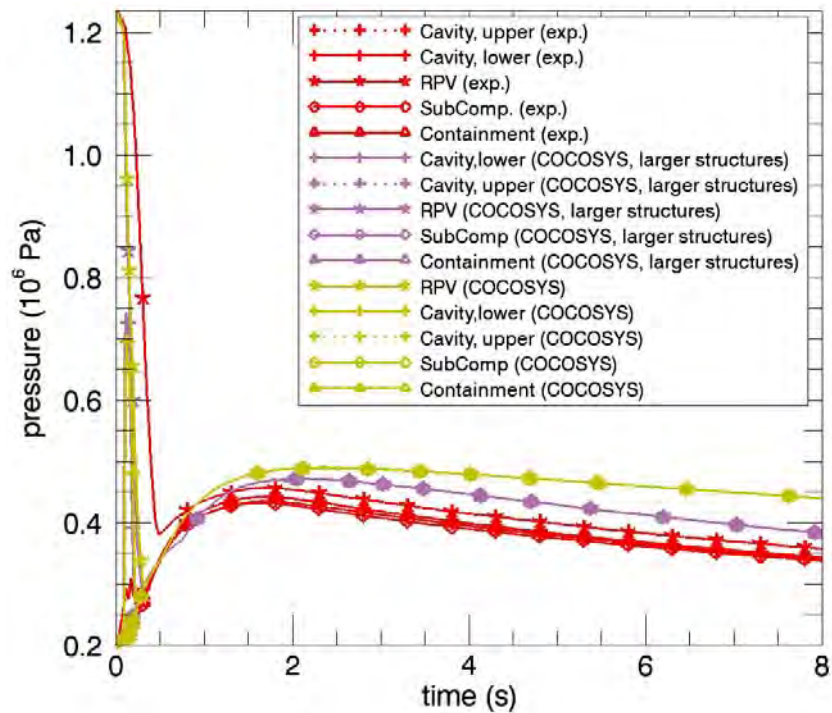


Abb. 5-23: DISCO-H02: COCOSYS-Rechenergebnisse für die Drücke bis t = 8 s bei vergrößerten Wärmesenken.

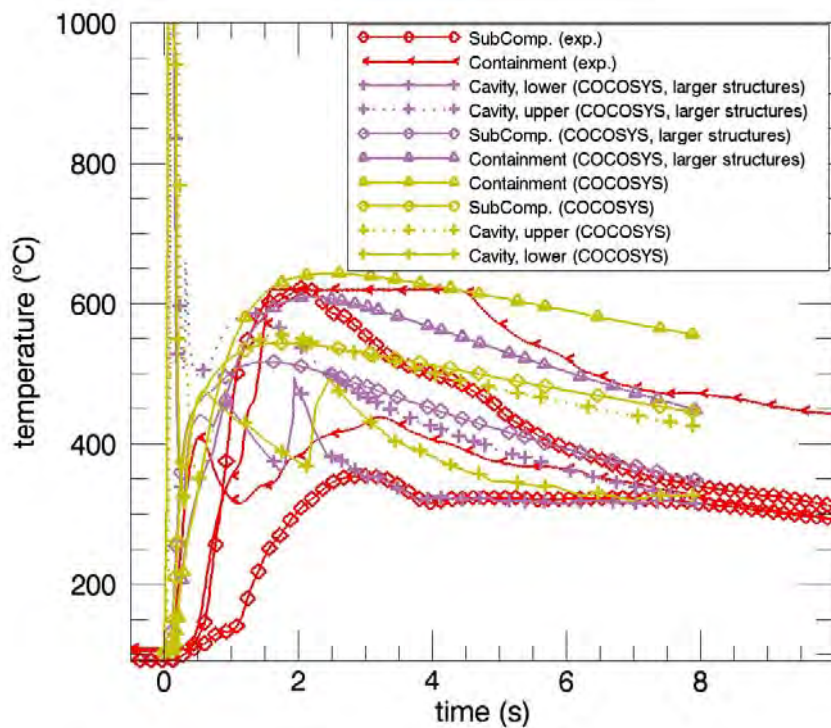


Abb. 5-24: DISCO-H02: COCOSYS-Rechenergebnisse für die Zonentemperaturen bei vergrößerten Wärmesenken.

5.1.5 DISCO H03

Im Experiment H03 wurde gegenüber dem Experiment H02 der direkte Strömungsweg aus der Grube nach oben in das Containment verschlossen (vgl. Abb. 3-14 auf Seite 53), was ein Intaktbleiben der Isolierung zwischen RDB und Traganker simuliert. Alle anderen Parameter sind ähnlich gewählt wie beim Experiment H02. Der nun eingeschränkte Strömungsweg über das Subcompartment in das Containment lässt im Experiment nur einen niedrigen Anteil von Schmelze zu, der in das Containment gelangt (2,2 % gegenüber 50,3 % in H02). Damit einhergehend ist ein vergleichsweise niedrigerer Druckanstieg im Sicherheitsbehälter gegenüber H02 registriert worden: 0,114 MPa gegenüber 0,236 MPa in H02. Die Ergebnisse deuten daraufhin, dass aufgrund einer niedrigeren, durchschnittlichen Flugzeit im Subcompartment von H03 insgesamt weniger Schmelzmasse für chemische Reaktionen zur Verfügung steht, bis die Partikel auf Hindernisse/Strukturen aufprallen und nach effizientem Wärmeaustausch mit der Struktur nicht mehr nennenswert an diesen Reaktionen beitragen.

Ein solches Verhalten kann in der Modellrechnung nur mit einem effizienten Trapping im Subcompartment angenähert werden. Dazu wurde von der Standardvorgabe des Trapping-Modells in COCOSYS für alle DISCO-Eingabedatensätze insoweit abgewichen, als für das Subcompartment die zur Verfügung stehende Fallhöhe der Partikel (in der Geometrie nominell: 78,5 cm) drastisch auf effektive 10 cm verkürzt wurde. Diese Reduktion ergab sich unter der Randbedingung des GFT-Modells allein aus empirischen Gründen und kann derzeit nicht vorhergesagt werden. Für zukünftige Entwicklungsarbeiten ist vorgesehen, die Modellierung des Ablagerungsverhaltens in COCOSYS in diesem Punkte zu verbessern.

Die Berechnung des Druckanstieges im Containment gelingt mit dieser Modellannahme sehr gut (Abb. 5-26). Während des Blowdowns beträgt das Maximum der luftgetragenen Schmelzmasse im Subcompartment ca. 3,3 kg und im Containment ca. 1,2 kg (Abb. 5-28). Zum Vergleich: Bei H02 betragen die maximalen, zwischenzeitlichen luftgetragenen Schmelzmassen ca. 0,5 kg im Subcompartment und 5,2 kg im Containment.

Bei der Schmelzeverteilung wird in der Rechnung die Austragung aus der Grube überschätzt, sodass größere Mengen an Schmelze in Subcompartment und Containment berechnet werden, als im Experiment in diesen Räumen vorgefunden wurde (Abb. 5-29).

Ähnlich wie bei H02 werden für H03 die Umsätze der chemischen Reaktionen gegenüber dem Experiment unterschätzt. Berechnet wird eine Anzahl von 13,9 mol stark exothermer Reaktionen (Oxidationen des Eisens mit Sauerstoff und Wasserstoffverbrennungen) gegenüber 33 mol aus dem Experiment (Wasserstoffverbrennungen), vgl. Abb. 5-30 und Abb. 5-31.

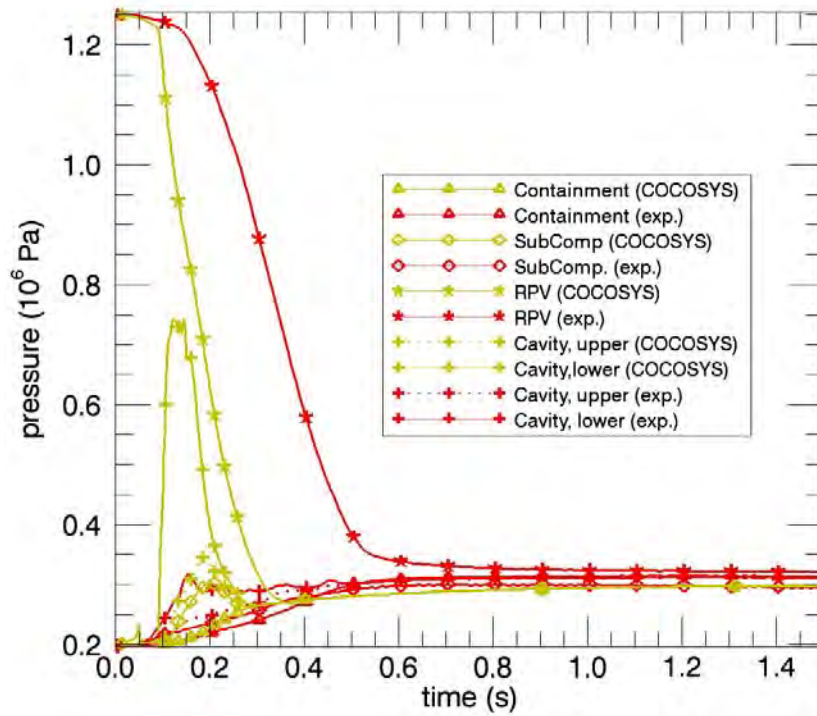


Abb. 5-25: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in den ersten 1,5 s.

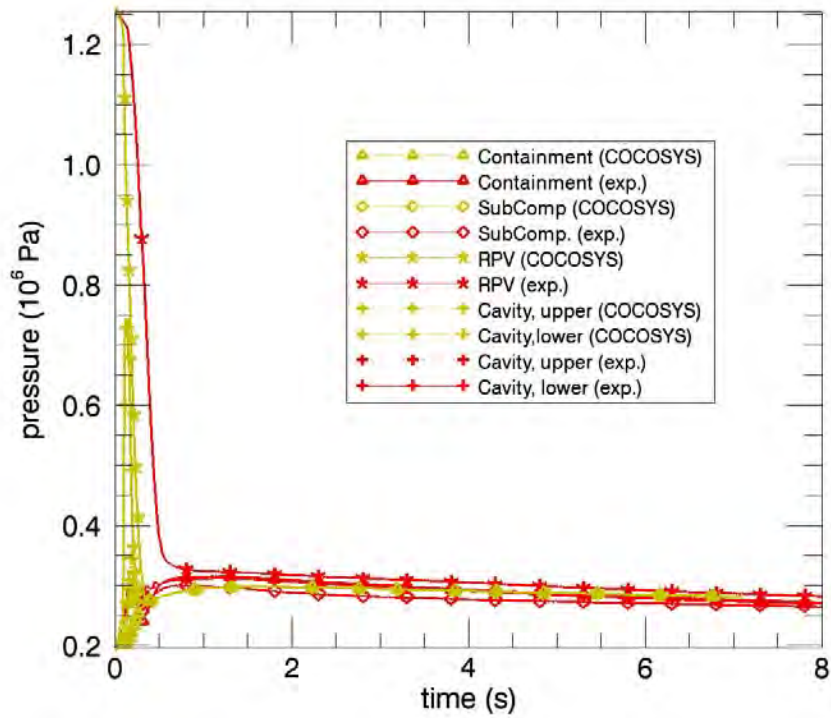


Abb. 5-26: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

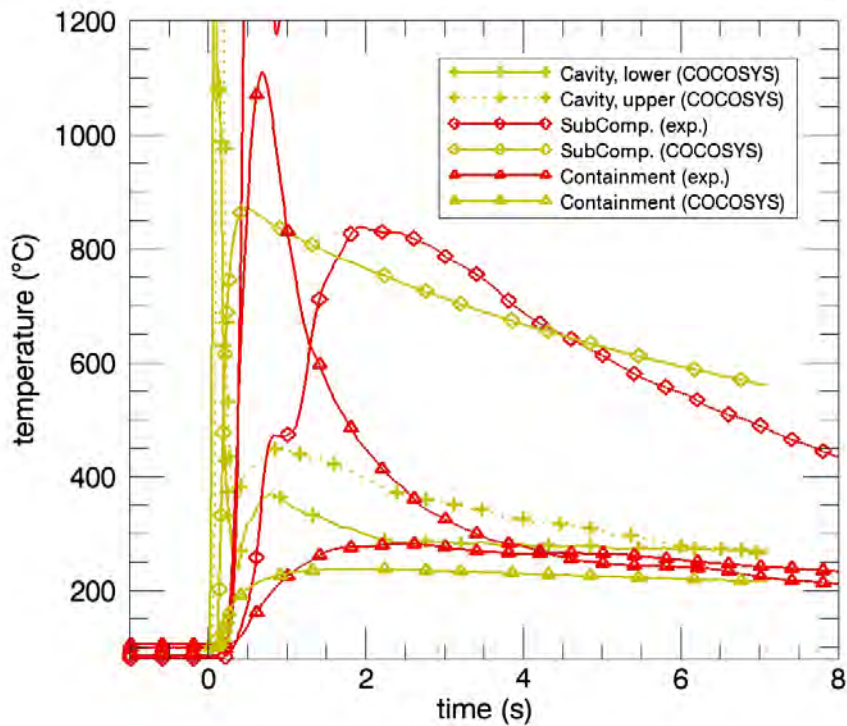


Abb. 5-27: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Zonen-temperaturen im Vergleich zum Experiment

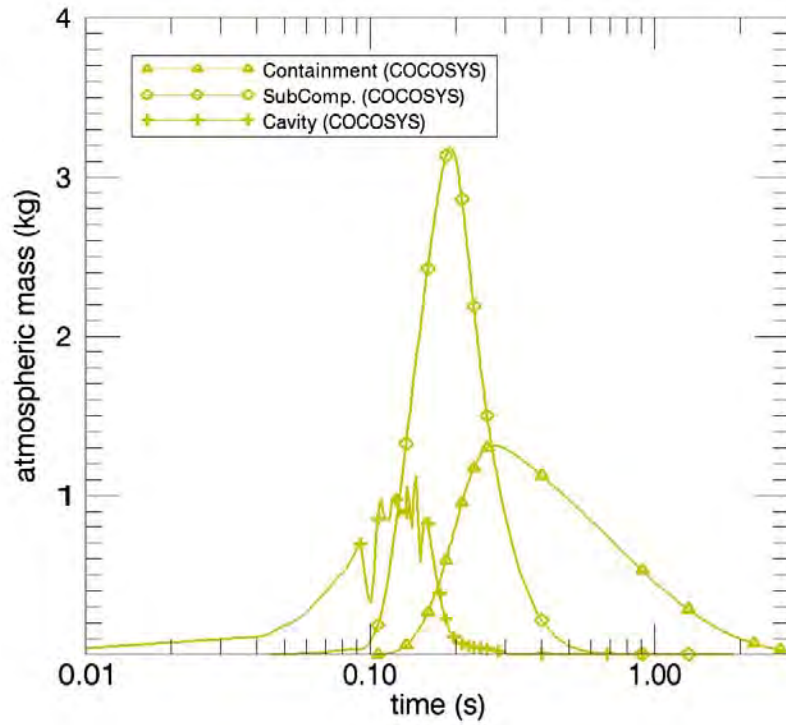


Abb. 5-28: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die luftgetragene Schmelzemasse in den Räumen.

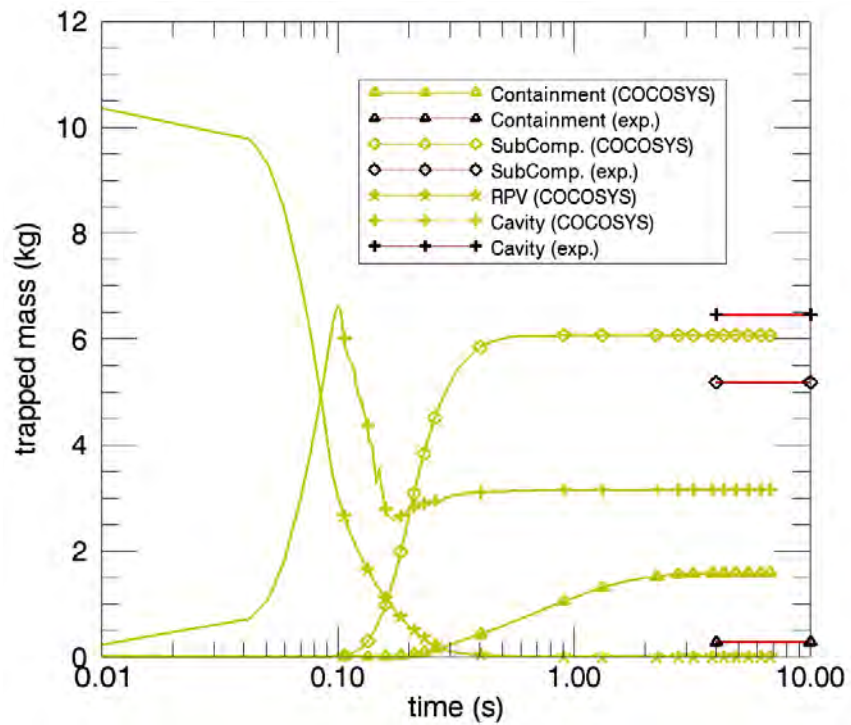


Abb. 5-29: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die abgelagerte Schmelzemasse in den Räumen.

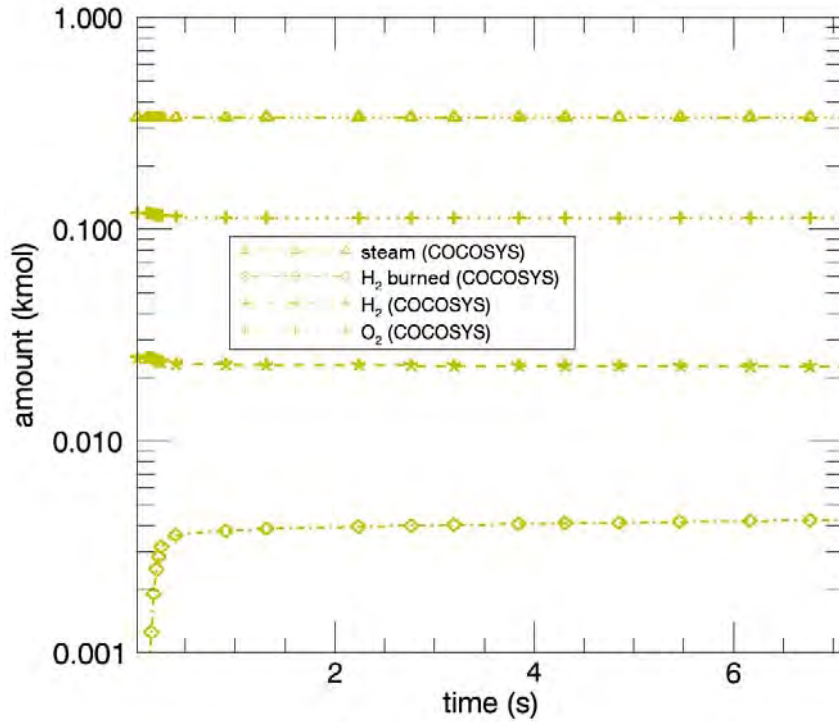


Abb. 5-30: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Mengen der wichtigsten Gase.

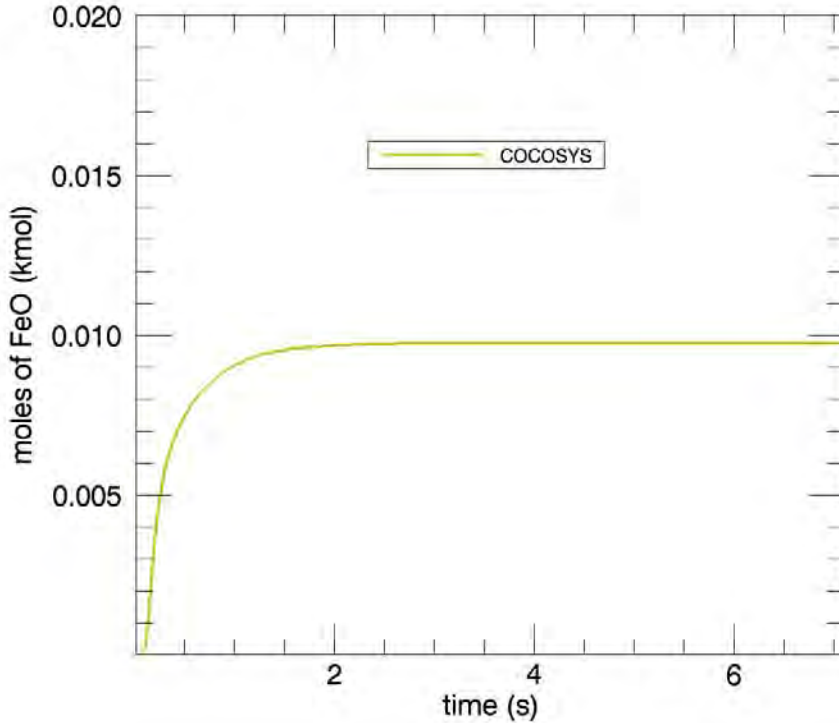


Abb. 5-31: DISCO-H03: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die produzierte Menge an Eisenoxid.

5.1.6 Sup-1

Im Jahre 1998 wurden in einer Zusammenarbeit von Forschungszentrum Karlsruhe, IRSN und der US-NRC zwei zusätzliche Experimente (Supplementary Tests /BLA 99/) in der Surtsey-Versuchsanlage der Sandia National Laboratories durchgeführt, bei denen in der Geometrie der Reaktorgrube grundsätzlich ein Anlagentyp der Firma Combustion Engineering (CE) nachgebildet wurde, mit enger, nach unten geschlossener Reaktorgrube. In den Supplementary-Tests wurde jedoch eine spezielle Anpassung an die Gegebenheiten beim EPR vorgenommen (Abplattung der Grube an den Rändern) mit einer direkten Strömungsmöglichkeit in den Kuppelbereich des Containments (Abb. 5-32). Die Versuche wurden im Maßstab 1:10 im Verhältnis zur Anlagengeometrie mit Thermitschmelze (Eisen-Aluminiumoxid) und Dampf sowie einer typischen Containmentatmosphäre durchgeführt. Die anfänglichen RDB-Drücke lagen bei 11 (Sup-1) und 15 bar (Sup-2) und die Lochdurchmesser bei 0,1 m (Sup-1) sowie 0,04 m (Sup-2). Die Schmelzemasse betrug 62 kg. In diesen Geometrien wurde ein großer Austrag von Schmelze aus dem RDB beobachtet, der zu einem Druckanstieg im Sicherheitsbehälter von beachtlichen 4 bar führte, was dem Maximum der übrigen in der Surtsey-Anlage durchgeführten, für die CE-Geometrie ausgelegten Versuche bei 80 bar RDB-Druck entsprach.

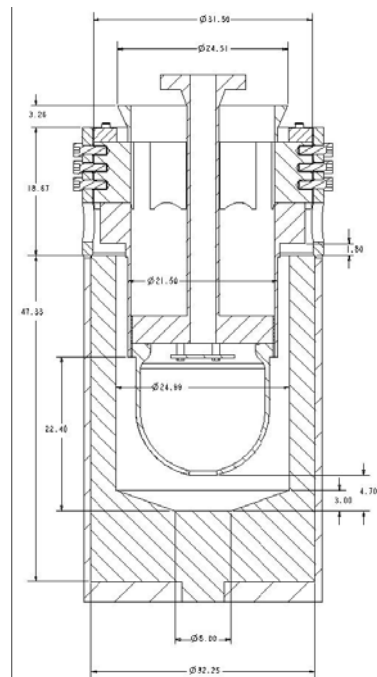


Abb. 5-32: Geometrie von RDB und Reaktorgrube in den Supplementary-Versuchen bei SNL (Bemaßung in Zoll).

**Nodalisation of
SUP-1
For Application in
CONTAIN/COCOSYS**

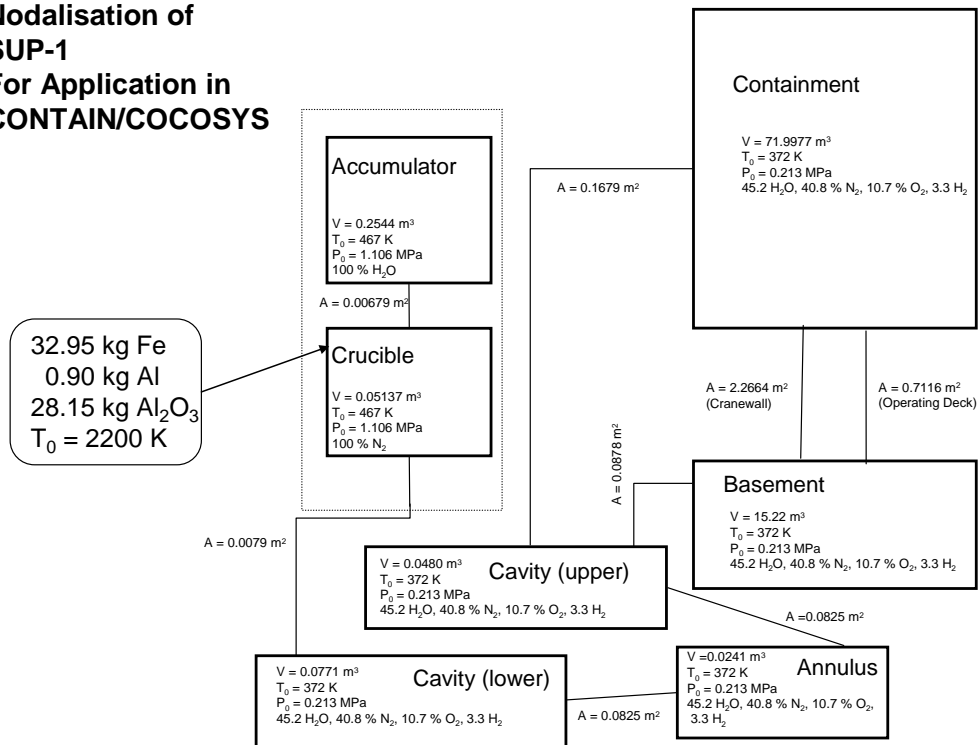


Abb. 5-33: Nodalisierung der Surtsey-Versuchsanlage für den Versuch SUP-1.

Die Zonenaufteilung für den Eingabedatensatz in COCOSYS zeigt die Abb. 5-33.

Das Einsetzen der zweiphasigen Ausströmung aus dem RDB erfolgt in der Rechnung frühzeitiger und scharfkantiger als im Experiment (Abb. 5-34). Zu späteren Zeiten ist die berechnete Druckentlastung des RDB aber in guter Übereinstimmung zum Experiment. Der Druckanstieg in der Reaktorgrube während der Schmelzfreisetzung wird wie stets in allen Nachrechnungen überschätzt. Der Druckanstieg in den anderen Räumen des Sicherheitsbehälters wird in guter Übereinstimmung zum Experiment wiedergegeben, allerdings wird das Maximum des Druckes später erreicht und etwas unterschätzt, die Rechnung zeigt dabei kein Abklingen des Druckes nach ca. 2,5-3 s wie im Experiment zu sehen (Abb. 5-35). Die Unterschätzung des Druckanstiegs hängt teilweise mit der Unterschätzung des Schmelzeintrags in den Containment-Dome zusammen (46 % gegenüber 69,2 % im Experiment). In der Rechnung stehen Reaktionsenergien aus der Produktion von 159 mol FeO durch Oxidation mit Sauerstoff sowie aus der Verbrennung von 174 mol Wasserstoff einer im Experiment bestimmten Menge von 650 mol an verbranntem Wasserstoff mit äquivalenten Beiträgen gegenüber, d. h. der Umsatz an hochenergetischen Reaktionen wird in der Rechnung auf etwa 50 % des experimentellen Wertes geschätzt. Angesichts der zeitlichen Lage von

Druckmaximum und seinem zeitlichen Abklingen scheint im Experiment die Verbrennung von Wasserstoff noch kurzzeitiger als in der Rechnung zu erfolgen.

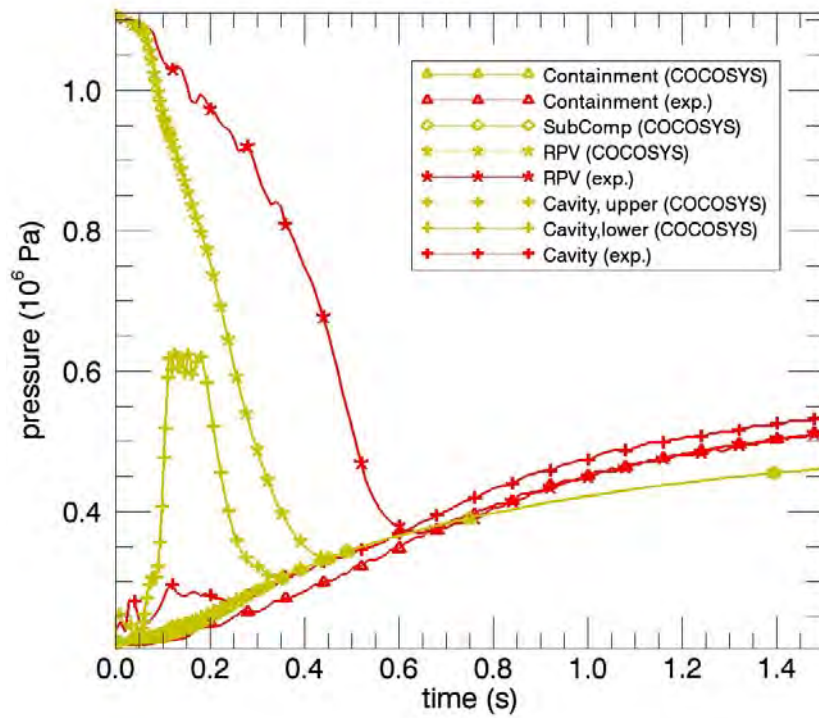


Abb. 5-34: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in den ersten 1,5 s.

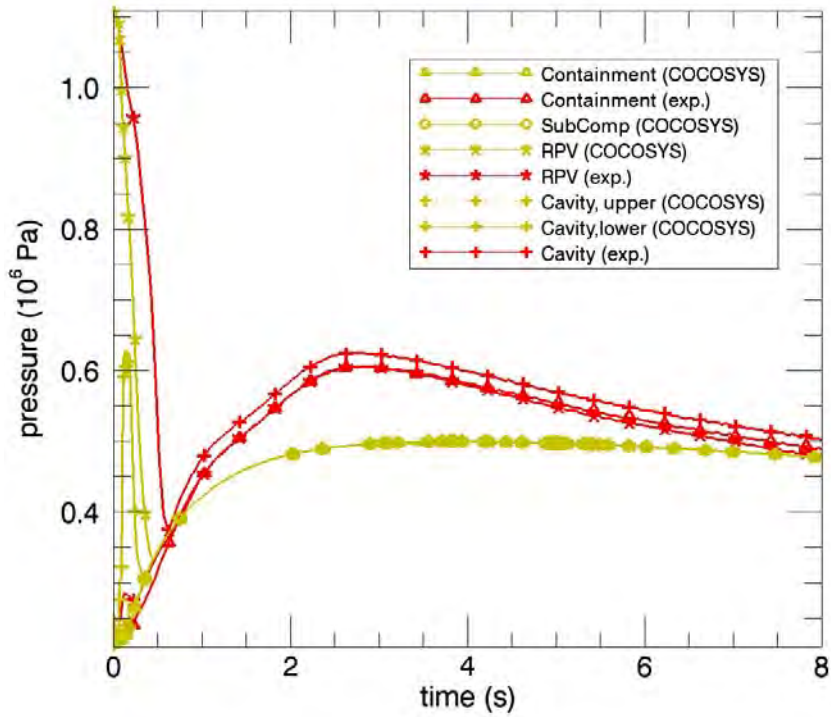


Abb. 5-35: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

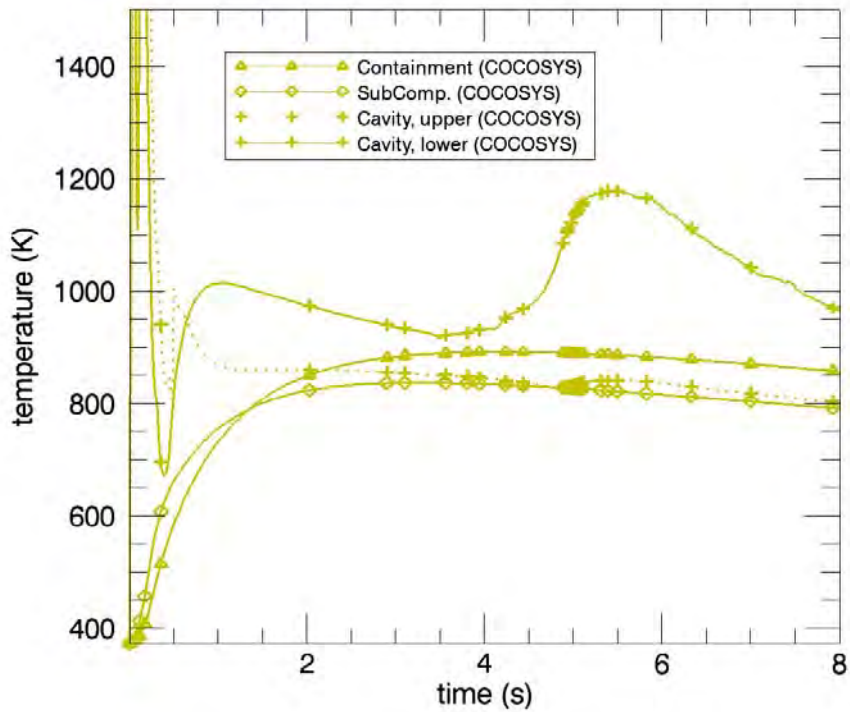


Abb. 5-36: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Zonentemperaturen

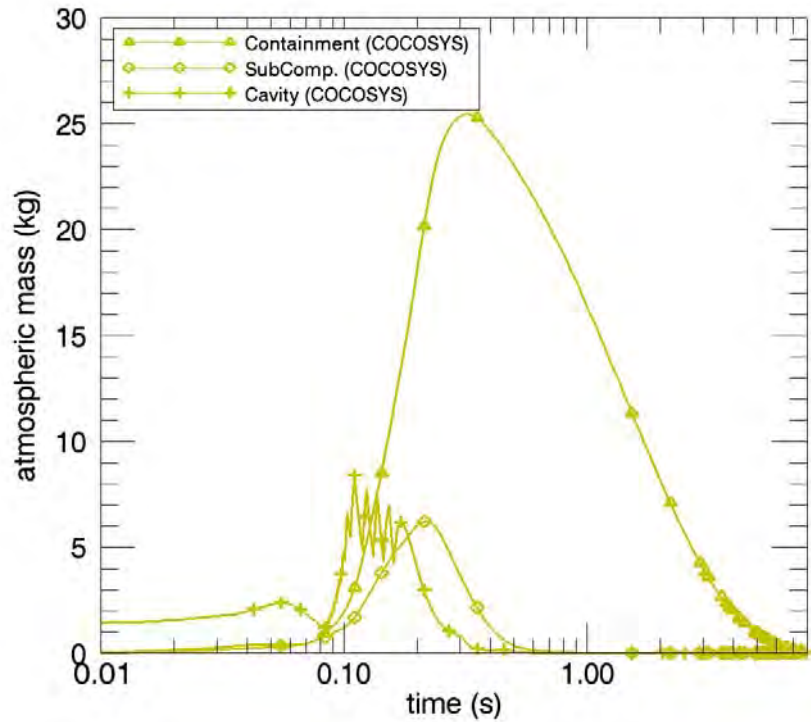


Abb. 5-37: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die luftgetragene Schmelzmasse in den Räumen.

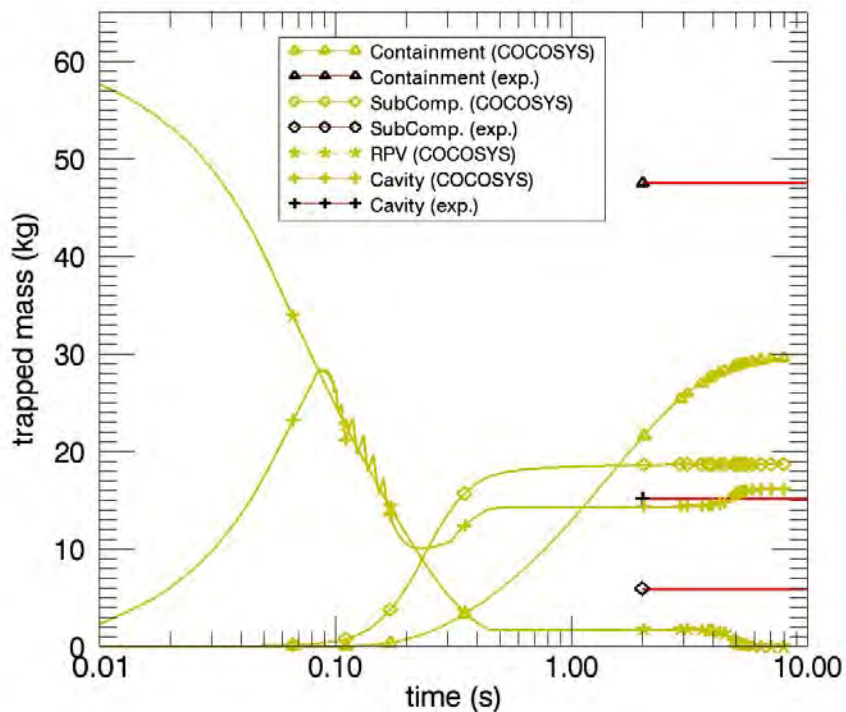


Abb. 5-38: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die abgelagerte Schmelzmasse in den Räumen.

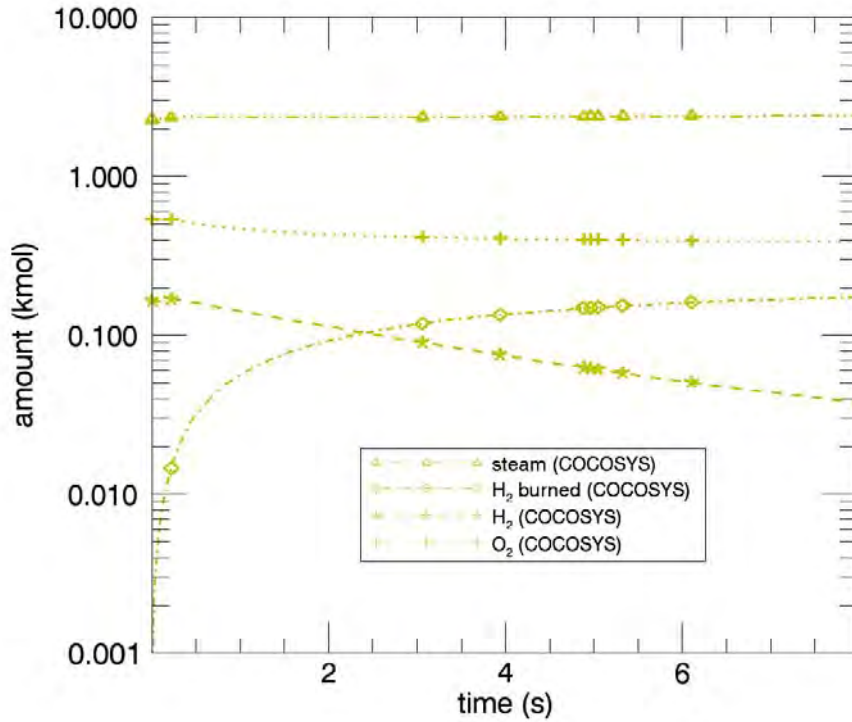


Abb. 5-39: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Mengen der wichtigsten Gase.

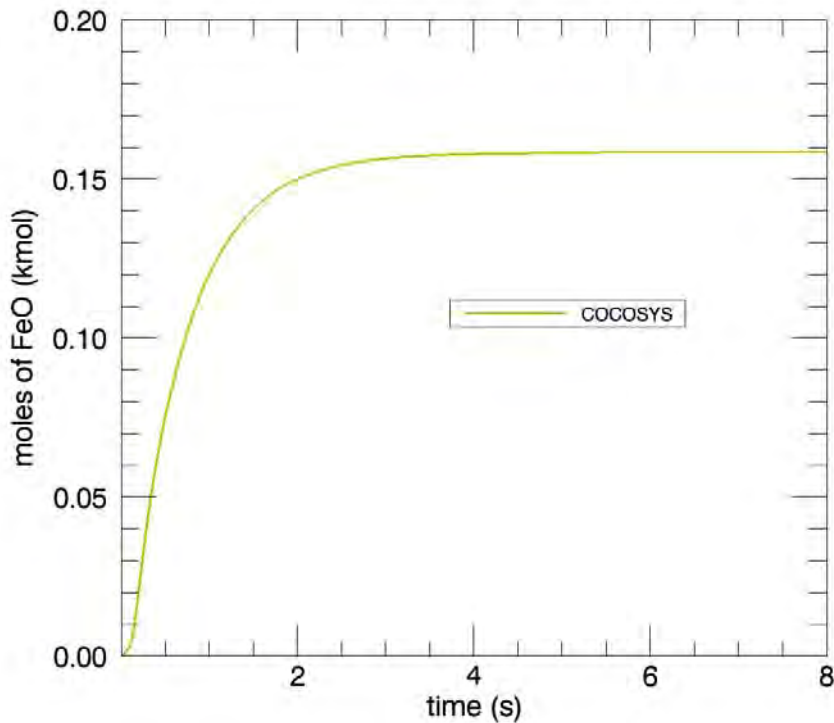


Abb. 5-40: Sup-1: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die produzierte Menge an Eisenoxid.

5.1.7 Sup-2

Die wichtigsten Änderungen von Sup-2 gegenüber Sup-1 betreffen den Druck im Primärkreislauf (1,53 MPa gegenüber 1,106 MPa in Sup-1) und den Lochdurchmesser im RDB (0,04 m gegenüber 0,1 m). Die Ergebnisse der Nachrechnung entsprechen in der Charakterisierung den Ergebnissen zu Sup-1:

- Die Zeit bis zum Einsetzen des Blowthrough wird unterschätzt (Abb. 5-41).
- Der spätere Verlauf des Druckabfalls im RDB ist in guter Übereinstimmung zu dem Experiment.
- Das Maximum des Druckes im Sicherheitsbehälter wird – vermutlich aufgrund langsamerer H₂-Verbrennung – später als im Experiment prognostiziert und das Druckmaximum wird – vermutlich auch aufgrund einer Unterschätzung des Schmelzeaustrages aus der Grube – niedriger berechnet als im Experiment.
- Der Umsatz von stark exothermen Reaktionen mit äquivalenten Energiebeiträgen wird mit 164 mol (aus Eisenoxidation mit Luftsauerstoff und H₂-Verbrennung) zu 400 mol zu etwa 59 % unterschätzt.

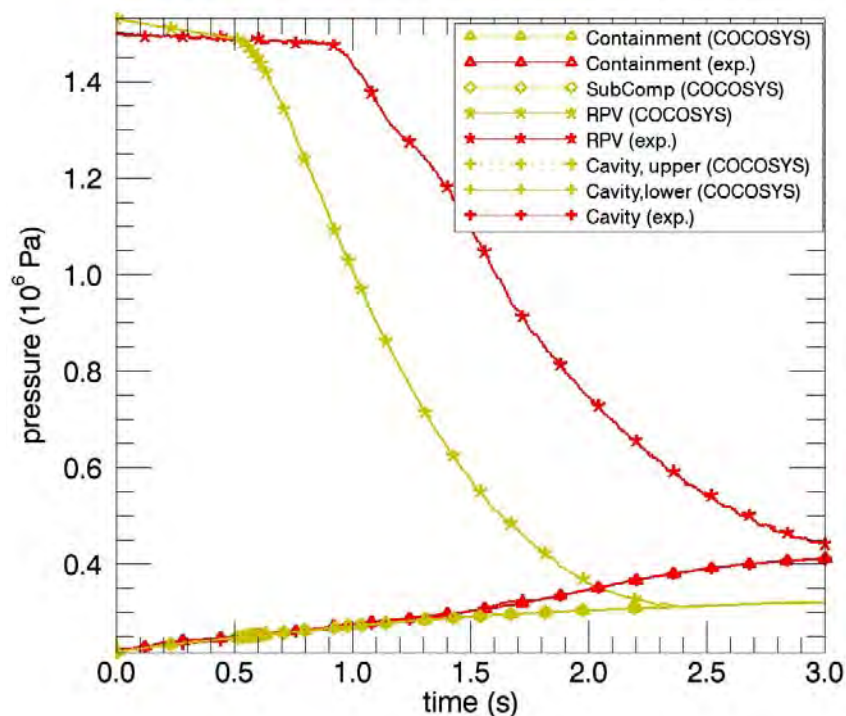


Abb. 5-41: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in den ersten 3 s.

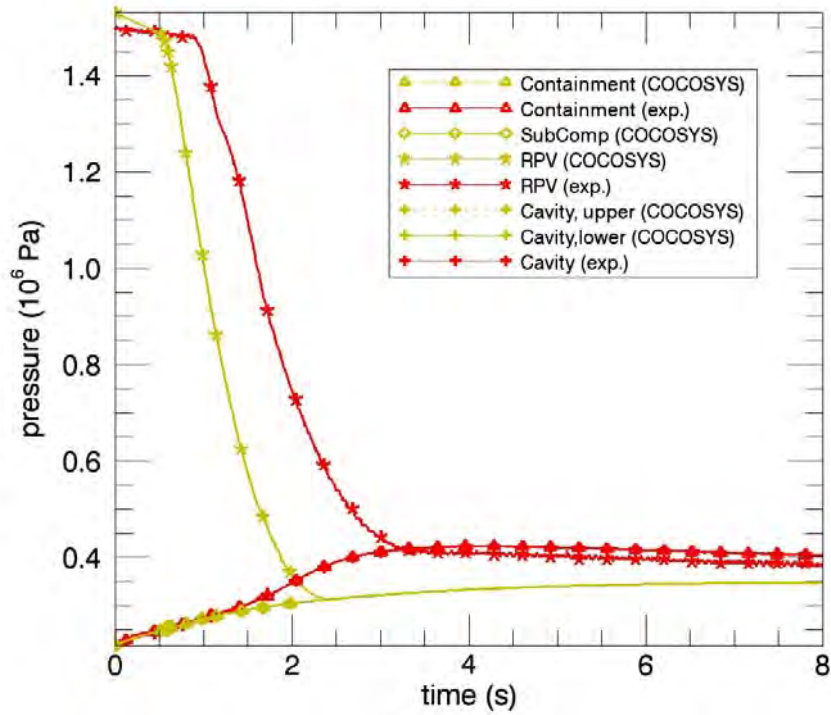


Abb. 5-42: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

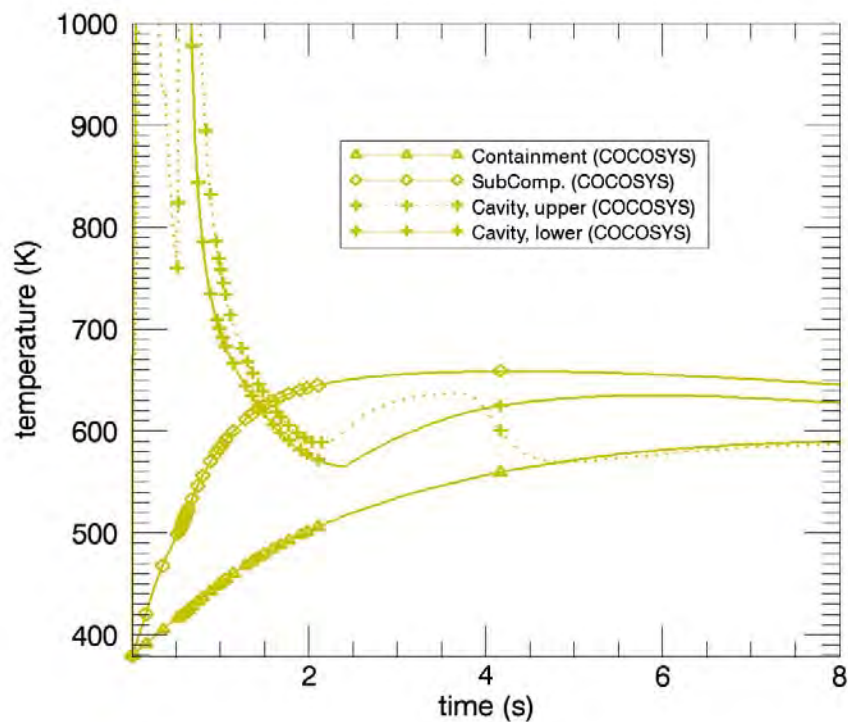


Abb. 5-43: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Zonentemperaturen

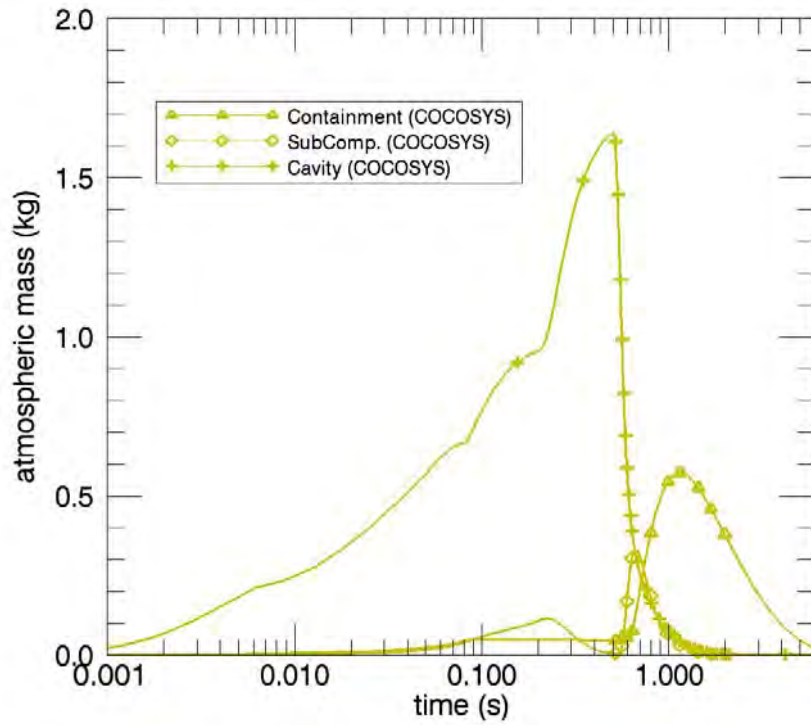


Abb. 5-44: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die luftgetragene Schmelzemasse in den Räumen.

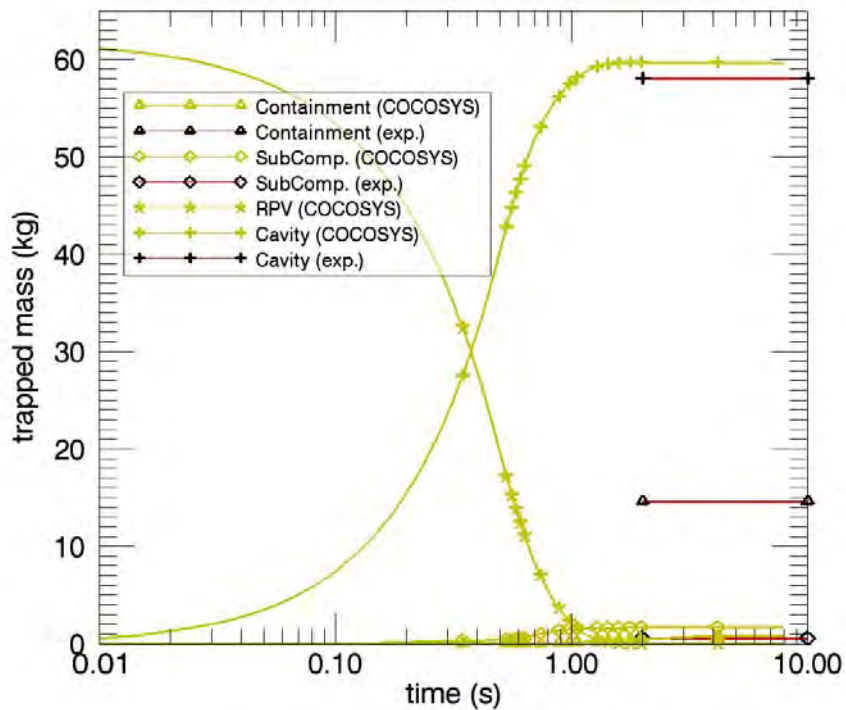


Abb. 5-45: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die abgelagerte Schmelzemasse in den Räumen.

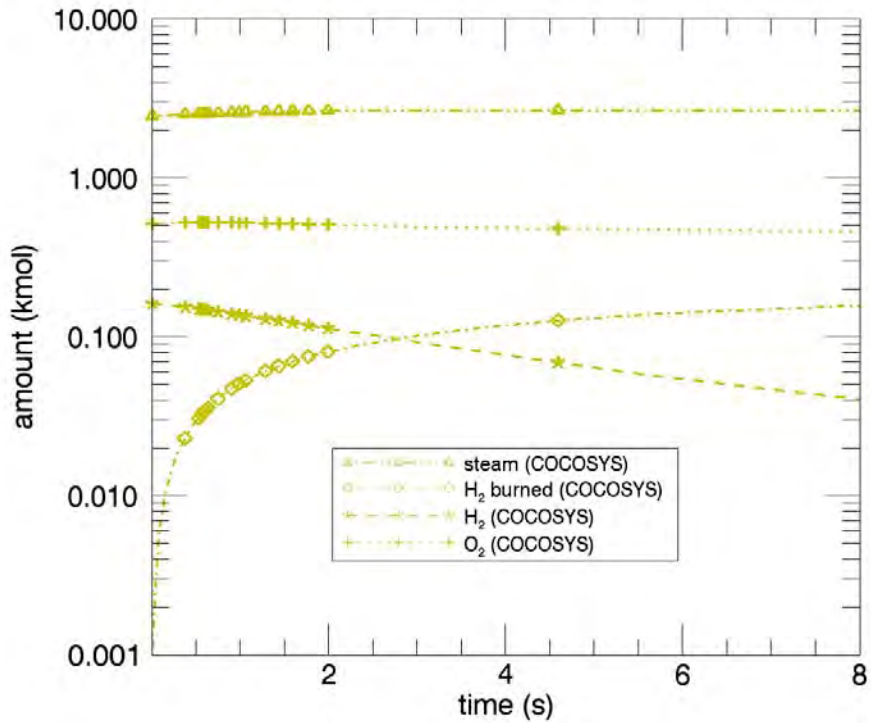


Abb. 5-46: Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Mengen der wichtigsten Gase.

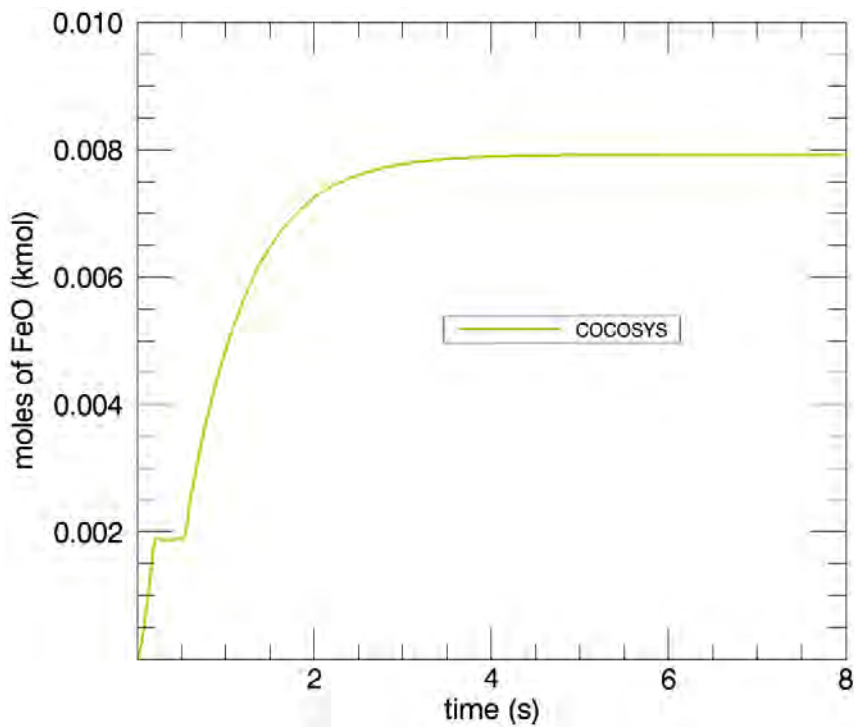


Abb. 5-47 Sup-2: Rechenergebnisse mit COCOSYS für die produzierte Menge an Eisenoxid.

5.2 Benchmark

Im Arbeitsplan war vorgesehen, für die Basisabsicherung mit COCOSYS einen reduzierten analytischen Testfall, der sich an einer großen DWR-Anlage orientiert, in einem Benchmark mit verschiedenen anderen Modellansätzen zu vergleichen. Durch diesen Vergleich sollen Erkenntnisse darüber gewonnen werden, welche Einzelphänomene in den vorhandenen Modellansätzen zu unterschiedlicher (d. h. unsicherer) Prognose der relevanten Prozesse führen, um daraus ggf. einen gezielten Entwicklungsbedarf für Einzelmodelle abzuleiten.

In demselben Zeitrahmen der Arbeiten zu diesem Projekt wurde in der SARNET Fachgruppe zu DCH (WP 13.2) eine Aktion gestartet, die ebendiese Zielsetzung hatte, allerdings nicht an einem virtuellen Testfall, sondern am Beispiel eines Experimentes, in welchem der französische Druckwasserreakortyp P'4 skaliert dargestellt wurde. Es handelt sich um das Experiment LACOMERA-DISCO-L1, dessen detaillierte Ergebnisse zu diesem Zweck den SARNET-Partnern zur Verfügung gestellt wurden.

Solange die fertige Version von COCOSYS-DCH nicht zur Verfügung stand, wurde in SARNET mit CONTAIN teilgenommen (siehe Abschnitt 3.2.2). Die Diskussionen zu diesem Codevergleich fanden im Rahmen zweier spezieller Workshops in SARNET statt /MEI 05b, MEI 06b/. Die Rechenergebnisse der Teilnehmer sind als eigene Berichte in SARNET veröffentlicht /SPE 06/. Ein weiterer Bericht, der derzeit im Entwurf vorliegt, fasst die Erkenntnisse aus der SARNET-Aktion zusammen /MEI 06/.

Zum Zwecke der Basisabsicherung der vorliegenden Version des DCH-Moduls in COCOSYS wurde überprüft, ob sich mit dem aktuellen Modellierungsstand und den gefundenen Modellparametern eine akzeptable Prognose mit COCOSYS für das Experiment DISCO-L1 in der französischen Geometrie eines Reaktors vom Typ P'4 erstellen lässt. Zur Erinnerung: Im SARNET-Benchmark für DISCO-L1 war es mit CONTAIN und dem zu diesem Zeitpunkt bereit gestellten, einheitlichen Best-Estimate-Parametern bislang nicht gelungen, konsistente Rechnungen für DISCO-L1, DISCO-H02 sowie DISCO-H04 zu erstellen (siehe Abschnitt 3.2.2).

5.2.1 Nachrechnung von DISCO-L1 mit Übernahme der Parameter aus DISCO-Nachrechnungen

Die Bilder Abb. 5-48 bis Abb. 5-54 zeigen detaillierte Ergebnisse der Nachrechnung mit COCOSYS für DISCO-L1 im Vergleich zur CONTAIN-Rechnung sowie zu dem Experiment selbst. Es muss hier besonders erwähnt werden, dass diese Rechnung mit identischen Modellparametern durchgeführt wurde wie alle in diesem Kapitel vorgestellten Nachrechnungen mit COCOSYS, d. h. dass hier keine besondere Anpassung an die Geometrie der Versuchsanlage durchgeführt worden ist.

Abb. 5-48 zeigt, dass mit COCOSYS die Druckentlastung des RDB während des Blowdown in besserer Übereinstimmung zum Experiment gerechnet wird als mit CONTAIN, abgesehen von einem zeitlichen Versatz, der – wie auch bei CONTAIN – durch den scharfkantigen Abfall des Druckes beim Übergang vom einphasigen Ausströmen zum Ausströmen von Schmelze und Gas aufgrund von Modelldefiziten bedingt ist.

Der Druckpeak in der Reaktorgrube während des Blowdown wird von COCOSYS allerdings stark erhöht dargestellt (Abb. 5-48). Ursächlich für diese Druckerhöhung ist die hohe Eintragsrate von Schmelze in die Gasströmung (vgl. Entrainment-Rate in Abb. 5-54 gegenüber CONTAIN). Die scharfe Spitze in der Entrainment-Rate erzeugt eine rasche Zunahme der Schmelzemasse im luftgetragenen Feld der Cavity-Atmosphäre, was für den berechneten Druckerhöhung ursächlich ist. Die Entrainment-Rate ist gegenüber CONTAIN spitzer, da zwecks Findung eines einheitlich gültigen Parametersatzes für alle Experimente der Zeitbereich für das Entrainment gegenüber CONTAIN durch Anwendung einer höheren kritischen Kutateladze-Zahl ($Ku_{krit} = 10$ in COCOSYS gegenüber $Ku_{krit} = 0,6$ in der Rechnung mit CONTAIN; vgl. Abschnitt 2.2.2.1) auf genügend große Strömungsgeschwindigkeiten eingegrenzt wurde. Damit bei verkürztem Zeitintervall dennoch im Integral dieselbe Masse an Schmelze in den Gasstrom eingetragen wird wie in der CONTAIN-Rechnung, war eine Anpassung des Entrainment-Faktors im COCOSYS-Datensatz nötig. Dieser wurde von $K_c = 100$ im CONTAIN-Datensatz auf $K_c = 10000$ im COCOSYS-Datensatz angehoben. Aufgrund der überhöhten Berechnung des Druckpeaks in der Reaktorgrube für alle Experimente kann geschlossen werden, dass der mit diesen Parameter Ku_{krit} und K_c berechnete Zeitbereich für das Entrainment zu schmal und die Entrainment-Rate zu spitz ist.

Das Zusammenspiel der Parameter Ku_{krit} als Kriterium für die minimale effektive Gasgeschwindigkeit in der Reaktorgrube, bei der Entrainment einsetzt, und dem Vorfaktor

K_c in der Korrelation für die Entrainment-Rate wird daher als wichtige Einflussgröße identifiziert, um zu einer verbesserten Berechnung des Druckverhaltens in der Reaktorgrube während des Blowdown zu gelangen. Zudem kann die im Input vorgegebene Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Gas und atmosphärisch getragener Schmelze (Schlupf) eine wichtige Rolle spielen, die in 5.2.3 eingehender untersucht wird. Der Einfluss der Variation von kritischer Kutateladze-Zahl Ku_{krit} und Cavity-Konstante K_c wird in 5.2.2 untersucht.

Abb. 5-54 zeigt, dass mit COCOSYS in Gegensatz zu CONTAIN bereits vor dem berechneten Blowthrough-Zeitpunkt (bei $t = 0,077$ s) ein Eintrag von Schmelze in die Atmosphäre vorgegeben werden kann, um die reale Fragmentierung des Schmelzestrahls bereits während der einphasigen Ausströmung zu berücksichtigen. Derzeit muss hierzu im Input der Anteil der ausströmenden Schmelze vorgegeben werden, der direkt in den luftgetragenen Zustand in der Reaktorgrube übergeht. Diese Modellannahme scheint gegenüber dem zuvor besprochenen Zusammenhang nicht ursächlich für die Überhöhung des Druckpeaks in der Reaktorgrube zu sein.

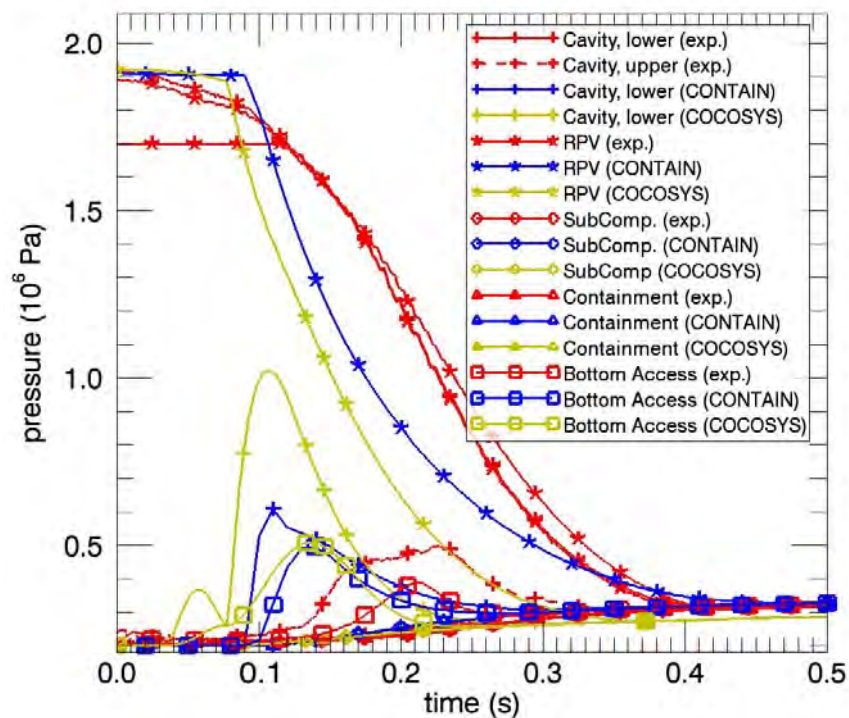


Abb. 5-48: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die Drücke in den ersten 0,5 s.

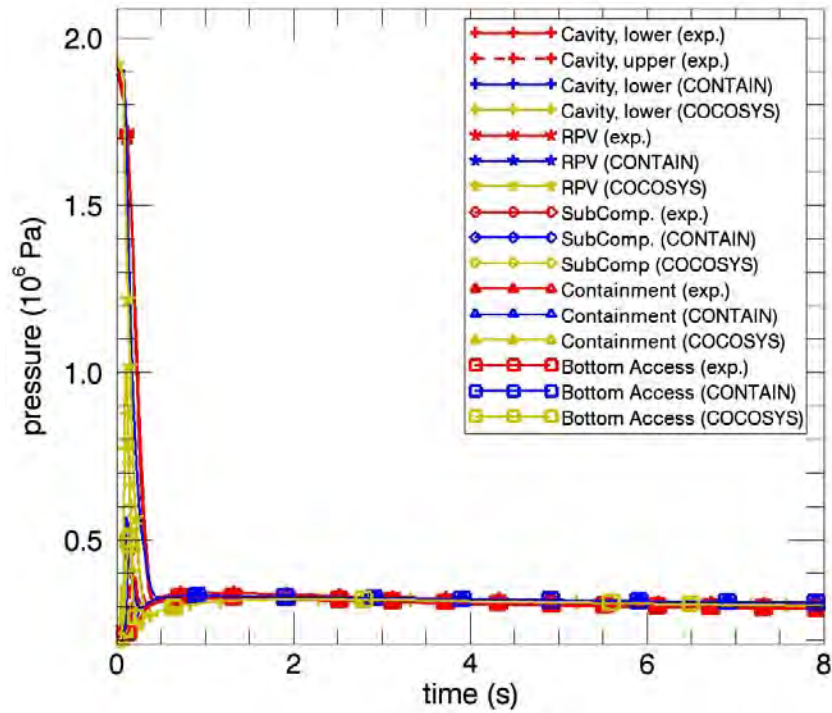


Abb. 5-49: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die Drücke für den Zeitraum 0..8 s.

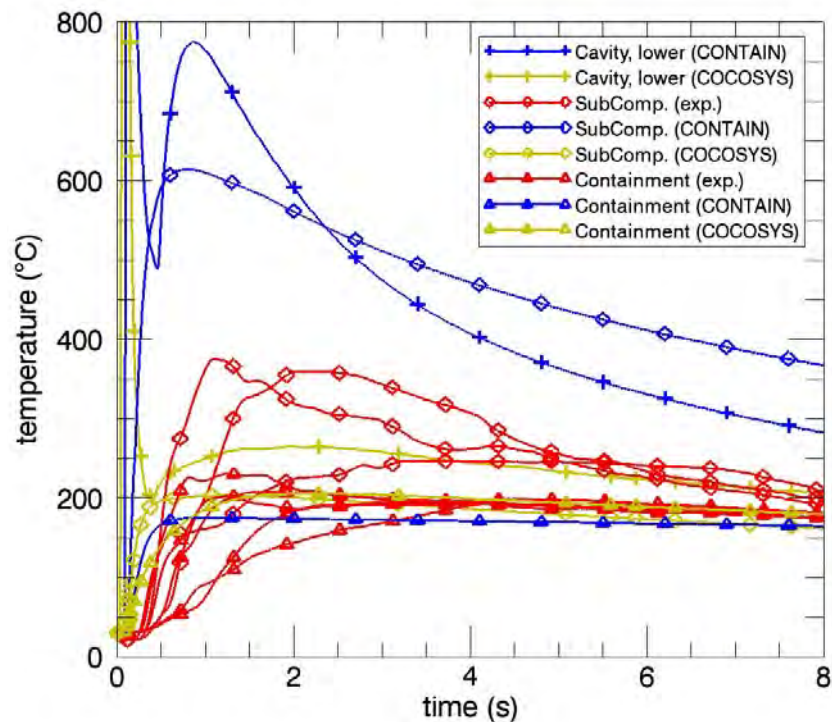


Abb. 5-50: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die Zonentemperaturen im Vergleich zum Experiment.

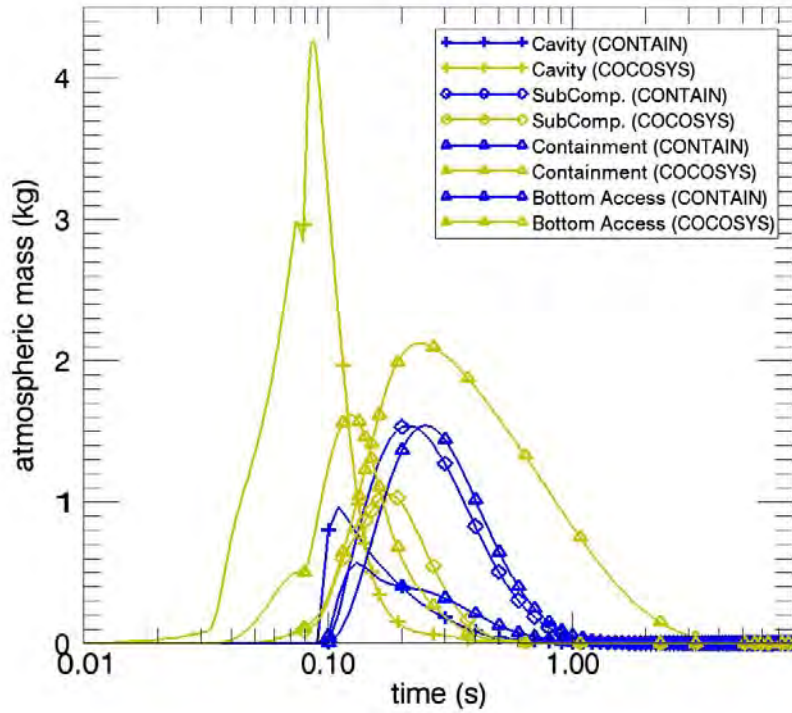


Abb. 5-51: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die luftgetragene Schmelzmasse in den Räumen.

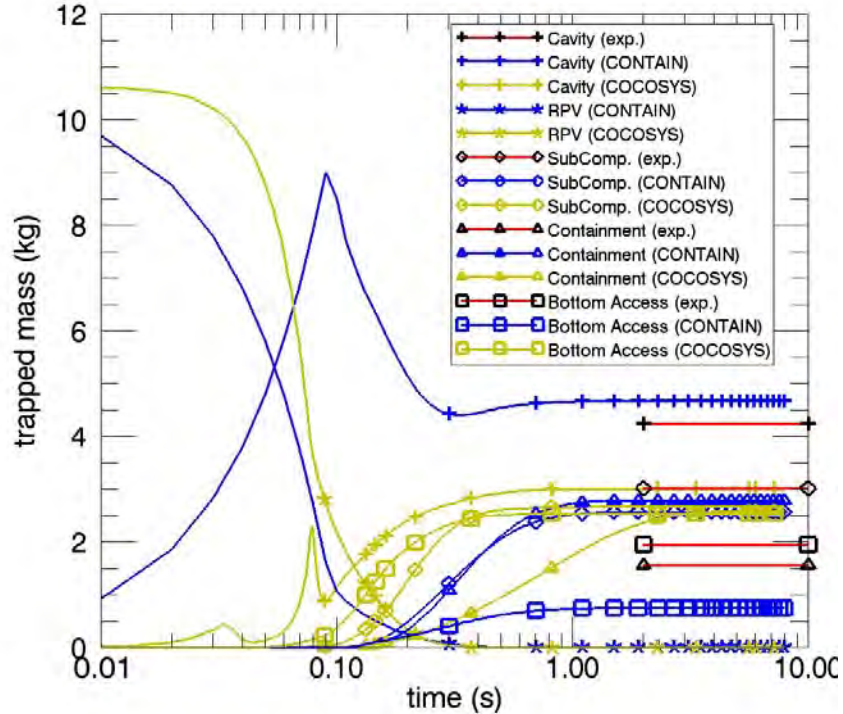


Abb. 5-52: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die abgelagerte Schmelzmasse in den Räumen.

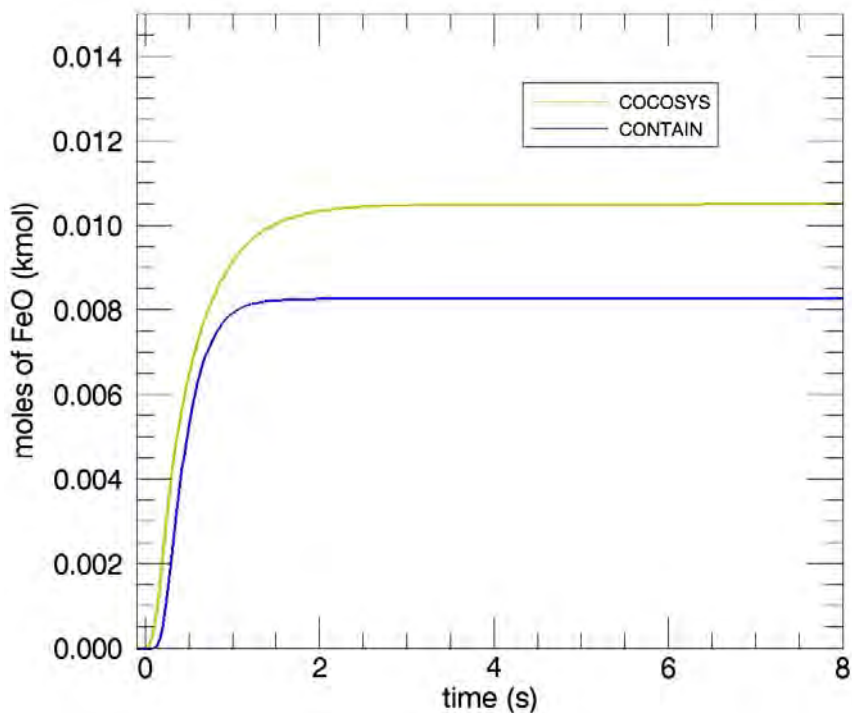


Abb. 5-53: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die produzierte Menge an Eisenoxid.

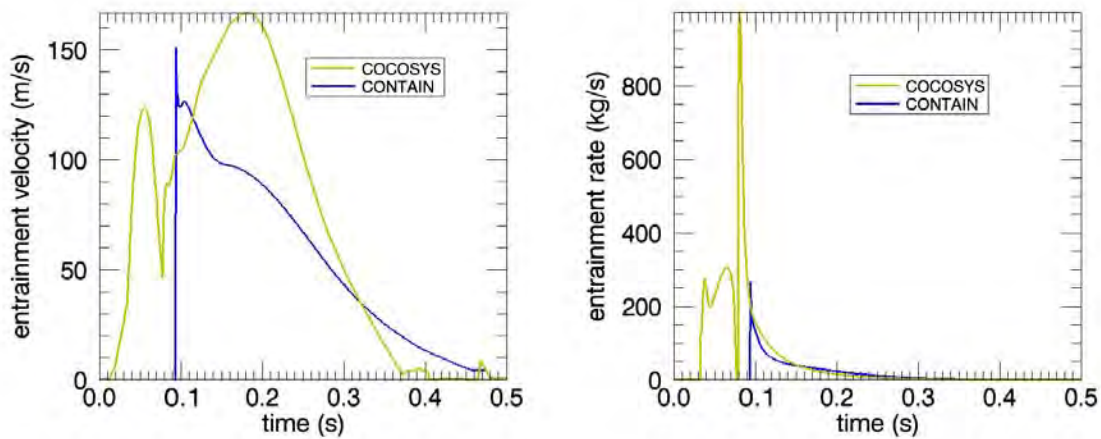


Abb. 5-54: DISCO-L1: Rechenergebnisse mit COCOSYS und CONTAIN für die Entrainment-Gasgeschwindigkeit (links) und der Entrainment-Rate (rechts).

5.2.2 Variation von kritischer Kutateladze-Zahl und Cavity-Konstante

In den COCOSYS-Rechnungen des Abschnittes 5 ist gegenüber den CONTAIN-Rechnungen aus Abschnitt 3 die kritische Kutateladze-Zahl Ku_{krit} von 0,6 auf 10 und die Entrainment-Rate von ca. 100 auf 10 000 erhöht worden. Wie zuvor besprochen ist die Begrenzung des Zeitfensters für das Entrainment (durch Anhebung der kritischen Kutateladze-Zahl im Input) zusammen mit einer Anhebung der Entrainment-Rate (durch Vergrößerung des Vorfaktors K_c für die Entrainment-Rate im Input) in der COCOSYS-Rechnung ursächlich für die Überhöhung des Druckanstiegs in der Reaktorgrube während der Ausströmung gegenüber der CONTAIN-Rechnung, die für den SARNET-Benchmark durchgeführt wurde. Dies zeigen die Abb. 5-55 für die Drücke, Abb. 5-56 für die in den Räumen abgelagerten Massen sowie Abb. 5-57 für die Entrainment-Rate mit im COCOSYS-Input geänderten Parametern $Ku_{krit} = 0,1$ und $K_c = 50$. Mit kleinerer Ku_k -Zahl und abgesenkter Entrainment-Rate werden in der COCOSYS-Rechnung im Maximum ähnliche Entrainment-Raten wie in der CONTAIN-Rechnung erzielt. Ein Seiteneffekt betrifft allerdings das Integral der Schmelzeaustragung aus der Reaktorgrube: Mit Variation der Parameter Ku_{krit} und K_c wie oben beschrieben verbleibt in der variierten Rechnung mehr Schmelze in der Reaktorgrube als in der Rechnung aus Abschnitt 5.2.1. Die Übereinstimmung des Integrals der ausgetragenen Schmelzemasse ist nun sogar besser als zuvor.

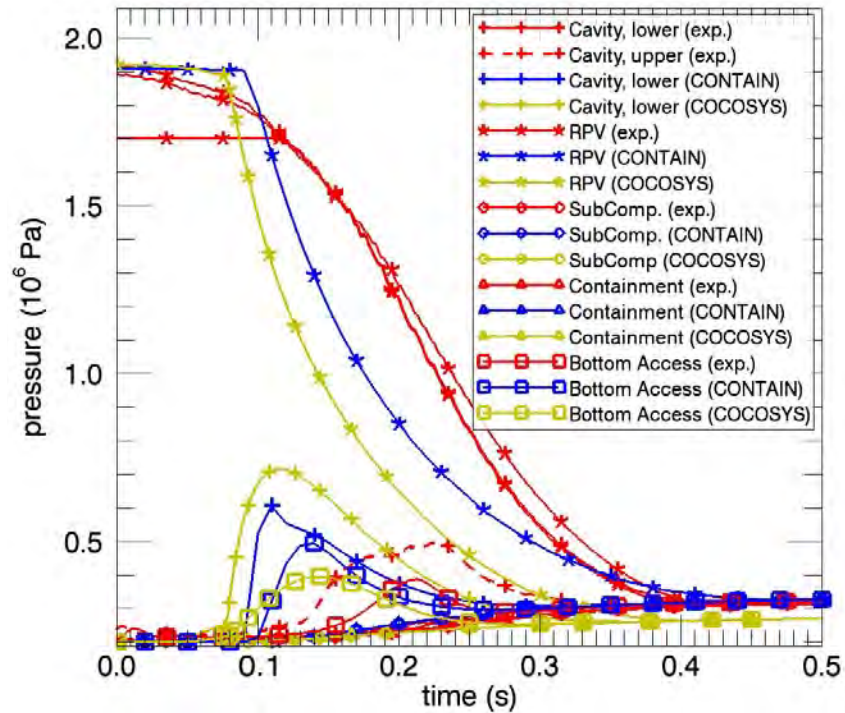


Abb. 5-55: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die Drücke in den ersten 0,5 s mit COCOSYS für $Ku_{krit} = 0,1$ und $K_c = 50$ im Vergleich zur Rechnung mit CONTAIN und zum Experiment.

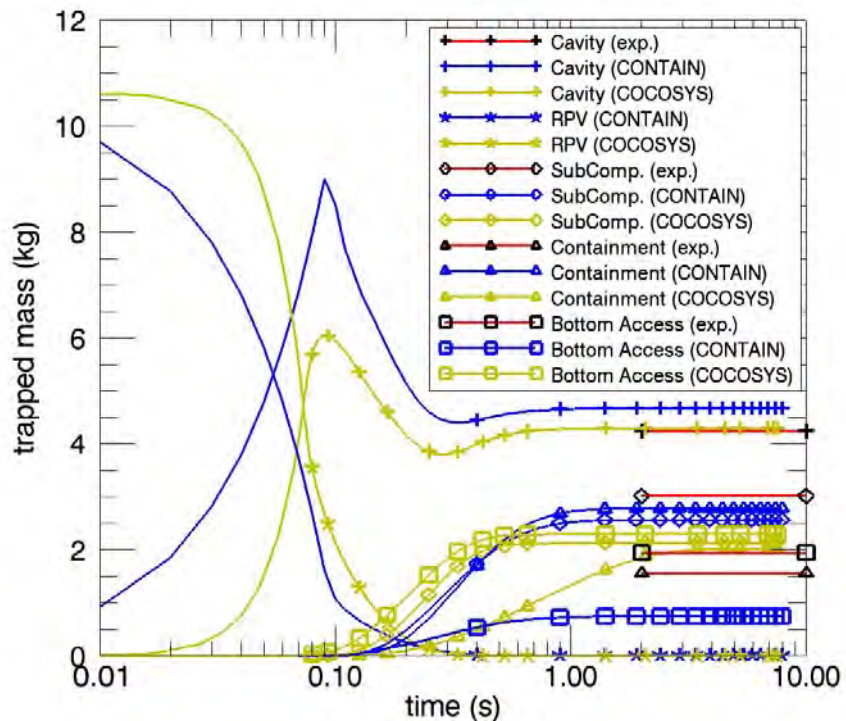


Abb. 5-56: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die abgelagerten Schmelzmassen in den Räumen in den ersten 0,5 s mit COCOSYS für

$Ku_{krit} = 0,1$ und $K_c = 50$ im Vergleich zur Rechnung mit CONTAIN und zum Experiment.

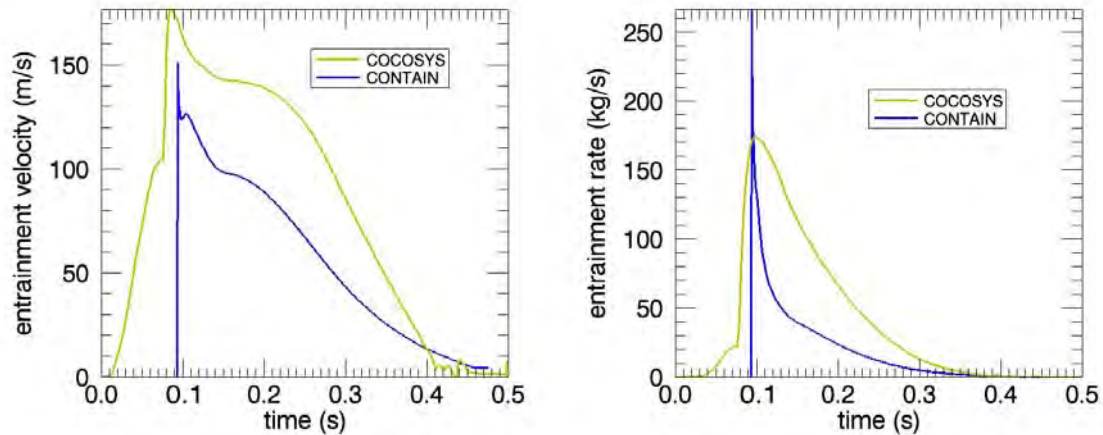


Abb. 5-57: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die Entrainment-Gasgeschwindigkeit (links) und der Entrainment-Rate (rechts) mit COCOSYS für $Ku_{krit} = 0,1$ und $K_c = 50$ im Vergleich zur CONTAIN-Rechnung.

5.2.3 Variation des Schlupfes

Es muss in Betracht gezogen werden, dass die vom Gas mitgerissenen Schmelzetropfen mit einer kleineren Geschwindigkeit im Strömungsfeld transportiert werden als mit der Geschwindigkeit des Gases. Für diesen Zweck ist in den Transportgleichungen in COCOSYS – wie auch in CONTAIN – die Größe des Schlupfes eingeführt worden. In Strömungsversuchen mit den Medien Wasser und Luft wurden Tropfengeschwindigkeiten gemessen die ca. 80 % von denen des Gases betragen /AZZ 97/. Im CONTAIN-Manual /MUR 97/ wird für Reaktorapplikationen sogar empfohlen, den Schlupf s in der Reaktorgrube auf 5 zu setzen,

$$s = \frac{v_g}{v_d} = 5$$

d. h. dass die luftgetragenen Schmelzetropfen 5-mal langsamer transportiert werden, als das Gas, womit von den CONTAIN-Autoren bessere Übereinstimmungen zu einigen Experimenten erzielt worden waren. In den vorgestellten Rechnungen mit COCOSYS wurde bislang ein Geschwindigkeitsverhältnis von $s = 1$, d. h. identische Geschwindigkeit von Gas und Schmelze, betrachtet. Der Einfluss des Schlupfes wurde in einer zusätzlichen Rechnung für DISCO-L1 untersucht, in der gegenüber der Rech-

nung aus Abschnitt 5.2 ein Schlupf von 5 einheitlich für alle Räume und alle Größenklassen vorgegeben wurde.

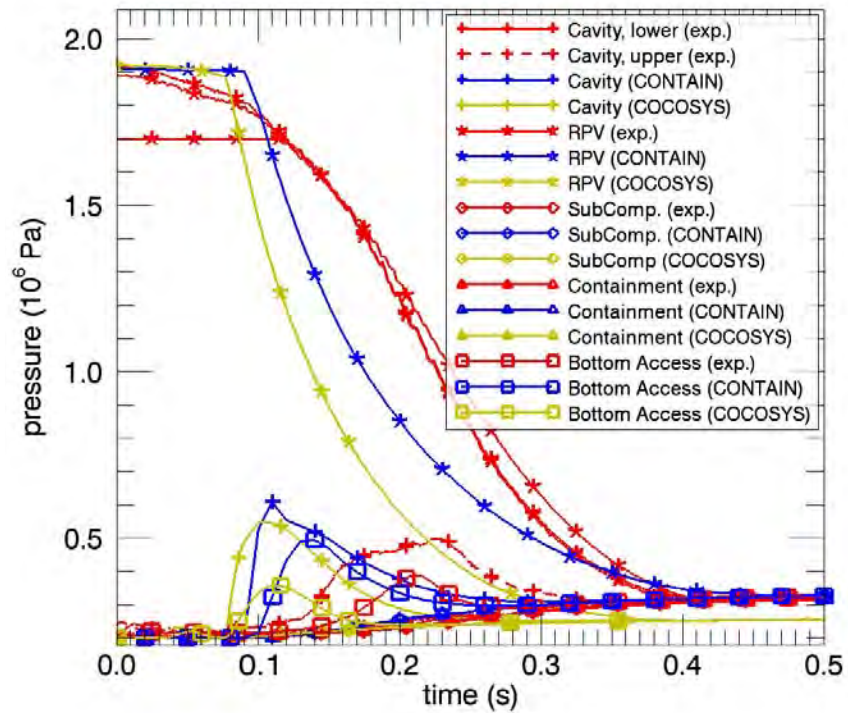


Abb. 5-58: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die Drücke in den ersten 0,5 s mit COCOSYS für einen Schlupf = 5 im Vergleich zur Rechnung mit CONTAIN und zum Experiment.

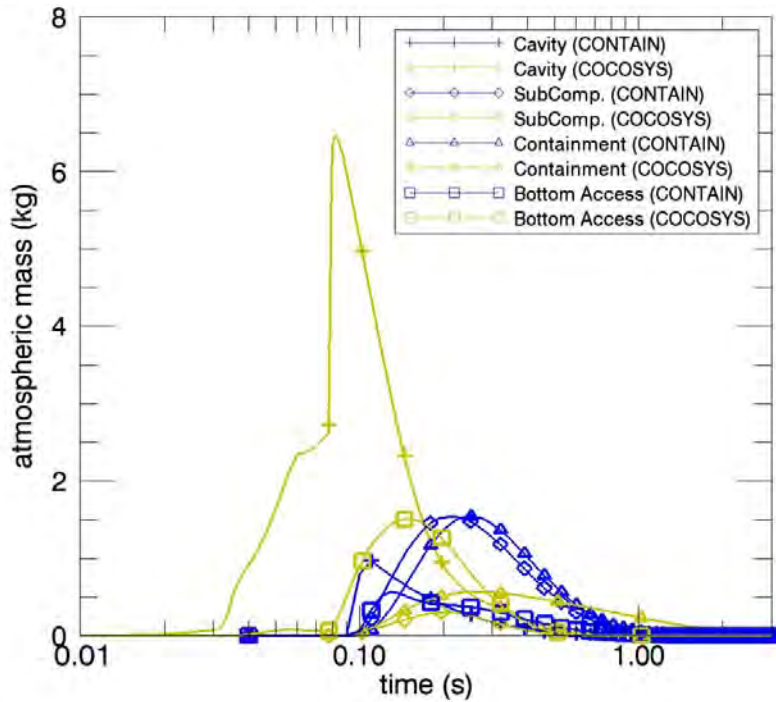


Abb. 5-59: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die atmosphärisch getragenen Massen in mit COCOSYS für einen Schlupf = 5 im Vergleich zur Rechnung mit CONTAIN und zum Experiment.

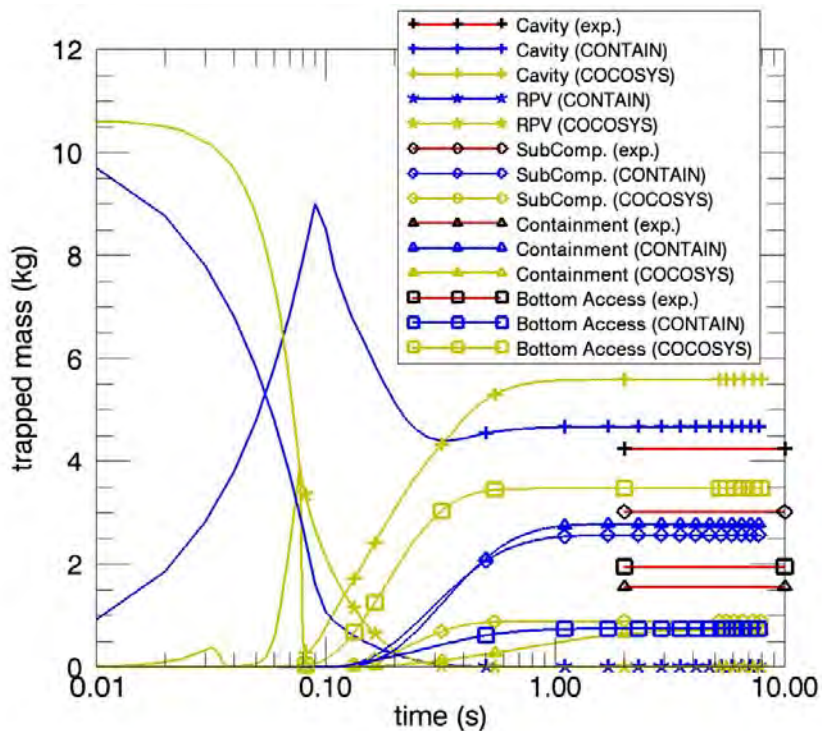


Abb. 5-60: DISCO-L1: Rechenergebnisse für die abgelagerten Massen in den Räumen mit COCOSYS für einen Schlupf = 5 im Vergleich zur Rechnung mit CONTAIN und zum Experiment.

Mit Anhebung des Schlupfes von 1 auf 5 erhöht sich zwar die zwischenzeitlich erreichte, maximale Schmelzemasse im luftgetragenen Zustand in der Reaktorgrube von ca. 4 kg (Abb. 5-51) auf ca. 6,5 kg (Abb. 5-59), der berechnete Druckpeak in dem unteren Bereich der Reaktorgrube schrumpft jedoch von 1,02 MPa (Abb. 5-48) auf 0,54 MPa (Abb. 5-58), mit besserer Übereinstimmung zum Experiment. Seiteneffekt eines höheren Schlupf-Wertes ist auch hier die Änderung bei dem Integral der aus der Grube ausgetragenen Masse: Statt einer Überschätzung des Austrages aus der Reaktorgrube wie in der ursprünglichen Rechnung (Abb. 5-52) wird mit einem Schlupf von $s = 5$ der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube unterschätzt: In der Rechnung verbleibt mehr Schmelze in der Reaktorgrube als im Experiment.

5.3 Rechnung mit COCOSYS-DCH für Sequoyah

Zum Testen des DCH-Moduls in COCOSYS wurde eine Containmentrechnung analog zur der im Contain-Manual /MUR 97/ für die Sequoyah-Anlage dargestellten Rechnung durchgeführt. Die 9-Zonen-Nodalisierung der Anlage wurde für die COCOSYS-Rechnung übernommen (Abb. 5-61). Zone 1 repräsentiert die Reaktorgrube. Der untere Teil des Sicherheitsbehälters ist als Zone 2 zusammengefasst. Zone 3 umfasst das Volumen des unteren Kondensatorplenums. Der Eiskondensator ist Zone 4, das obere Kondensatorplenum wird durch Zone 5 beschrieben. Der RDB und das Primärsystem ist im Modell die Zone 7. Das Ringraumvolumen zwischen Sicherheitsbehälter-Schale und Gebäudeaußenschale wird durch Zone 8 dargestellt und Zone 9 beschreibt die Umgebung. Mit Ausnahme der Zone für das Primärsystem starten alle Zonen mit gesättigter Dampf-Luft-Gemisch-Atmosphäre bei 1 bar. Das Primärsystem steht unter einem Druck von 80 bar bei einer Temperatur von 1000 K. Die Sümpfe sind anfänglich trocken. In der Zone 2 wird eine Wasser- und Dampffreisetzung angenommen. Ab 7820 s wird innerhalb des RDB eine Kernzerstörung angenommen. Die H_2 -Freisetzung hält bis kurz vor dem RDB-Versagen an und transportiert etwa 720 kg Wasserstoff in Zone 2 des Sicherheitsbehälters.

Die Rechnung setzt sich aus zwei Teilen zusammen: Erstens der Zeitbereich bis zum RDB-Versagen bei 33000 s und zweitens die Freisetzung der Kernschmelze in den folgenden 30 s. Aufgrund von Modellunterschieden zwischen CONTAIN und COCOSYS wurden einzelne Eingabegrößen anhand der erzielten Ergebnisse angepasst. So unterscheiden sich z. B. die Eingabegrößen des Eiskondensatormodells in den beiden Programmen. Weitere technische Daten der Sequoyah-Anlagen liegen nicht vor. Wei-

terhin wurden einzelne COCOSYS-Modelle punktuell ergänzt. Der Druckverlauf hängt empfindlich vom Verhalten der unteren Klappen in den Eiskondensator ab. Diese werden in CONTAIN als druckabhängige Klappen simuliert. Der sensitive Druckbereich für die Klappen erstreckt sich entsprechend des CONTAIN-Datensatzes über 60 Pa. Diese empfindliche Druckabhängigkeit führte in COCOSYS zu Instabilitäten. Daher wurde eine zusätzliche Dämpfung mit einer vorgebbaren Zeitkonstante in COCOSYS implementiert. Weiterhin berücksichtigt nun die Drucksteuerung neben der Druckdifferenz der Start- und Zielzone nun auch das Gewicht der Luftsäule. In der Anwendungsrechnung wird die Verbrennung von Wasserstoff berücksichtigt. In COCOSYS wird hierzu das aus ASTEC stammende COMB-Verbrennungsmodell benutzt. Dabei wird die Brandzeitdauer per Eingabe vorgegeben. Die Zündbedingungen werden aus den bereits vorhandenen Korrelationen aus dem DECOR Modell berechnet. Aufgrund der hier vorhandenen Modellunterschiede sind unterschiedliche Ergebnisse in COCOSYS und CONTAIN zu erwarten.

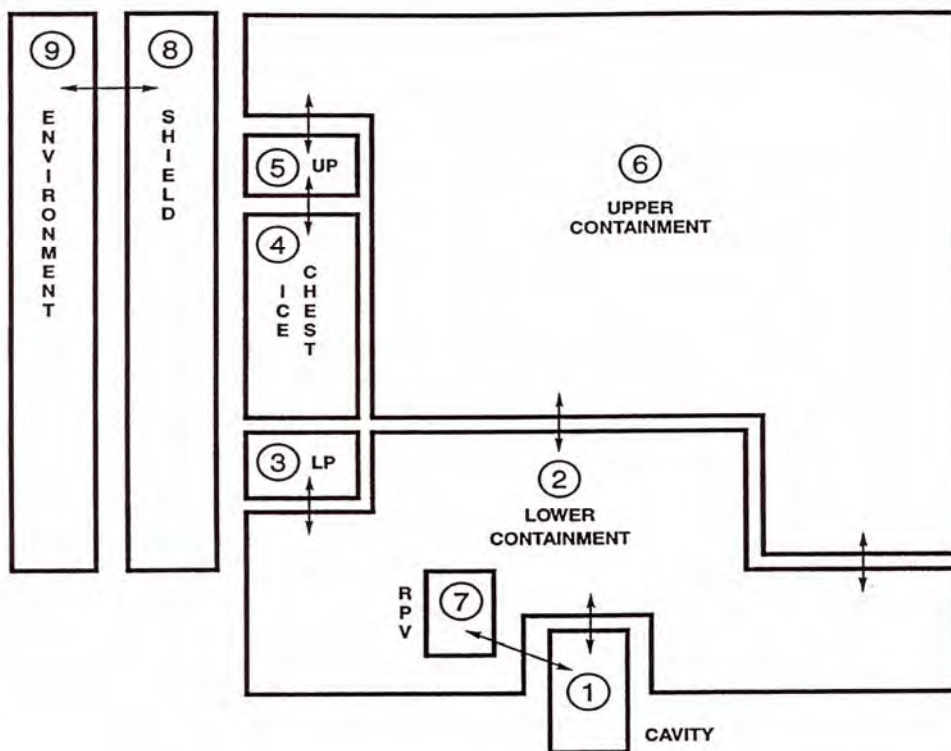


Abb. 5-61 Nodalisierungs-Schema des Sequoyah-Sicherheitsbehälters.

Im Folgenden werden die Ergebnisse bis zum RDB-Versagen (33000 s) verglichen. Die Ergebnisse von COCOSYS sind in blauen Kurven und die von CONTAIN in schwarzen Kurven dargestellt.

- **Druck im Containment**

Abb. 5-62 zeigt den Vergleich für den berechneten Druck im Containment. Der Verlauf beider Kurven ist qualitativ gleich. Etwas unterschiedliche Ergebnisse werden während einer H₂-Verbrennung berechnet. Dies ist aufgrund der unterschiedlichen Modelle auch nicht anders zu erwarten. Die vereinfachten Modelle dienen im Wesentlichen dazu, den Abbau von Wasserstoff zu berücksichtigen. Die daraus berechneten Druckspitzen sollten für eine Interpretation nicht verwendet werden. Ab ca. 20000 s berechnet COCOSYS einen um ca. 0,5 bar tendenziell höheren Druck.

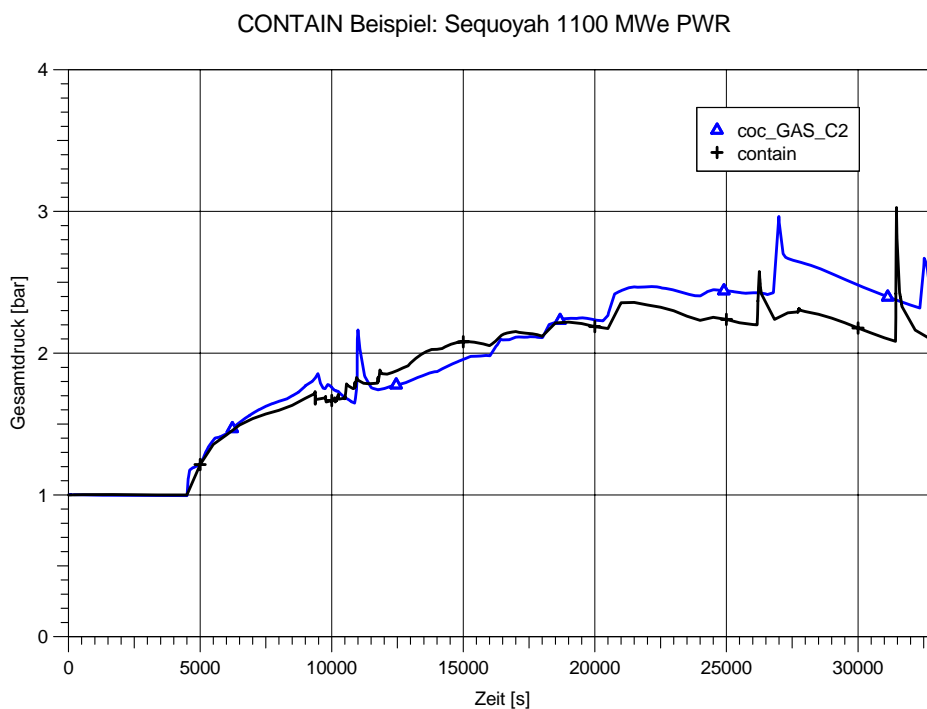


Abb. 5-62 Sequoyah: Druck im Containment.

- **Temperaturen**

Abb. 5-63 zeigt einen Vergleich für die berechneten Temperaturen im Freisetzungsbereich C2 (unteres Containment) und im Dombereich C6 (oberes Containment, Dom). Die Übereinstimmung dieser Temperaturen ist sehr gut. Entsprechend zum Druck sind die Temperaturen in COCOSYS etwas höher im Vergleich zu CONTAIN. Die Übereinstimmung der berechneten Temperaturen im Bereich des Eiskondensators (C4 & C5) ist ebenfalls sehr gut (Abb. 5-64). In der CONTAIN-Rechnung zeigen sich im Nahbereich des Eiskondensators ausgeprägte Temperaturspitzen aufgrund einer H₂-Verbrennung. Diese sind in COCOSYS nicht so ausgeprägt. Temperaturspitzen treten dagegen in der COCOSYS Rechnung in dem darüberliegenden Raumbereich C5 auf.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

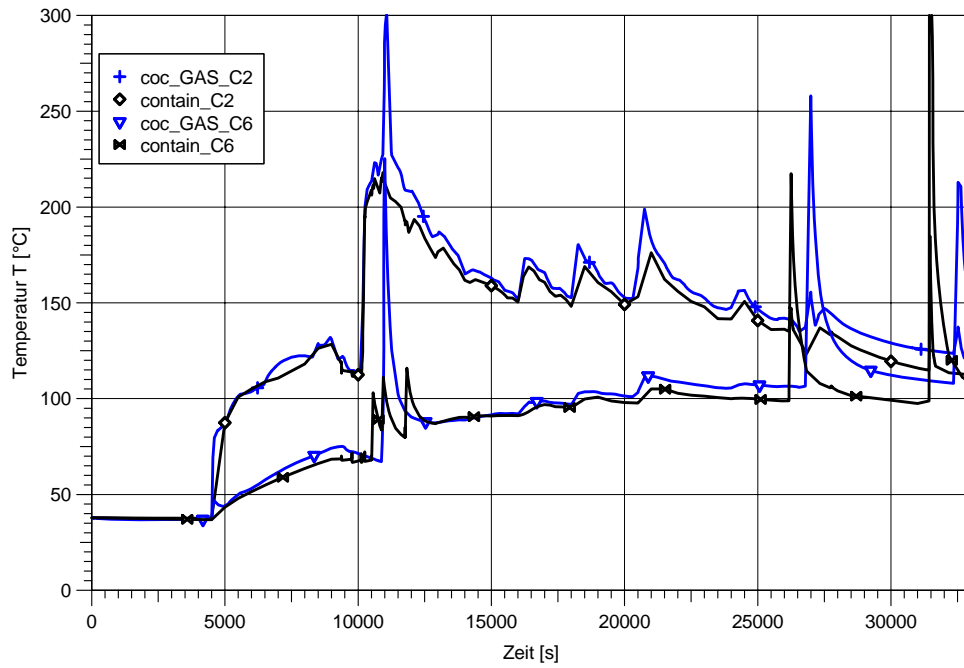


Abb. 5-63 Sequoyah: Berechnete Temperaturen im Containment (R2 & R6).

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

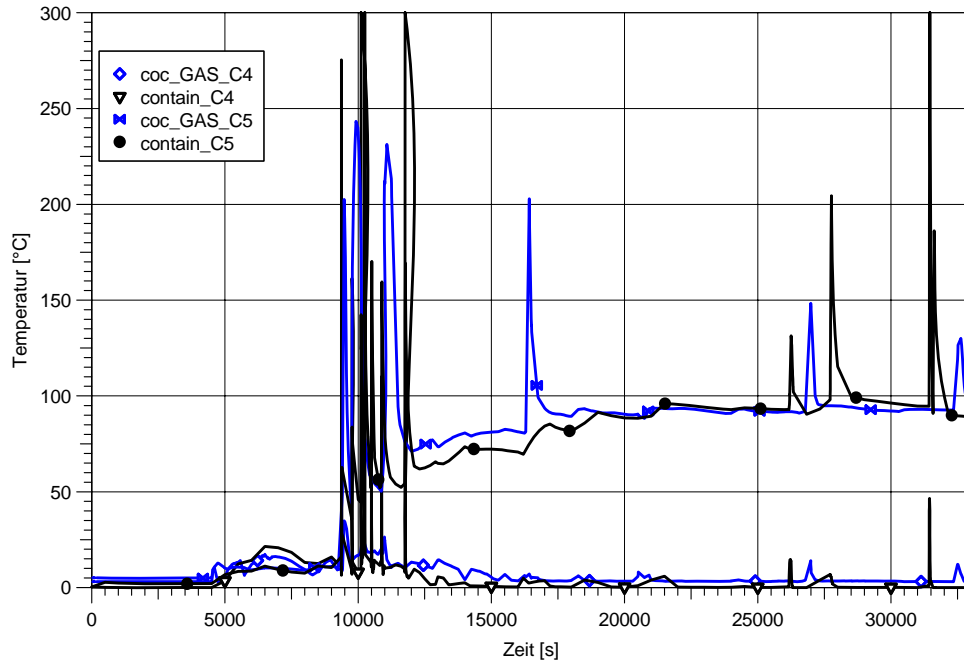


Abb. 5-64 Sequoyah: Berechnete Temperaturen im Eiskondensator.

- **Verhalten des Eiskondensators**

Der Eiskondensator spielt für den Druckaufbau eine wesentliche Rolle. Die Eingabeparameter für die Modelle in CONTAIN und COCOSYS sind nicht identisch. Daher wurden im COCOSYS Datensatz die Eingabegrößen, welche maßgeblich einen Einfluss auf den Wärmeübergang haben (z. B. die Strömungsgeschwindigkeit entlang der Eisoberfläche bestimmen), angepasst. Die Abb. 5-65 zeigt den resultierenden Vergleich zwischen CONTAIN und COCOSYS hinsichtlich der Eismasse.

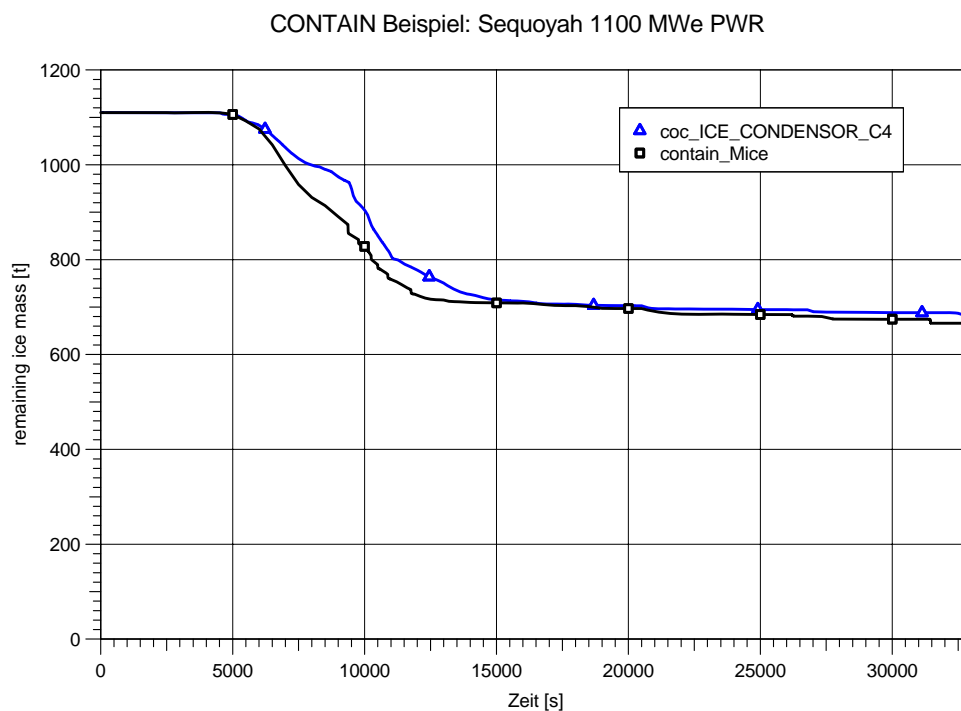


Abb. 5-65 Sequoyah: Vergleich der berechneten Eismasse

- **H₂-Konzentrationen**

Abb. 5-66 und Abb. 5-67 zeigen den Vergleich der berechneten Wasserstoffkonzentrationen im Containment und im Nahbereich des Eiskondensators. Der qualitative Verlauf beider Rechenergebnisse stimmt gut überein. Größere Unterschiede treten im Nahbereich des Eiskondensators auf. Hier wird in CONTAIN die Wasserstoffverbrennung berechnet, während diese in COCOSYS im Bereich darüber (Zone C5) angenommen wird. Ebenso sind die berechneten Endkonzentrationen in COCOSYS im Vergleich zu CONTAIN niedriger. Aufgrund der unterschiedlichen

Modellierung der Wasserstoffverbrennung sind solche Unterschiede aber nicht verwunderlich.

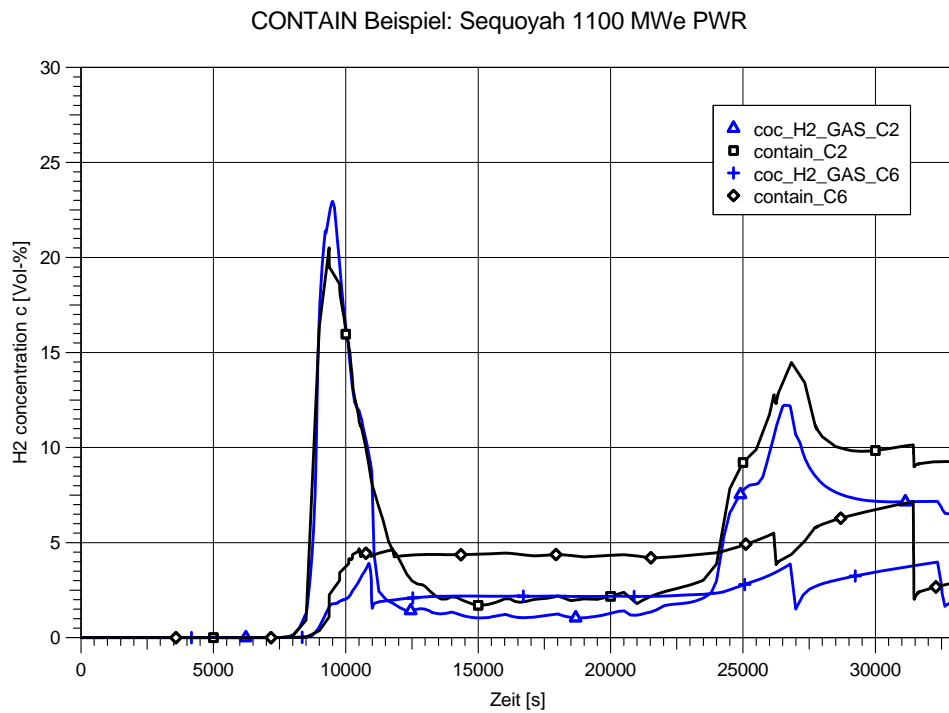


Abb. 5-66 Sequoyah: Wasserstoffkonzentrationen im Containment.

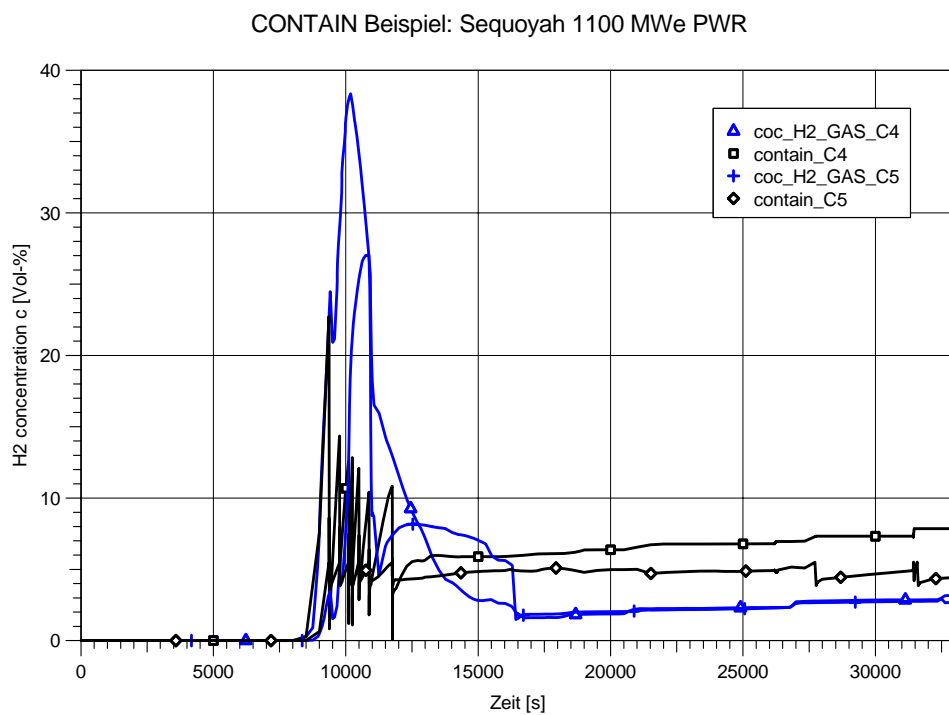


Abb. 5-67 Sequoyah: Wasserstoffkonzentrationen im Bereich des Eiskondensators.

- **Massenströme und Öffnungsquerschnitte**

Neben dem Eiskondensator haben die unteren und oberen Klappen, welchen den Massenstrom entlang des Eiskondensators bestimmen, einen wesentlichen Einfluss auf den Druckaufbau im Containment. Insbesondere die unteren Klappen reagieren sehr empfindlich auf die anstehende Druckdifferenz. So wird in CONTAIN schon ab einer Druckdifferenz von ca. 50 Pa eine vollständige Öffnung der Klappe angenommen. In COCOSYS ist eine druckdifferenzgesteuerte Vorgabe des Öffnungsquerschnitts möglich. Durch die sehr empfindliche Charakteristik waren aber die Berücksichtigung der kalten Luftsäule im Eiskondensator und eine Dämpfung der Dynamik notwendig. Das COCOSYS Programm wurde daher entsprechend ergänzt.

Abb. 5-68 und Abb. 5-69 zeigen den Vergleich der berechneten Massenströme und des Öffnungsquerschnitts. Die Ergebnisse stimmen qualitativ gut überein. Größere Abweichungen ergeben sich durch die Wasserstoffverbrennungen im Eiskondensator.

Abb. 5-70 und Abb. 5-71 zeigen den Vergleich für die oberen Klappen. Ab einer bestimmten Druckdifferenz fällt die Klappe V9 um und bleibt daher offen. Dies konnte in COCOSYS nicht direkt vorgegeben werden. Daher wurde das Öffnungsverhalten dieser Klappe zeitlich direkt vorgegeben.

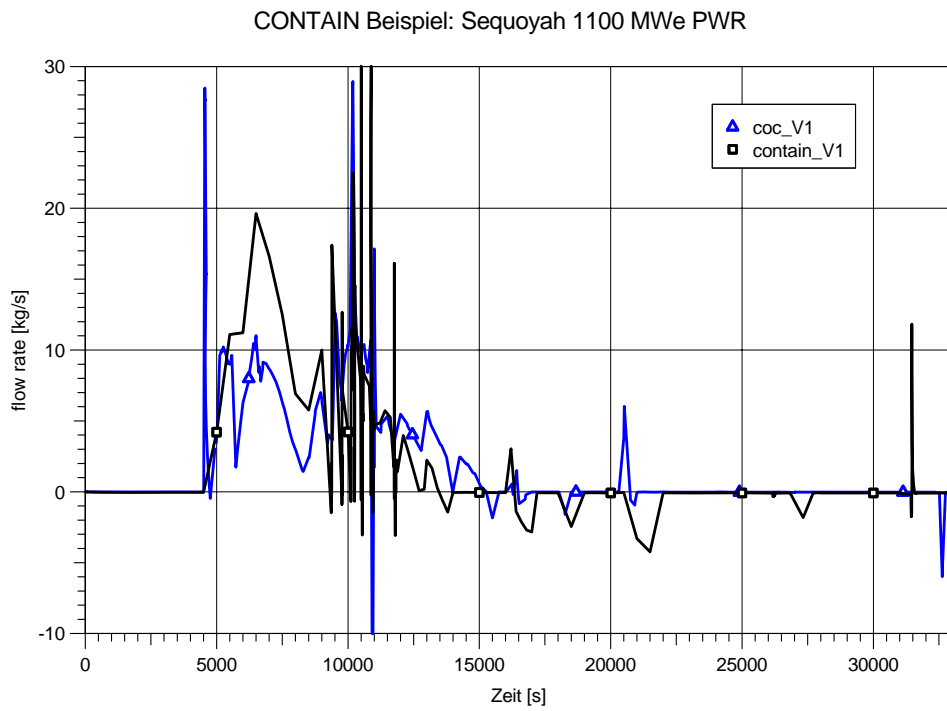


Abb. 5-68 Sequoyah: Massenstrom in den Eiskondensatorbereich.

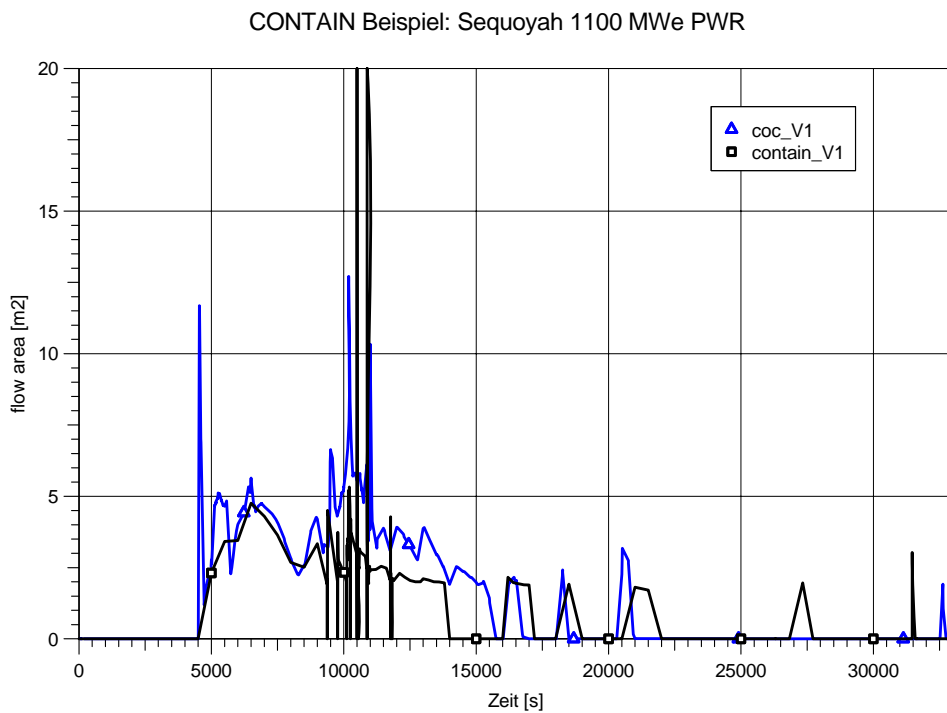


Abb. 5-69 Sequoyah: Querschnittsfläche der unteren Klappen.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

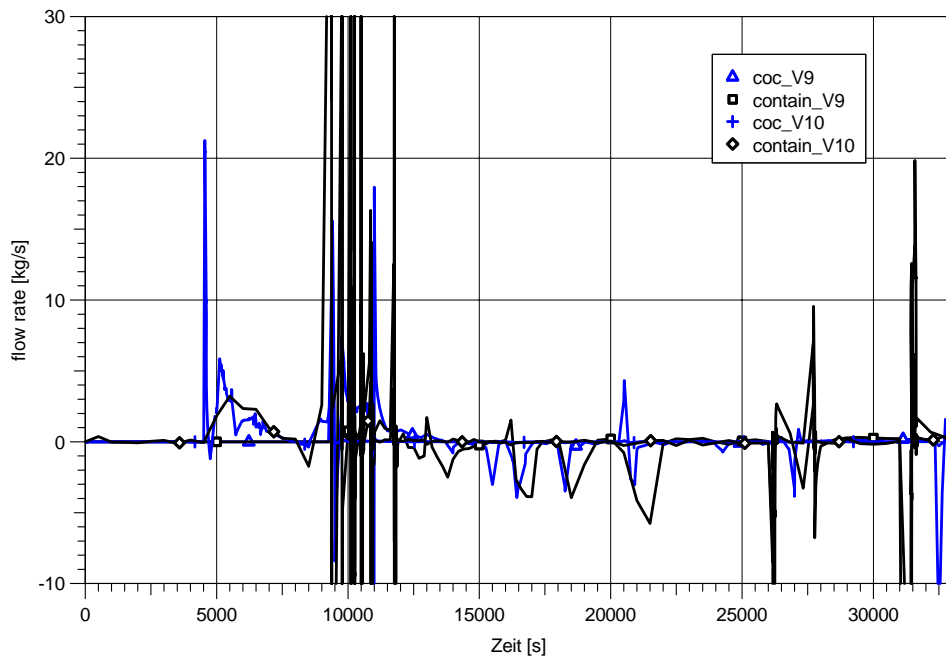


Abb. 5-70 Sequoyah: Massenstrom aus dem Eiskondensator.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

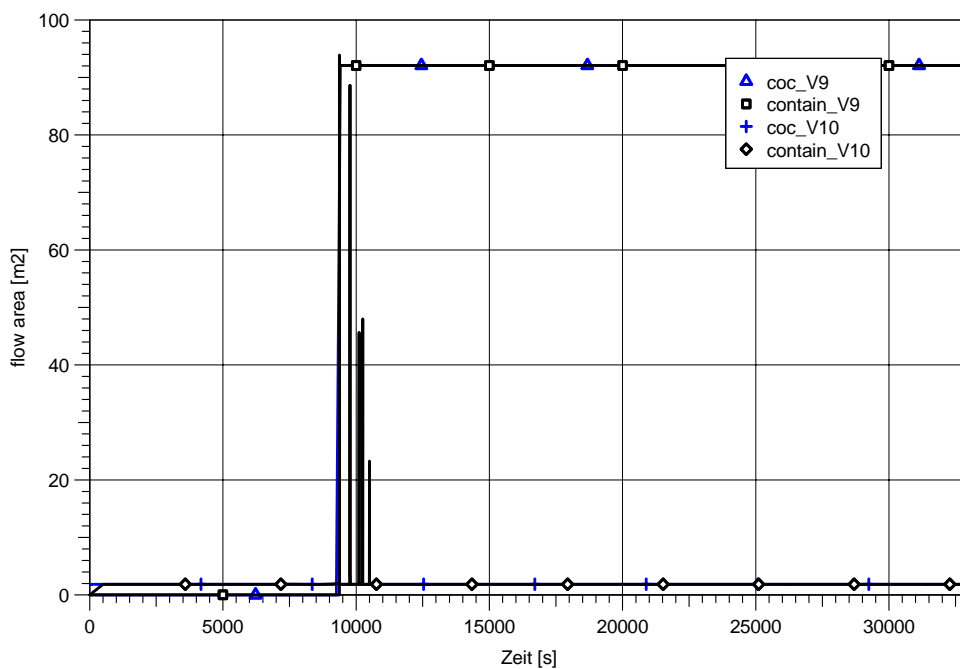


Abb. 5-71 Sequoyah: Querschnitt der oberen Klappen.

Im Folgenden werden die Rechenergebnisse während der DCH-Phase verglichen. In dem vorliegenden CONTAIN-Datensatz wurde die Freisetzung der Schmelze aus dem RDB nicht simuliert. Vielmehr wurde der Schmelzeintrag per Tabelle vorgegeben. Aus

diesem Grund wurde in COCOSYS diese Möglichkeit geschaffen, die Schmelzefreisetzung direkt per Eingabe vorzugeben. Die Schmelztemperatur wurde in beiden Datensätzen mit 2500 °C festgelegt. Weiterhin wurde in dem CONTAIN-Datensatz die Entrainment-Rate ebenfalls per Tabelle vorgegeben. Auch diese Option wurde in COCOSYS ergänzt. Da es wenig Sinn macht, die Entrainment-Rate komponentenspezifisch vorzugeben, da diese von der aktuell vorhandenen Schmelzезusammensetzung auf dem Boden der Cavity abhängt, kann in COCOSYS nur der Gesamtmassenstrom als Entrainment-Rate vorgegeben werden. Der ursprüngliche CONTAIN-Datensatz wurde dahingehend modifiziert, dass nun das GFT-Modell als Trapping-Modell verwendet wird. Auch wurden die verwendeten Fallhöhen im CONTAIN-Datensatz angepasst. In COCOSYS steht als einziges Referenzmodell zum Trapping das GFT-Modell in leicht modifizierter Form zur Verfügung. Die Gaszusammensetzung im RDB wurde in COCOSYS etwas modifiziert, da die in COCOSYS vorhandenen Stoffwerte für Dampf bei 1000 K und 80 bar keine konsistente Lösung geliefert hat.

- **Druck im RDB**

Abb. 5-72 zeigt den Vergleich des berechneten Drucks im RDB. Dieser wird durch die Ausströmung durch das Leck bestimmt. Hier unterscheiden sich die Strömungsmodelle in COCOSYS und CONTAIN etwas, so dass die berechneten Ergebnisse leicht unterschiedlich sind.

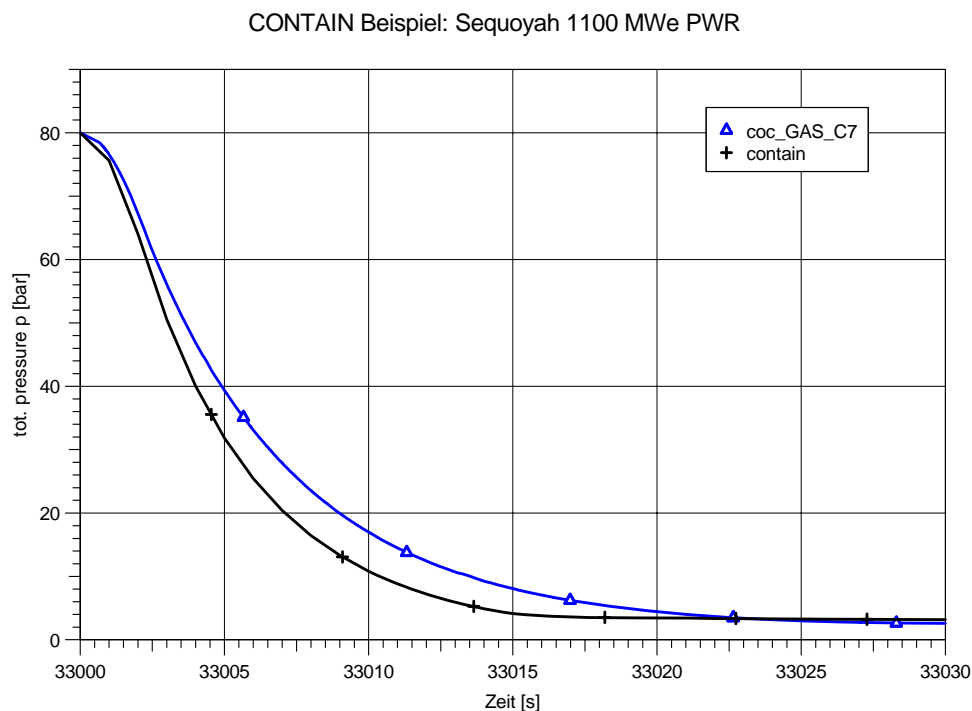


Abb. 5-72 Sequoyah: Druck im RDB.

- **Luftgetragene Schmelzepartikel**

Im Folgenden werden die Masse der luftgetragenen Schmelzepartikel in den einzelnen Zonen verglichen (Abb. 5-73 bis Abb. 5-76). Diese sind im Wesentlichen bestimmt durch die Entrainment-Rate in der Cavity, den Strömungsraten inklusive der Schmelzepartikel und der Ablagerung (Trapping). Die Freisetzung der Schmelze sowie die Entrainment-Rate werden per Tabelle vorgegeben. Ebenso wurde weitestgehend die Ablagerung aufeinander abgestimmt. Unterschiede in den luftgetragenen Massen sind daher hauptsächlich durch die Dynamik der Strömungsverbindungen sowie der Strömungsquerschnitte (Klappen) bestimmt. Aufgrund dessen ergaben sich zum Teil erhebliche Unterschiede in den luftgetragenen Massen. Größere Unterschiede zeigten sich für die Cavity (C1) und für den Eiskondensator (C4). In den anderen Räumen stimmen die Ergebnisse auch quantitativ gut überein.

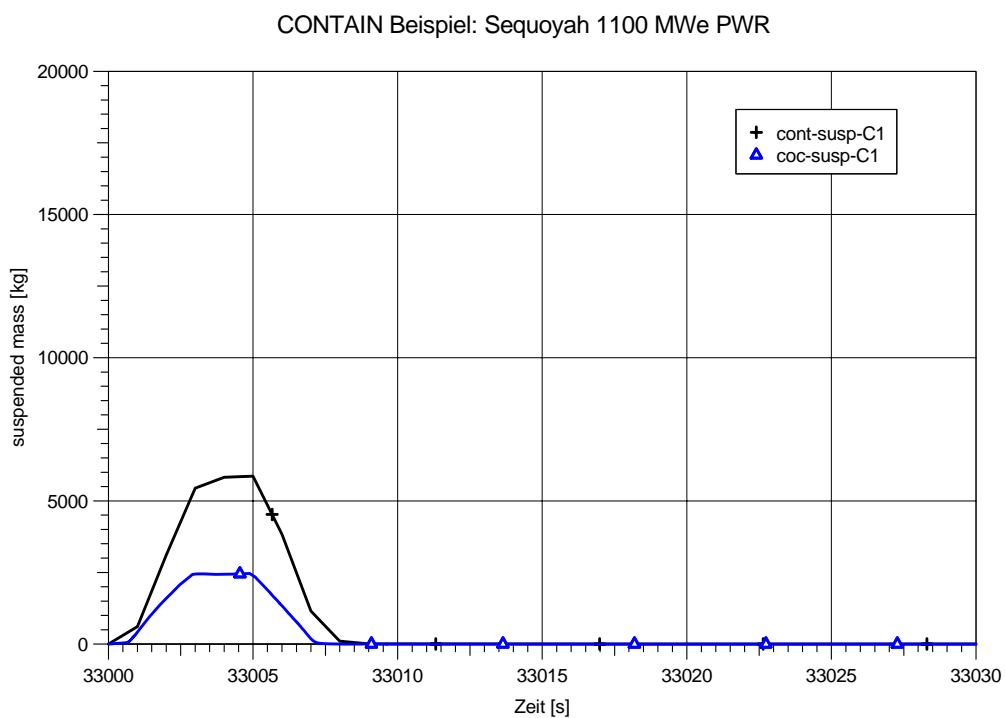


Abb. 5-73 **Sequoyah: Masse der luftgetragenen Partikel in der Cavity.**

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

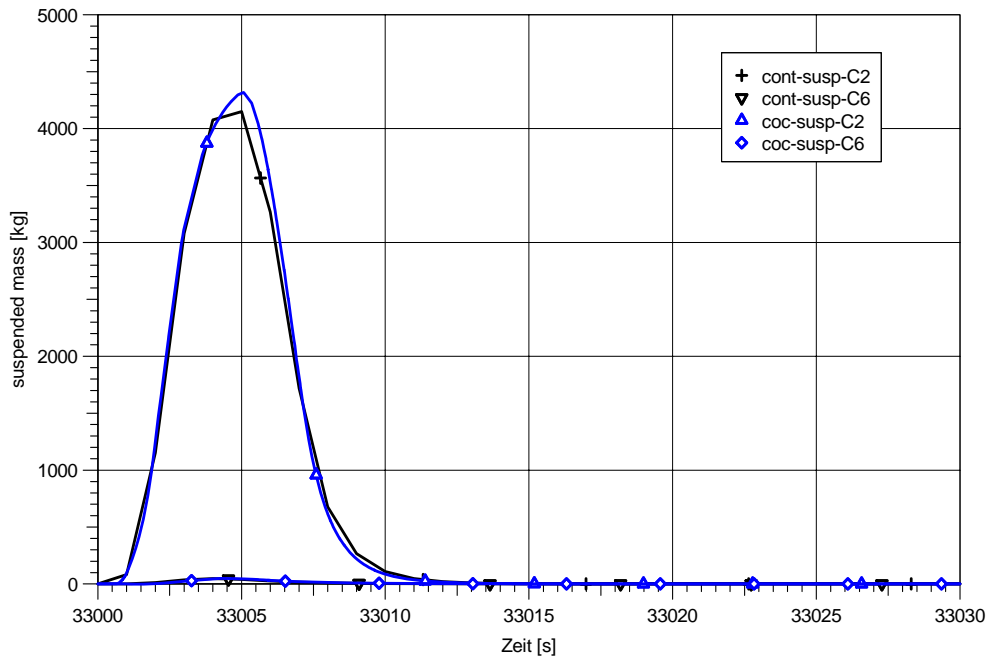


Abb. 5-74 Sequoyah: Masse der luftgetragenen Partikel in C2 und C6.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

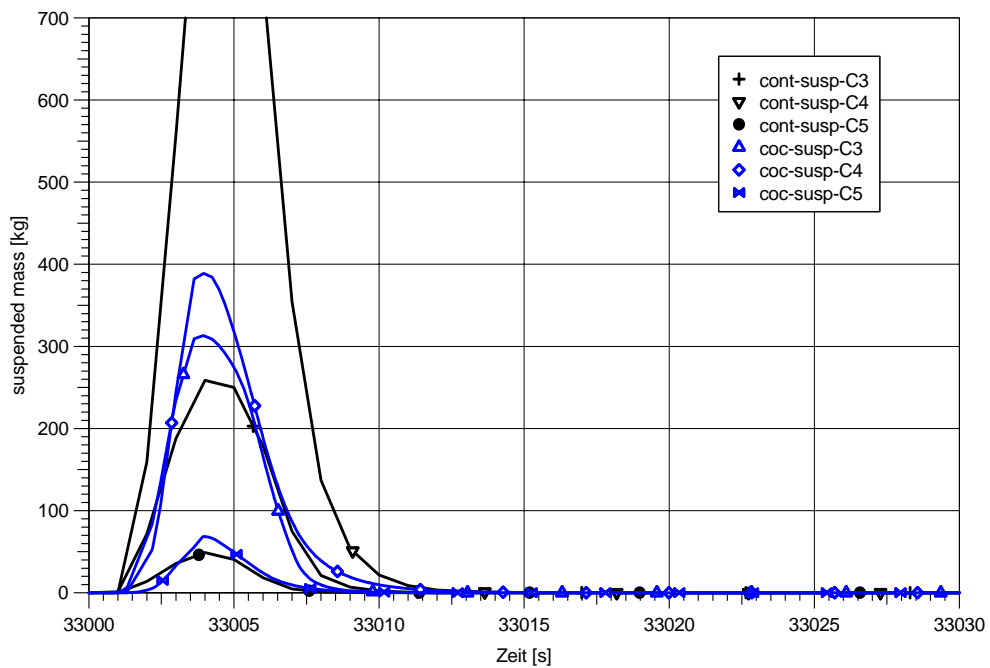


Abb. 5-75 Sequoyah: Masse der luftgetragenen Partikel im Bereich des Eiskondensators.

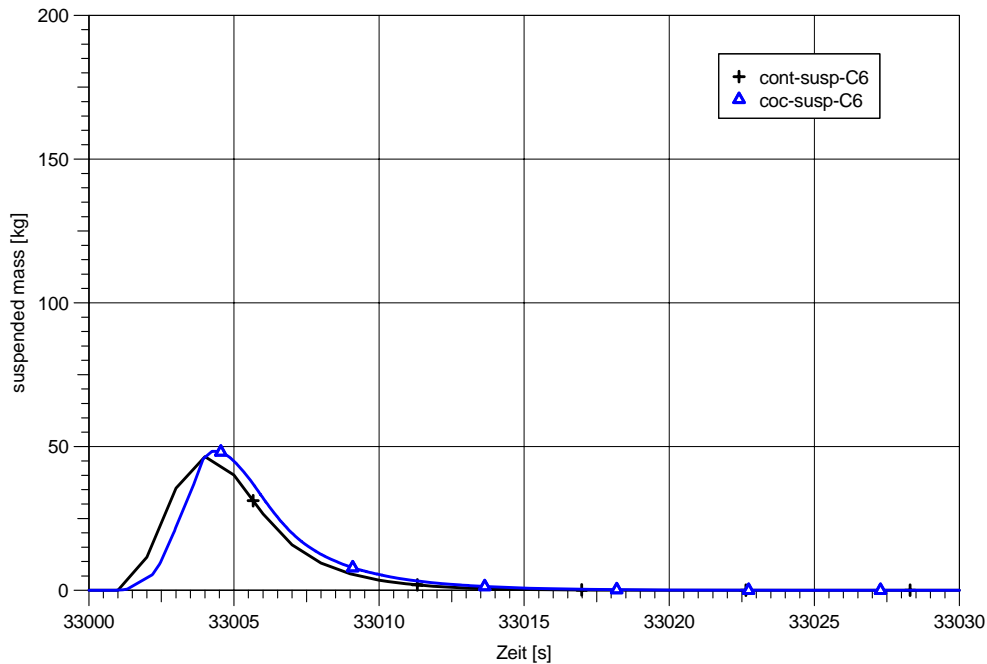


Abb. 5-76 Sequoyah: Masse der luftgetragenen Partikel im Dom C6

- **Abgelagerte Schmelzpartikel**

Abb. 5-77 bis Abb. 5-80 zeigen den Vergleich für die abgelagerten Schmelzmassen. Ähnlich wie bei den luftgetragenen Massen treten auch hier für einzelne Zonen Unterschiede auf. Größere Abweichungen gibt es hier für das untere Containment (C2) und für den Eiskondensator (C4). Ansonsten ist die Übereinstimmung relativ gut.

Abb. 5-81 zeigt den Vergleich bezüglich der gesamten abgelagerten Schmelzmasse. Insgesamt wurden ca. 87600 kg Schmelze freigesetzt. Durch die Reaktion mit Sauerstoff und Wasserdampf steigt integral diese Masse an. Dieser Anstieg ist in COCOSYS relativ klein und erreicht einen Endwert von ca. 88300 kg. Dagegen beträgt dieser in der CONTAIN-Rechnung ca. 91900 kg. Nimmt man eine vollständige Reaktion aller eingespeisten Metalle mit Sauerstoff an, ergibt sich ein maximaler Massenzuwachs von 2138.6 kg. In CONTAIN beträgt dieser aber 4300 kg, was auf einen Massenbilanzfehler hindeutet. Möglicherweise wird auch die Produktion von Wasserstoff dadurch überschätzt.

Die verbleibende Zusammensetzung der Schmelze in der Cavity ist in der COCOSYS und der CONTAIN Rechnung sehr unterschiedlich, obwohl die Gesamtmasse vergleichbar ist (Tab. 5-5). In CONTAIN wurden die abgelagerten Me-

talle fast vollständig oxydiert. Dagegen verbleiben in der COCOSYS Rechnung noch nicht oxydierte Metallkomponenten. Hier ist zu betonen, dass die Modellierung der abgelagerten Schmelze in CONTAIN und COCOSYS unterschiedlich ist. In CONTAIN liegt auch in der Cavity die abgelagerte Schmelze in Partikelform vor. Dagegen wird in COCOSYS diese Schmelze als Film betrachtet. Damit ist die Reaktionsoberfläche unterschiedlich und ebenso die Berechnung der Wärme- und Stoffübergangskoeffizienten, welche für die Berechnung der chemischen Reaktion verwendet werden. Der zeitliche Verlauf der Einspeisung und des Entrainments (beides als Tabelle vorgegeben) ist für alle Komponenten gleich. Damit sollte auch das relative Verhältnis der Einspeisung und Ablagerung für Komponenten, welche nicht reagieren, gleich sein. In der CONTAIN-Rechnung reagieren die Komponenten UO_2 und Ni nicht. Dennoch ist das Verhältnis zwischen Einspeisung und Ablagerung unterschiedlich. In der COCOSYS-Rechnung reagieren die Komponenten UO_2 , Ni und Cr nicht (Cr deshalb, weil Cr_2O_3 nicht als Komponente definiert wurde). Hier sind die Relationen praktisch gleich. Dies deutet also auf numerische Ungenauigkeiten in CONTAIN hin.

Tab. 5-4 Sequoyah: Maximal möglicher Massenzuwachs bei vollständiger Reaktion mit Sauerstoff.

Reaktion	Eingespeiste Masse Metall [kg]	Eingespeiste Stoffmenge [kmol]	Max. Massenzuwachs durch Reaktion [kg]
$\text{Zr} \rightarrow \text{ZrO}_2$	2290	25,10	803,2
$\text{Fe} \rightarrow \text{FeO}$	3264	58,49	935,8
$\text{Cr} \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3$	866	16,65	399,6
Summe			2138,6

Tab. 5-5

Sequoyah: Zusammensetzung der abgelagerten Schmelze in der Cavity bei 30030 s.

Komponente	Einspeisung [kg]	CONTAIN		COCOSYS	
		Abgelagert [kg]	Relation [%]	Abgelagert [kg]	Relation [%]
UO ₂	72000	50931	70,7	50800	70,5
Zr	2290	0	0,0	1317	57,5
ZrO ₂	8810	8699	98,7	6618	75,1
Fe	3264	34	1,0	1878	57,5
FeO		4003	-	546	-
Cr	866	0	0,0	611	70,5
Cr ₂ O ₃		1221	-	0	0,0
Ni	399	373	93,4	281	70,4

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

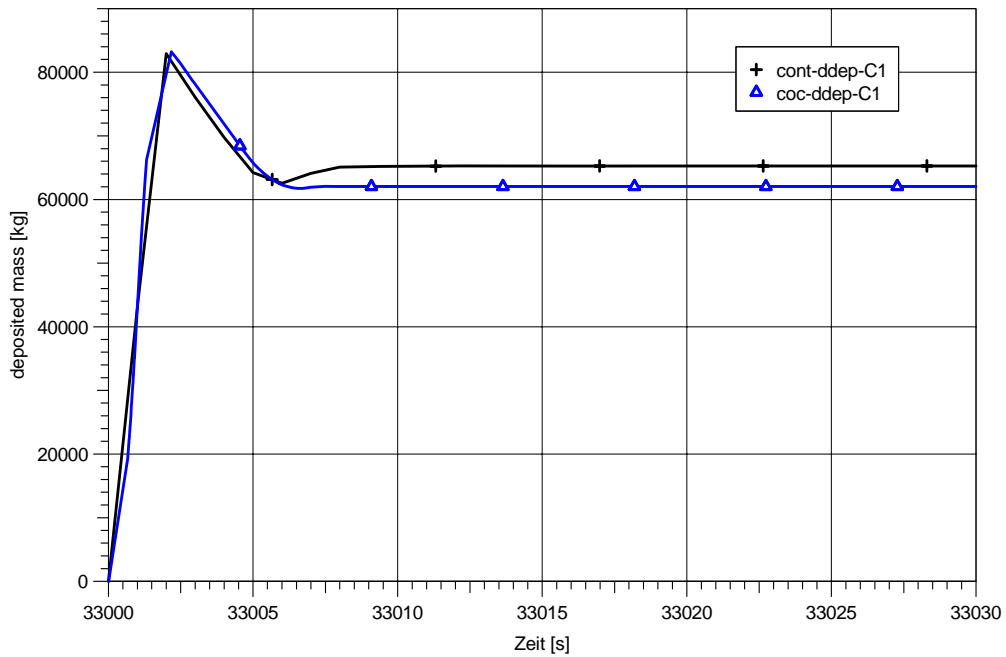


Abb. 5-77

Sequoyah: Abgelagerte Schmelze in der Cavity.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

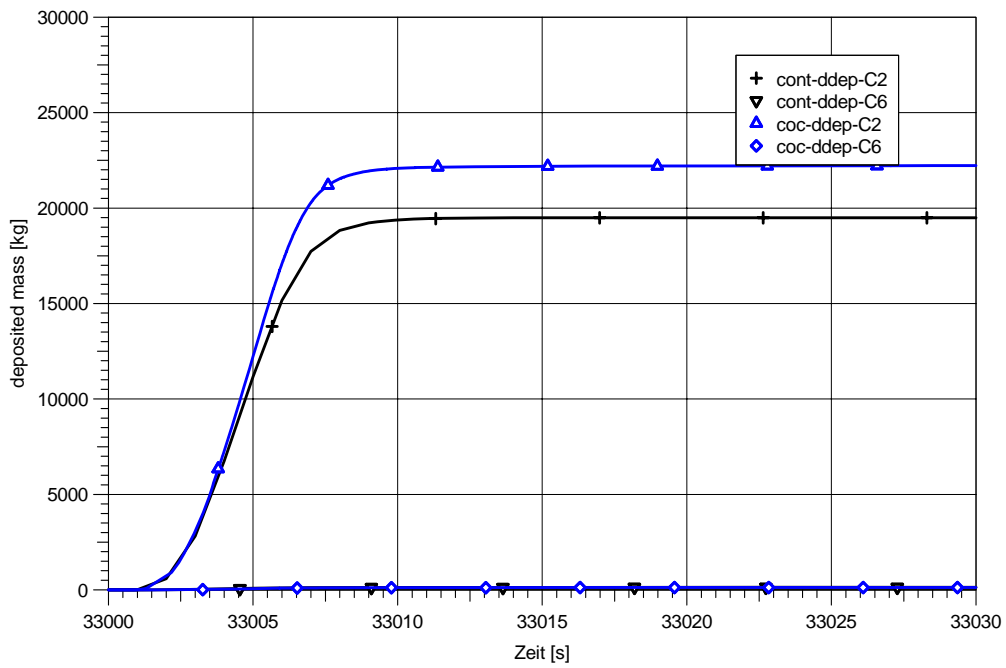


Abb. 5-78 Sequoyah: Abgelagerte Schmelze im Containment (C2 & C6).

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

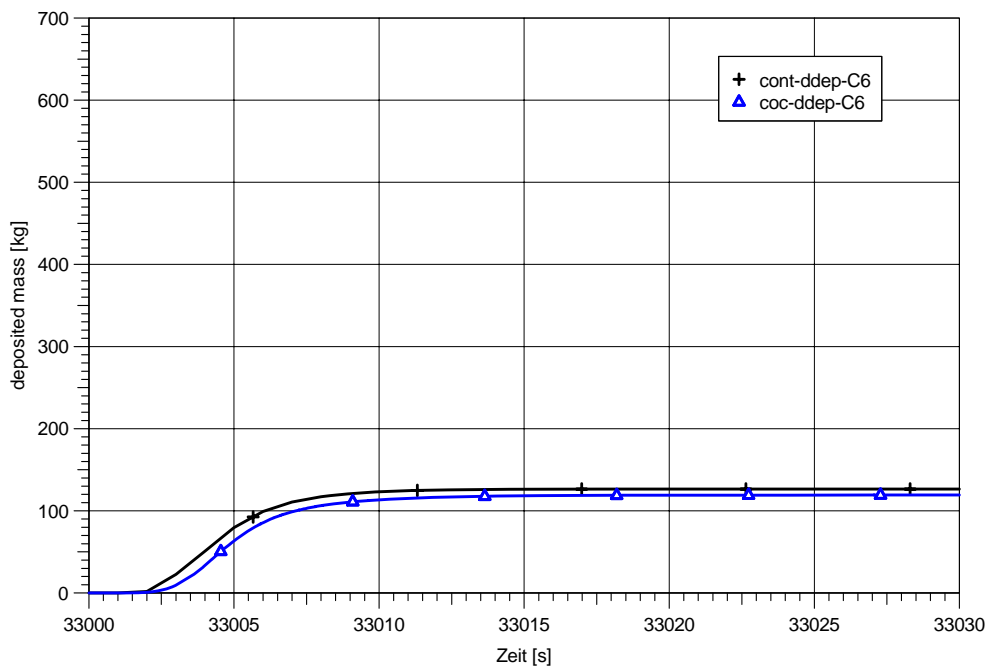


Abb. 5-79 Sequoyah: Abgelagerte Schmelze im Dom (C6).

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

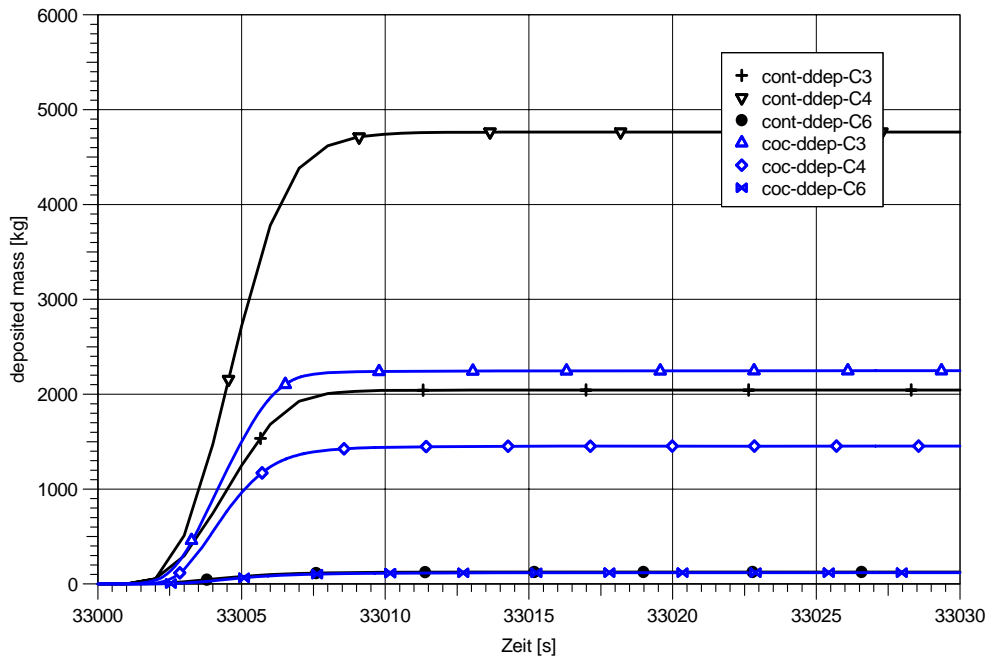


Abb. 5-80 Abgelagerte Schmelze im Bereich des Eiskondensators.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

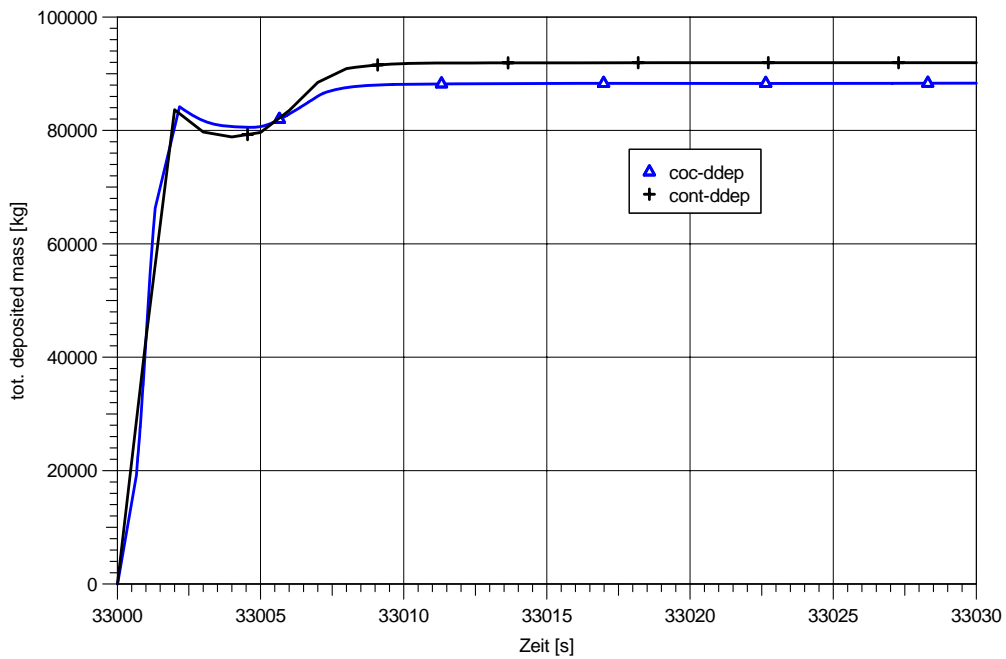


Abb. 5-81 Sequoyah: Gesamte Masse der abgelagerten Schmelze.

- **Rückwirkungen auf die Thermohydraulik**

Die schlagartige Verteilung von heißen Schmelzpartikeln ist mit entsprechenden Rückwirkungen auf die thermohydraulischen Zustände verbunden. Diese sind verursacht durch die Ausströmung von Dampf aus dem Reaktordruckbehälter, der schnellen Wärmeabgabe der Schmelzpartikel, der Freisetzung von Wärme und Wasserstoff durch die Oxidation der Metalle in der Schmelze. Im Folgenden werden die Ergebnisse zwischen CONTAIN und COCOSYS hinsichtlich der Thermohydraulik verglichen.

Der berechnete Druckaufbau in COCOSYS ist deutlich niedriger (Abb. 5-82). In CONTAIN wird eine Druckerhöhung von ca. 2 bar berechnet. In COCOSYS beträgt dieser lediglich ca. 0.6 bar. Auch für die berechneten Temperaturen ergeben sich zum Teil erhebliche Unterschiede. Die Temperaturerhöhung im unteren Containment (C2) wird in beiden Programmen ähnlich berechnet. Dagegen wird in COCOSYS für den Dom praktisch keine Temperaturerhöhung berechnet. In CONTAIN beträgt diese dagegen ca. 200 K.

Im Folgenden werden die Ergebnisse bei ca. 30005 s für die Zone C6 genauer betrachtet. Die berechneten luftgetragenen und abgelagerten Massen sind sehr ähnlich. In beiden Rechnungen werden 5 Größenklassen betrachtet. Die Temperaturverteilung wird von beiden Programmen sehr ähnlich berechnet (Tab. 5-6). In CONTAIN wird im Gegensatz zu COCOSYS nur eine vorgegebene Größe für die abgelagerten Partikel angenommen und daher nur eine Temperatur berechnet. Die Massenverteilung ist bedingt durch die vorgegebene Gleichverteilung auf die 5 Größenklassen auch für die abgelagerten Partikel in C6 relativ gleichverteilt. Daraus ergibt sich eine mittlere Temperatur von 905 K. In COCOSYS geben die abgelagerten Partikel die Wärme auch an die Strukturen ab. Die berechneten Massenverteilungen der einzelnen chemischen Komponenten in C6 sind bei beiden Programmen relativ gleich. So sind in beiden Rechnungen in C6 praktisch keine Metalle vorhanden.

Der erhebliche Temperaturunterschied in C5 (Abb. 5-84) ist vermutlich durch eine Wasserstoffverbrennung in CONTAIN verursacht, da im gleichen Zeitraum die Wasserstoffkonzentration in der CONTAIN-Rechnung abfällt (Abb. 5-86).

Die Wasserstoffkonzentration im Raum C2 und C4 sind in der COCOSYS-Rechnung deutlich niedriger (Abb. 5-85 und Abb. 5-86). Dies wohl auf die deutlich höhere chemische Umsetzung in der CONTAIN-Rechnung zurückzuführen.

Einfluss auf die Schmelzeverteilung ist natürlich auch bedingt durch die Dynamik der Strömungsverbindungen. Der Strömungspfad ist von der Cavity C1 über das

untere Containment C2 in den Bereich des Eiskondensators (C3, C4 und C5). Auch hier spielt die Dynamik der unteren Klappen eine entscheidende Rolle. Abb. 5-87 und Abb. 5-88 zeigen den Vergleich für den Massenstrom (inklusive des Schmelzetransports) und des Öffnungsquerschnitts. Durch die eingebaute Dämpfung der Druckabhängigkeit, reagiert die Klappe in COCOSYS deutlich langsamer. Dies und die niedrigere luftgetragene Masse in der Cavity führt in der COCOSYS Rechnung zu dem niedrigeren Massenstrom.

Tab. 5-6 Sequoyah: Temperaturverteilung der Schmelze in C6 bei ca. 30005 s

Größe	Temperatur (luftgetragen) [K]		Temperatur (abgelagert) [K]	
	COCOSYS	CONTAIN	COCOSYS	CONTAIN
1	424	576	419	1090
2	477	615	446	
3	770	712	718	
4	1265	1077	1228	
5	1728	1815	1714	

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

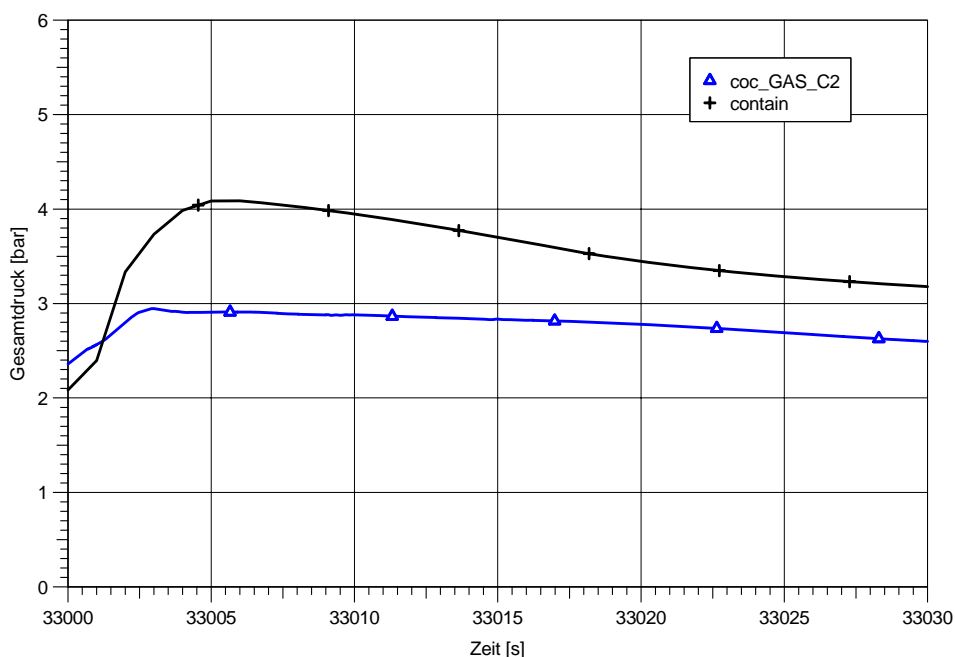


Abb. 5-82 Sequoyah: Druck im Containment.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

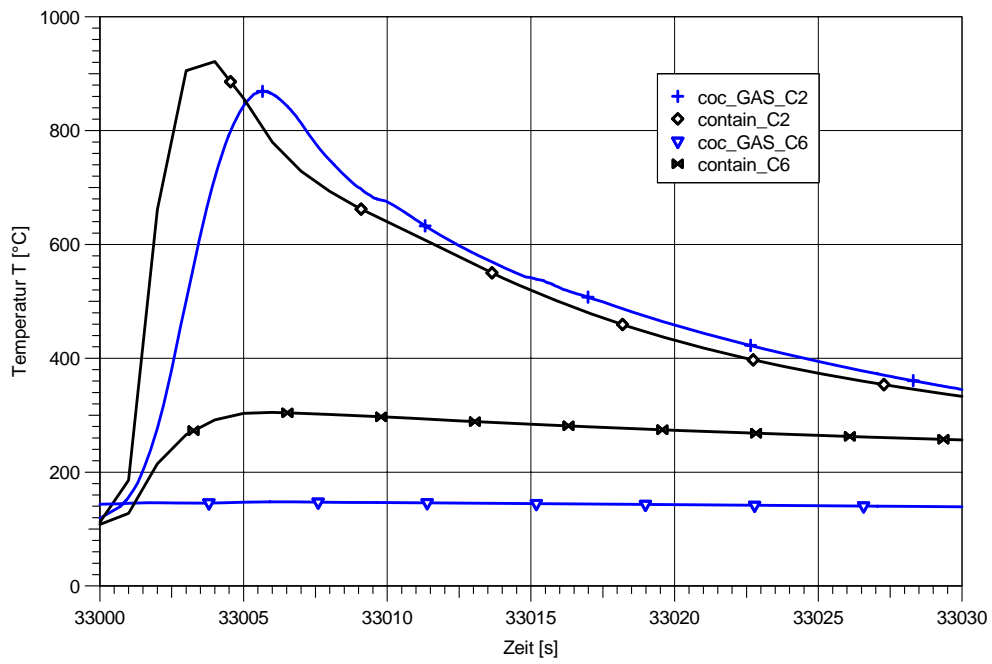


Abb. 5-83 Sequoyah: Temperaturen im Containment.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

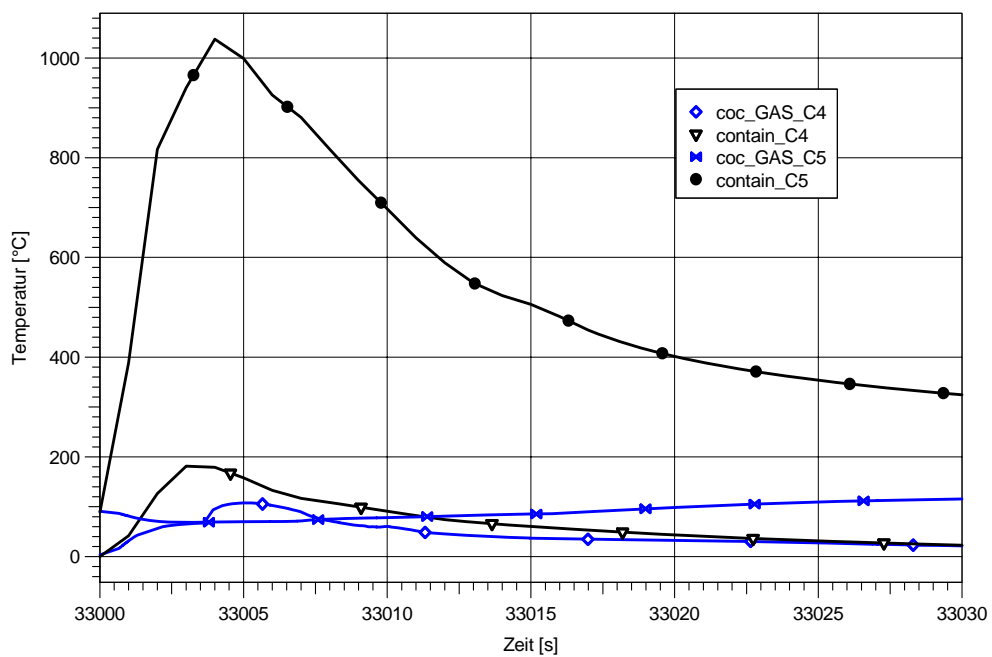


Abb. 5-84 Sequoyah: Temperaturen im Bereich des Eiskondensators.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

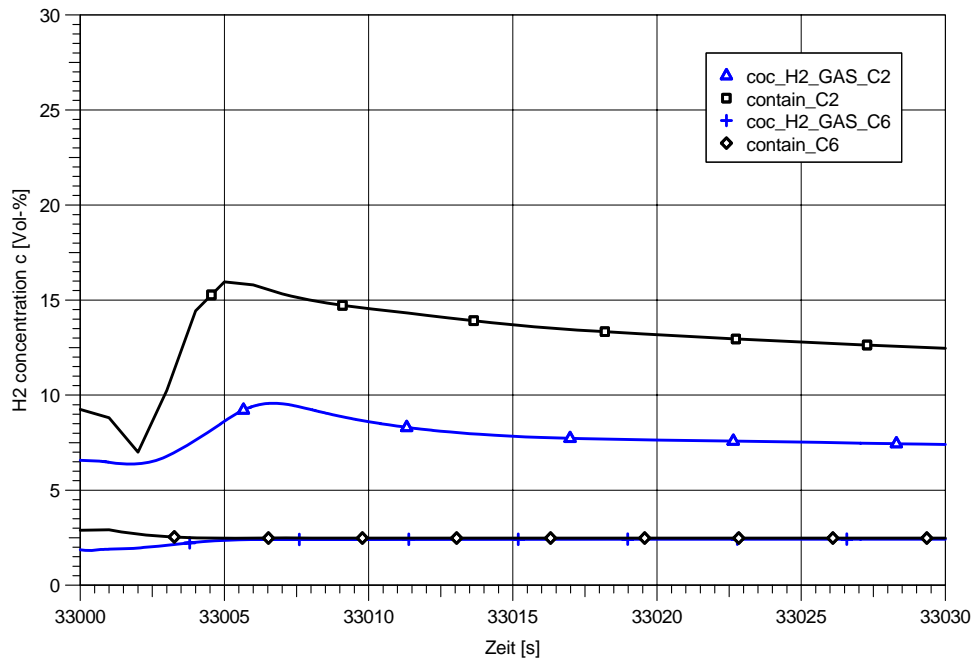


Abb. 5-85 Sequoyah: Wasserstoffkonzentration im Containment.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

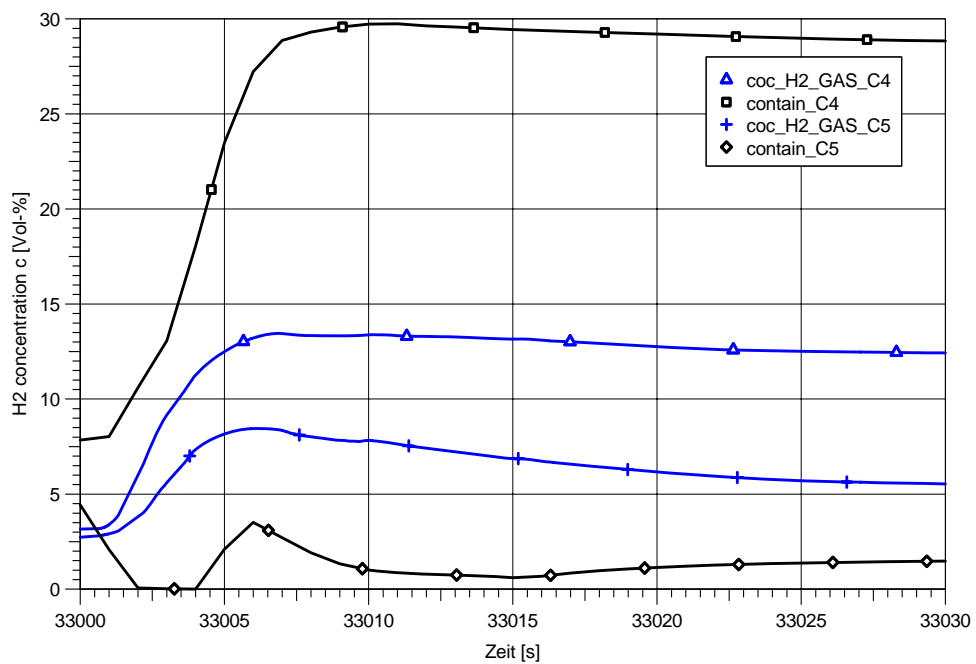


Abb. 5-86 Sequoyah: Wasserstoffkonzentration im Bereich des Eiskondensators.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

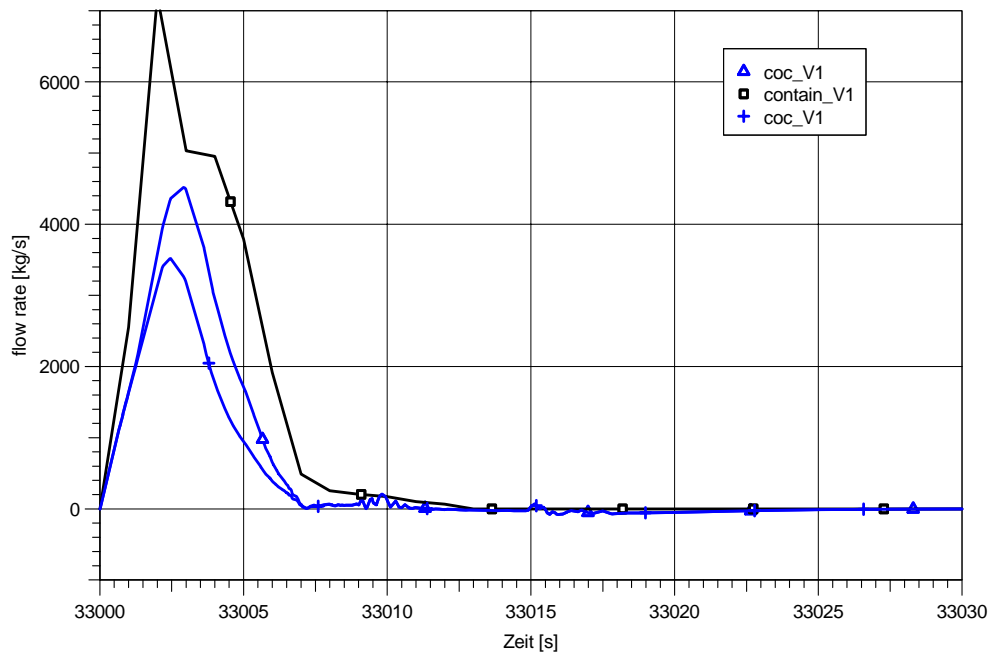


Abb. 5-87 Sequoyah: Massenstrom durch die untere Klappe.

CONTAIN Beispiel: Sequoyah 1100 MWe PWR

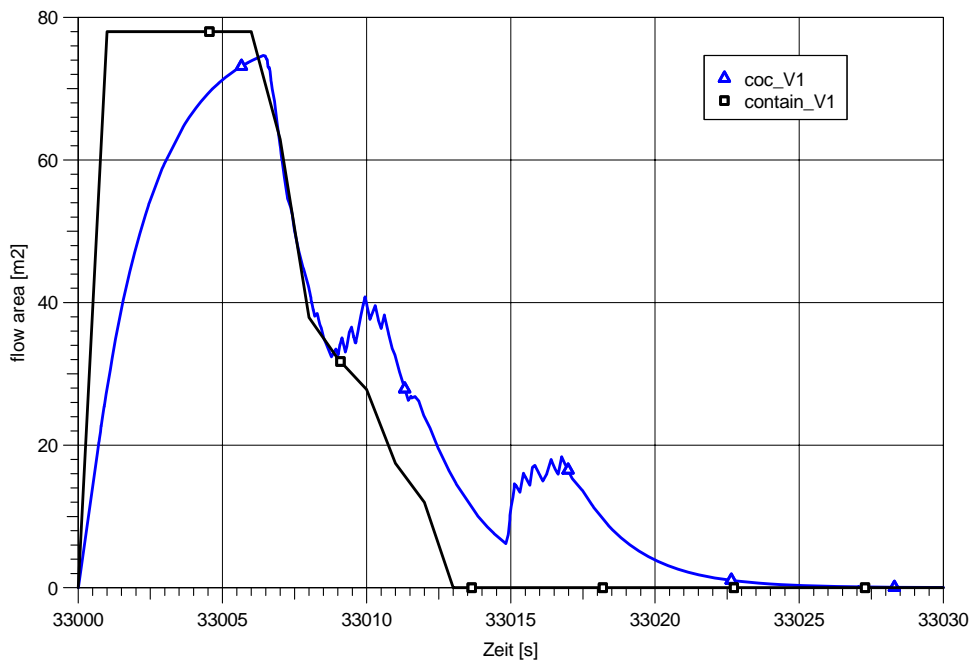


Abb. 5-88 Sequoyah: Öffnungsquerschnitt der unteren Klappe.

Zusammenfassung: Um die Anwendbarkeit des DCH-Moduls in COCOSYS und um einen Vergleich mit dem entsprechenden Modul in CONTAIN durchzuführen wurde ein Anwendungsbeispiel für die Sequoyah-Anlage aus dem CONTAIN User Manual mit COCOSYS nachgerechnet. Aufgrund von Modellunterschieden in beiden Programmen mussten einzelne Eingabedaten (z. B. für den Eiskondensator) angepasst werden. Ebenso wurden einzelne Modelloptionen in COCOSYS ergänzt. Diese betrafen die Klappen und Modelloptionen für den Schmelzeeintrag aus dem RDB und das Entrainment. Berücksichtigt man die teilweise unterschiedlichen Modelle (z. B. Wasserstoffverbrennung) konnten die Ergebnisse aus CONTAIN mit COCOSYS qualitativ und quantitativ gut nachgerechnet werden.

In der Anwendungsrechnung wurde die Schmelzefreisetzung und das Entrainment per Eingabe vorgegeben. Damit können keine Aussagen zu den Modellen zur Schmelzefreisetzung und Entrainment getroffen werden. Auch die Aufteilung in den 5 betrachteten Größenklassen wurde per Eingabe gleichverteilt vorgegeben. Der Vergleich zwischen COCOSYS und CONTAIN ergab zum Teil größere Unterschiede für einzelne Zonen. Größere Unterschiede ergaben sich auch für die Schmelzezusammensetzung in der Cavity. Die chemische Umsetzung ist in CONTAIN deutlich höher. Hier ist zu beachten, dass in CONTAIN die abgelagerte Schmelze partikelförmig angenommen wird, während diese in COCOSYS als Film angenommen wird. Hieraus ergeben sich Unterschiede für die Reaktionsoberfläche und die Stoffübergangskoeffizienten. In CONTAIN ist die Reaktion der Metalle fast vollständig. Ebenso wurde festgestellt, dass die Massenbilanz der Schmelze in CONTAIN nicht stimmig ist. Diese Unterschiede können den höheren Druckaufbau und die höheren Wasserstoffkonzentrationen in CONTAIN erklären. Die Ablauffähigkeit des DCH-Moduls in COCOSYS konnte mit dieser Rechnung demonstriert werden.

5.4 Zusammenfassung der Basisabsicherung/Bewertung von COCOSYS-DCH

Aufgrund der durchgeführten Basisabsicherung von COCOSYS-DCH kann die Bewertung der vorliegenden Version durch folgende Aussagen zusammengefasst werden:

- Es wurden 6 Experimente in zwei verschiedenen Versuchsständen (DISCO, Surtsey) detailliert nachgerechnet. Die behandelten Experimente sind für zwei unterschiedliche Anlagentypen ausgelegt (EPR, französischer P'4-Reaktor) und teilweise mit Dampf (H02, H03, Sup-1, Sup-2) und teilweise mit Stickstoff als trei-

bendem Gas (H04, DISCO-L1) durchgeführt worden. Alle 6 Experimente wurden hinsichtlich der freien, noch offenen Modellparameter mit einem identischen Datensatz nachgerechnet.

- Die durch das Entrainment bewirkte durchschnittliche Partikelgröße bzw. die detaillierte Größenverteilung der Partikel ist für eine konsistente Nachrechnung der Experimente derzeit im Input vorgegeben worden. Die Berechnung einer dynamischen Größenentwicklung über ein Weber-Kriterium während der Rechnung ist in COCOSYS zwar möglich, die Erfahrungen mit CONTAIN haben aber erhebliche dynamische Rückwirkungen auf andere Phänomene gezeigt, sodass eine Parameterfindung unter Verwendung des Weber-Modells als zu aufwendig angesehen wurde.
- Der Druckabfall im RDB während des einphasigen Ausströmens von Schmelze wird mit dem verbesserten Modell in COCOSYS in besserer Übereinstimmung mit der Messung als zuvor mit CONTAIN berechnet. Grund: In COCOSYS wird bei dem Austrag der Schmelze der Einfluss der Volumenänderung durch die ausströmende Schmelze berücksichtigt.
- Das Kriterium für das Einsetzen des Blowthrough geht in COCOSYS wie in CONTAIN auf die Korrelation von Gluck et al., Gl. (2-5), zurück. Obwohl mit diesem Ansatz eine ausreichende Prognose der Blowthrough-Zeit für die Experimente mit kalten Schmelzesimulationen (DISCO-C, DISCO-M) möglich war, ergibt sich für die heißen DISCO-Experimente eine deutliche Unterschätzung der Blowthrough-Zeit. Die Ursache konnte derzeit noch nicht abschließend ermittelt werden. Die Bestimmung des Zeitpunktes vom Blowthrough wird aber für den Zweck von Sicherheitsanalysen als unkritisch angesehen, da Zeitverschiebungen im Rahmen eines Bruchteiles von einer Sekunde keinen wesentlichen Effekt auf die Integrität des Sicherheitsbehälters haben.
- Der Übergang zwischen einphasigem und zweiphasigem Ausströmen aus dem RDB wird in der Nachrechnung durch einen scharfen Knick im Druckverlauf beschrieben, während das Experiment hier einen weichen Übergang zeigt. Die Ursache hierfür liegt in Modelldefiziten. Im Modell wird angenommen, dass die zweiphasige Ausströmung bereits zu Beginn voll mit getrennten Strömungsquerschnitten für Gas und Flüssigkeit entwickelt ist. Diese Annahme ist zu Beginn der zweiphasigen Ausströmung offensichtlich keine gute Approximation, da komplexe

Wechselwirkungen zwischen Flüssigkeit und Gas (Reibung) vernachlässigt werden.

- Später verläuft die berechnete Druckentlastung des RDB in guter Übereinstimmung mit dem Experiment.
- In dem unteren Bereich der Reaktorgrube, der in der Rechnung als separates Volumen behandelt wird, zeigen die COCOSYS-Rechnungen eine starke Überhöhung des maximalen Druckes während der Ausströmung. Hiefür sind Modellparameter als verantwortlich identifiziert worden, die maßgeblich das berechnete Zeitfenster und die Rate des Entrainments sowie den Schlupf zwischen Gas- und Schmelzgeschwindigkeit beeinflussen. Mit geeigneter Variation dieser Parameter konnten hinsichtlich des Druckanstieges in der Reaktorgrube bessere Übereinstimmungen mit dem Experiment erzielt werden. Allerdings zeigen diese Parametervariationen Seiteneffekte auf das berechnete Integral der ausgetragenen Schmelzmasse, welches ein wichtiger Parameter für den maximalen Druckanstieg im Sicherheitsbehälter ist. Da die Abhängigkeit der einzelnen Parameter auf die wesentlichen Phänomene sehr komplex ist, muss eine mögliche Verbesserung des Datensatzes bzw. eine Modellverfeinerung im Hinblick auf den Druckanstieg in der Reaktorgrube auf weiterführende Arbeiten in einem geplanten Nachfolgevorhaben verschoben werden.
- Im Falle der Experimente in der Karlsruher DISCO-Anlage wichen die berechneten Druckanstiege im Sicherheitsbehälter vom Experiment um bis zu ca. 20 % ab, was für Sicherheitsanalysen in Anbetracht der Unsicherheiten zugrundeliegender Details akzeptabel ist. Im Falle der Surtsey-Anlage wurde in beiden untersuchten Versuchen (Sup-1, Sup-2) eine Unterschätzung des Druckanstieges von bis zu ca. 50 % festgestellt.
- Der in COCOSYS berechnete Stoffmengenumsatz von stark exothermen Reaktionen (Oxidation des Eisens durch Luftsauerstoff, Wasserstoffverbrennung) liegt bei allen Versuchen um ca. 50 % unter den experimentell (aus den Gaskonzentrationen) bestimmten Werten. Hinsichtlich dieser Tendenz besteht eine gewisse Übereinstimmung zu anderen analytischen Ansätzen, bei denen die Druckanstiege im Experiment nur bei gleichzeitiger Unterschätzung der Wasserstoffverbrennung um ca. einen Faktor 2 nachvollzogen werden konnten /PIL 96/. Hier wird die Frage aufgeworfen, wo die Energie der Wasserstoffverbrennung hingehet, wenn die experimentell bestimmten Umsätze realistisch sind. Würde die Energie – wie derzeit im

Code berechnet – in die Atmosphäre gehen, würden die Modelle bei richtigem Umsatz an stark energetischen Reaktionen den Druckanstieg überschätzen. Im Falle von anderen Umsetzungsformen der Energie, beispielsweise durch Übergang auf luftgetragene Metallteilchen, in deren Nähe die Verbrennung stattfindet, oder durch effizienten Übergang – möglicherweise durch Strahlung – auf im Raum vorhandene Strukturen, könnte der niedrige Druckanstieg im Experiment bei großem Umsatz an Reaktionsenergie erklärt werden, allerdings fehlt derzeit die Modellierung solcher Wärmeübergänge.

- Die Raten für den Stoffübergang bei chemischen Reaktionen werden in COCOSYS zunächst auf die Diffusion der gasförmigen Oxidationsmittel (H_2O , O_2) an die Oberfläche der Metallteilchen zurückgeführt. Die Menge pro Zeiteinheit an reaktionsfähigem Metall wird jedoch durch die tropfenseitige Diffusion von metallischen Reduktionsmitteln an dessen Oberfläche limitiert. In der Rechnung ergibt sich in der aktuellen Modellversion von COCOSYS, dass die demnach ermittelte, maximale Rate von reaktionsfähigem Metall bereits von der Oxidationsrate des Metalls durch Luftsauerstoff konsumiert wird. Für die Oxidation mit Wasserdampf verbleibt für den betrachteten Zeitschritt in der Rechnung oft kein weiteres reaktionsfähiges Metall. Aus den Experimenten ist bislang nicht zweifelsfrei zu entnehmen, in welchem Verhältnis die Oxidationsraten Metall/Sauerstoff und Metall/Dampf tatsächlich zueinander stehen. Die Wasserstoffverbrennung wird im Experiment aus der Abnahme der Sauerstoffkonzentrationen der Containment-Atmosphäre unter Vernachlässigung der direkten Oxidation der Metalle durch Sauerstoff geschlossen. Es gibt auch keine Angaben zur Menge des insgesamt produzierten Metalloxids. Genau genommen müsste aus den Experimenten eine Abhängigkeit des Druckanstieges vom gesamten Umsatz an stark exothermen Reaktionen geschlossen werden.

Die Dynamik der beiden prinzipiell gleichzeitig ablaufenden Vorgänge der Wasserstoffproduktion mit anschließender Verbrennung einerseits und der Metalloxidation andererseits sowie die damit verbundenen Mechanismen der Energiefreisetzung werden derzeit von COCOSYS vermutlich ungenau dargestellt. Die Modelle können aber an den Experimenten mangels Information nicht weitergehend überprüft werden. In der derzeitigen Version von COCOSYS erfolgt die Berechnung einseitig zu Gunsten der Metalloxidation, wobei die Oxidationswärme direkt in den Tropfen frei gesetzt wird. Mit dieser Modellversion gelang es jedoch, eine Auswahl von Experimenten unter verschiedenen Randbedingungen (ohne Dampf/mit Dampf) mit einheitlichem Parametersatz konsistent nachzurechnen.

- Die Geschwindigkeit der H₂-Verbrennung hat großen Einfluss auf den Zeitpunkt und die Amplitude des Druckmaximums und kaum Einfluss auf das Abklingverhalten des Druckes zu späteren Zeiten nach Ende des Blowdown. Dies ist durch Variation von Kennwerten der für die Simulation der Verbrennungsprozesse verwendeten Rekombinatoren in einer zusätzlichen Rechnung gezeigt worden. Eine detaillierte Validierung des Zusammenspiels von Modellen für Wasserstoffverbrennung und chemischen Reaktionen ist aufgrund nicht ausreichender Informationen aus den Experimenten nicht möglich. Bei der Extrapolation für die Anwendung dieser Methodik auf Reaktoranlagen gibt es eine Unsicherheit, wie die hier gewonnenen Ergebnisse für Größe und Kennwerte des Rekombinators richtig auf die entsprechende Anlagengröße extrapoliert werden müssen.
- Die Versuchsnachrechnungen zeigen eine Unterschätzung der Druckabsenkung bzw. Abkühlung der Atmosphäre nach Ende des Blowdowns. Durch eine Parametervariation konnte gezeigt werden, dass diese Unterschätzung auf eine Unterschätzung der Wirkung von Wärmesenken zurückgeführt werden kann. Möglicherweise besteht diese Unterschätzung in einer Unterschätzung der beteiligten Oberflächen von Strukturen, die für die Aufnahme von thermischer Energie aus der Atmosphäre zur Verfügung stehen. Diese Unterschätzung hat Einfluss auf das Abklingverhalten des Druckes, aber nur einen geringen Einfluss auf den Zeitpunkt und die Amplitude des erreichten Druckmaximums im Sicherheitsbehälter.
- Der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube wird mit COCOSYS bei einheitlichem Parametersatz für alle Versuche mit einer Ungenauigkeit von ca. 20 % berechnet. Die vorgenannte Ungenauigkeit gilt auch repräsentativ für die Ungenauigkeiten bei der Verteilung der Schmelze auf die verschiedenen Räume. In Anbetracht der Komplexität der Prozesse und der noch verbleibenden Unsicherheiten, auch im Hinblick auf konkurrierende Rechencodes, ist dieses Ergebnis als sehr gut zu bezeichnen. Die Verwendung der Referenzmodelle für Entrainment und Ablagerung (Trapping) ist unter diesem Aspekt ausreichend gerechtfertigt.
- Für konsistente Nachrechnungen aller Versuche war es erforderlich, die Wärmeübertragung und chemischen Reaktionen von denjenigen Schmelzeanteilen, die über Entrainment aus der Grube ausgetragen werden und in andere Raumbereiche gelangen, nach deren Ablagerung zu vernachlässigen. Das bedeutet, dass eine nennenswerte Aufheizung der Atmosphäre durch chemische Reaktionen und Wärmeübertragung von der Schmelze hauptsächlich in der Reaktorgrube stattfindet sowie in anderen Raumbereichen in Anwesenheit von luftgetragenen Schmel-

zemassen. Mit dieser Annahme geht die Hypothese einher, dass beim Aufprall von Schmelzpartikeln auf Strukturen innerhalb der großen Anlagenräume ein sehr effizienter Wärmeaustausch zwischen Partikeln und Struktur erfolgt mit einer sofortigen Abkühlung/Erstarrung des Partikels. Für diesen Vorgang steht derzeit noch kein adäquates Modell zur in COCOSYS zur Verfügung.

- Um die Anwendbarkeit des DCH-Moduls in COCOSYS zu demonstrieren und um einen Vergleich mit dem entsprechenden Modul in CONTAIN durchzuführen wurde ein Anwendungsbeispiel für die Sequoyah-Anlage aus dem CONTAIN User Manual mit COCOSYS nachgerechnet. Aufgrund von Modellunterschieden in beiden Programmen mussten einzelne Eingabedaten (z. B. für den Eiskondensator) angepasst werden. Ebenso wurden einzelne Modelloptionen in COCOSYS ergänzt. Berücksichtigt man die teilweise unterschiedlichen Modelle (z. B. Wasserstoffverbrennung) konnten die Ergebnisse aus CONTAIN mit COCOSYS qualitativ und quantitativ gut nachgerechnet werden.

Für diese Rechnung wurde die Schmelzfreisetzung und das Entrainment wie bei CONTAIN per Eingabe vorgegeben. Daher konnten keine Aussagen zu den Modellen zur Schmelzfreisetzung und Entrainment getroffen werden. Der Vergleich zwischen COCOSYS und CONTAIN ergab zum Teil größere Unterschiede im Druckaufbau für einzelne Zonen. Der Umsatz an chemischen Reaktionen ist in CONTAIN deutlich höher, was zum Teil den größeren Druckaufbau und die höheren Wasserstoffkonzentrationen in CONTAIN erklären kann. Die Ablauffähigkeit des DCH-Moduls in COCOSYS konnte mit dieser Rechnung demonstriert werden.

Tab. 5-7: Zeit bis zum Einsetzen des Blowthrough in Experiment und COCOSYS-Rechnungen.

Zeit bis zum Blowthrough [s]	H04	H02	H03	DISCO-L1	Sup1	Sup2
Experiment	0,145	0,09	0,135	0,092	k. A.	k. A.
COCOSYS	0,100	0,09	0,090	0,077	0,058	0,51

Tab. 5-8: Druckanstieg in Reaktorgrube und Sicherheitsbehälter in Experimenten und COCOSYS-Rechnungen.

Druckanstieg ΔP [MPa]		H04	H02	H03	DISCO-L1	Sup-1	Sup-2
in Reaktorgrube während Schmelzefreisetzung	Experiment	0,10	0,09	0,12	0,29	0,09	kein Peak
	COCOSYS	0,35	0,48	0,54	0,80	0,41	kein Peak
in Containment	Experiment	0,16	0,23	0,12	0,13	0,40	0,20
	COCOSYS	0,15	0,26	0,10	0,12	0,29	0,13

Tab. 5-9: Stoffmengenumsatz wichtiger Reaktionen in Experimenten und COCOSYS-Rechnungen.

Stoffumsatz [mol]		H04	H02	H03	DISCO-L1	Sup-1	Sup-2
Produzierte Menge an FeO	Experiment, durch H ₂ O	0,0	54	33	0,0	484	308
	COCOSYS, durch O ₂ und H ₂ O	16,5	20,8	9,7	10,5	159	7,9
Verbrannte Menge H ₂	Experiment	0,0	66	35	0,0	646	399
	COCOSYS	0,0	25	4,2	0,0	174	156

Tab. 5-10: Verteilung der Schmelze in Experimenten und COCOSYS-Rechnungen.

Zurückgehaltene Schmelzefraktion [%]		H04	H02	H03	DISCO-L1		Sup-1	Sup-2
in Reaktorgrube	Experiment	20,3	39,5	54,2	39,4		22,1	79,2
	COCOSYS	23,8	31,0	29,1	27,9		25,0	96,1
in Subcompartment (/Bottom Access bei FH02)	Experiment	9,9	10,2	43,5	28,0	18,1	8,6	0,8
	COCOSYS	25,6	13,7	56,2	24,8	23,5	29,0	2,6
in Containment-Dome	Experiment	69,7	50,3	2,2	14,5		69,2	20,0
	COCOSYS	50,6	55,3	14,7	23,9		46,0	1,3

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit ist das Containment-Code-System COCOSYS um ein Modul erweitert worden, mit dem die Phänomene im Zusammenhang mit der Freisetzung der Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter in den Sicherheitsbehälter simuliert werden können. Diese Modellerweiterung schließt fortan die Modell-Lücke zwischen den In-Vessel-Prozessen, die zum Durchschmelzen des RDB führen und der Behandlung der Schmelze außerhalb des RDB (Schmelzeausbreitung, MCCI). Die Modellerweiterungen wurden aufgrund intensiver Anwendungserfahrung mit dem US-amerikanischen Containment-Code CONTAIN vorgenommen. Bei der Entwicklung des DCH-Teiles in CONTAIN wurden seinerzeit weitgehend detaillierte und mechanistische Modelle verwendet, die Validierung erstreckte sich aber hauptsächlich auf amerikanische Anlagen, die mit der Zuführung eines Instrumentierungskanals von unten in die Reaktorgrube eine grundsätzliche Verschiedenheit zu den Anlagen in Deutschland bzw. Europa aufweisen.

Ein wesentlicher Teil der Arbeiten bestand zunächst in der Anwendung von CONTAIN auf Experimente mit Anlagengeometrien, die sich an deutsche Verhältnisse orientieren. In deutschen DWR-Anlagen ist die Reaktorkaverne eng und mögliche Strömungswege aus der Grube in andere Raumbereiche des Sicherheitsbehälters bestehen vor allem entlang der Primärkreis Kühlmittelleitungen in seitlich zur Reaktorgrube angeordnete Räume bzw. zwischen RDB und RDB-Tragstruktur vertikal nach oben gerichtet, wenn angenommen wird, dass entsprechende Abdichtungen entlang beider Wege bereits versagt haben.

Durch intensive Anwendung von CONTAIN auf Experimente in der DISCO-Versuchsanlage in Karlsruhe, bei der sowohl Experiment mit kalten Schmelzesimulationen als auch Experimente mit heißen Schmelzen in verschiedenen Geometrien (EPR, französische P'4-Anlage) nachgerechnet wurden, konnte gezeigt werden, dass die Philosophie und Anlage der Modelle für DCH-Phänomene in CONTAIN nach derzeitigem Kenntnisstand eine ausreichende Plattform für die Übernahme dieser in COCOSYS darstellen, um die wichtigsten Phänomene realitätsnah und mit ausreichendem Detaillierungsgrad simulieren zu können. In einer internationalen Zusammenarbeit zum Thema DCH in SARNET wurde bestätigt, dass CONTAIN unter allen bislang verfügbaren DCH-Codes über im höchsten Grad mechanistische Ansätze verfügt. Allerdings gestaltete sich die Suche nach geeigneten Modellparametern aufgrund der Komplexität

der Prozesse und der sehr dynamischen Abhängigkeiten verschiedener Phänomene untereinander als äußerst schwierig.

Für COCOSYS sind daher viele Teilmodelle analog zu den in CONTAIN vorhandenen Modellen angelegt worden, mit punktuellen Vereinfachungen - wo möglich - und punktuellen Verbesserungen - wo nötig. Die Vereinfachungen bestehen vor allem in einer Reduktion von verfügbaren Modellansätzen für die Phänomene des Schmelzeintrags in die Gasströmung sowie die Ablagerung. Eine Bewertung der verfügbaren Modelle für diese beiden Phänomene konnte aufgrund der Komplexität der Prozesse und den eingeschränkten Aussagen hierzu aus den Experimenten nicht vorgenommen werden, daher wurden Referenzmodelle ausgewählt, mit denen nach Anpassung von Parametern prinzipiell realistische Ergebnisse erzielt werden können. Verbesserungen bestehen u. a. in den Punkten

- Berücksichtigung des sinkenden Schmelzevolumens auf den RDB-Druck während des Austrages von Schmelze aus dem RDB
- Verfolgung von Größenklassen auch für bereits abgelagerte Schmelzefraktionen, zwecks genauerer Darstellung von Wärmeübergangsprozessen
- Berücksichtigung von maximalen Fallgeschwindigkeiten bei dem gravitationsgetriebenen („Gravitational Fall Time“ = GFT) Ablagerungsmodell, welches als Referenz ausgewählt wurde
- Ermittlung der chemischen Quellterme innerhalb der impliziten Lösung von Massen- und Energieerhaltung

Die gegen Vorhabensende vorliegende Version von COCOSYS wurde abschließend durch Anwendung auf wichtige Experimente in der Karlsruher DISCO-Anlage und der amerikanischen Surtsey-Anlage, durch Vergleiche mit CONTAIN für einen Benchmark (DISCO-L1) sowie für einen dokumentierten Anlagenrechenfall (Sequoyah) einer detaillierten Basisabsicherung unterzogen.

Die wichtigsten Ergebnisse aus der Basisabsicherung (siehe auch Abschnitt 5.4 auf Seite 164) können in folgender Bewertung zusammengefasst werden:

- Eine der wichtigsten Größen für die Aufheizung der Atmosphäre im Sicherheitsbehälter ist der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube während des Blowdown. Der Austrag von Schmelze aus der Grube und die Verteilung der Schmelze auf Containment-Kuppel (Dome) und Nebenräume (Subcompartments) konnten für

verschiedene Experimente, die unter verschiedenen Bedingungen in verschiedenen Versuchsanlagen(-geometrien) durchgeführt worden sind, mit einem identischen Parametersatz für die wichtigsten Teilmodelle (wie z. B. Entrainment, Trapping, Wärmeübergänge, etc.) bis auf ca. 20 % (Absolutwert) genau nachgerechnet werden.

- Für die konsistente Nachrechnung der Versuche musste die Hypothese getroffen werden, dass nach dem Austrag von Schmelzepartikeln aus der Reaktorgrube diese beim Aufprall auf Strukturen innerhalb der großen Anlagenräume einen sehr effizienten Wärmeaustausch mit der Struktur erfahren, was zu einer sofortigen Abkühlung/Erstarrung der Partikel führt, so dass diese nach deren Ablagerung nicht mehr nennenswert an der Aufheizung der Atmosphäre bzw. an chemischen Reaktionen teilnehmen. Für diesen Vorgang steht derzeit noch kein adäquates Modell in COCOSYS zur Verfügung.
- Mit der zuvor formulierten Hypothese ist die Aufheizung der Atmosphäre (über thermische bzw. chemische Wechselwirkungen) kohärent mit dem luftgetragenen Zustand von Schmelze in großvolumigen Räumen (z. B. Containment-Dome). In kleinvolumigen Räumen mit vielen Einbauten ist die Ablagerung von Schmelze sehr effizient, was mit dem in COCOSYS vorgegeben Referenzmodell für die Ablagerung derzeit nur über eine vom Benutzer vorzunehmende Verkürzung der entsprechenden Zonenfallhöhe im Input simuliert werden kann. Zukünftige Arbeiten zu DCH sollten u. a. eine Verbesserung des Ablagerungsmodells mit größerer Prognosefähigkeit und geringerem Benutzereinfluss zum Ziel haben.
- Die durch das Entrainment bewirkte durchschnittliche Partikelgröße bzw. die detaillierte Größenverteilung der Partikel muss für eine konsistente Nachrechnung der Experimente derzeit im Input vorgegeben werden. In diesem Punkt verbleibt eine Unsicherheit bei der Extrapolation zu den Verhältnissen in einer Reaktoranlage.
- Das Zusammenwirken von Zeitskalen der wichtigen dynamischen Vorgänge
 - Entrainment von Schmelze in die Gasströmung
 - Ablagerung von Schmelze aus der Gasströmung
 - Energieaustausch zwischen luftgetragenen Partikeln und Atmosphäre
 - stark exotherme chemische Reaktionen (Metalloxydation mit Luftsauerstoff, H₂-Verbrennung)

bestimmt den Zeitpunkt und die Amplitude des zwischenzeitlichen Druckmaximums im Sicherheitsbehälter. Die Dynamik der beiden prinzipiell gleichzeitig ablaufenden

Vorgänge der Wasserstoffproduktion mit anschließender Verbrennung einerseits und der Metalloxidation andererseits sowie die damit verbundenen Mechanismen der Energiefreisetzung werden derzeit von COCOSYS vermutlich ungenau dargestellt. Modelle für Oxidation und Wasserstoffproduktion und -verbrennung können anhand der verfügbaren Informationen aus den Experimenten nicht im Detail überprüft werden. In der derzeitigen Version von COCOSYS erfolgt die Berechnung einseitig zu Gunsten der Metalloxidation, wobei die Oxidationswärme direkt in den Tropfen frei gesetzt wird. Für die Wasserstoffverbrennung wurden in den Nachrechnungen ‚virtuelle‘ Rekombinatoren verwendet, die mit Vorgabe geeigneter Kenngrößen ausreichend effizient eingestellt wurden, um eine genügend schnelle Wasserstoffverbrennung zu simulieren. Die Absicherung der beteiligten dynamischen Phänomene ist nur im Verbund dieser zu betrachten, Unsicherheiten, die in jedem einzelnen Phänomen verbleiben, wirken sich damit direkt auf den gesamten Verbund aus.

- Der Stoffmengenumsatz von stark energetischen Reaktionen wird in allen Nachrechnungen um ca. 50 % unterschätzt. Die Druckanstiege im Sicherheitsbehälter bei den DISCO-Versuchen werden trotzdem auf bis zu 20 % genau getroffen. Für die Versuche in der Surtsey-Anlage ergab sich allerdings eine Unterschätzung der Druckanhebung von 50 %.
- Bei der Ausströmung von Schmelze aus dem RDB werden einige Eigenschaften der Experimente nicht sauber abgebildet:
 - Einsetzen des Gasdruckbruches/Beginn der zweiphasigen Ausströmung in den DISCO-Versuchen mit Thermit-Schmelze.
 - Verlauf des RDB-Druckes während der zweiphasigen Ausströmung.Der Einfluss auf die sicherheitsrelevanten Hauptphänomene (Druckmaximum, Verteilung der Schmelze) ist allerdings gering.
- Der Druckanstieg ΔP in der Reaktorgrube während der Ausströmung von Schmelze aus dem RDB wird in den Nachrechnungen um einen Faktor 3-5 überschätzt. Die Überschätzung ist abhängig von den Modelleinstellungen zum Entrainment und zum Schlupf. Die aktuellen Einstellungen für die Nachrechnungen der Experimente bewirken über die Eingrenzung des Zeitintervalls für das Entrainment auf ein kleines Zeitfenster mit einer großen Entrainment-Rate eine zwischenzeitlich sehr große Schmelzemasse im luftgetragenen Zustand in der Reaktorgrube. Aus diesem Grund steigt der berechnete Druck in der Reaktorgrube stark an. Der

Druckanstieg im unteren Bereich der Reaktorgrube kann nur dann in der Rechnung simuliert werden, wenn dieser als separate Zone in der Nodalisierung behandelt wird.

Unter Verweis auf die oben angeführte Bewertung inklusive der Hinweise zur Extrapolation auf Anlagenverhältnisse und zu nötigen Verbesserungen steht mit dem aktuellen DCH-Modul in COCOSYS ein Modell zur Verfügung, mit dem die Vorgänge während der Freisetzung von Kernschmelze aus dem Reaktordruckbehälter realistisch simuliert werden können. Ein Meilenstein ist die sichere Prognose (bis auf 20 % genau) der aus der Reaktorgrube ausgetragenen Schmelzemasse, wie die Nachrechnung verschiedener Experimente zeigte.

Für eine verbesserte Prognose des Druckanstiegs im Sicherheitsbehälter muss die Modellierung der relevanten dynamischen Prozesse – speziell der chemischen Reaktionen – im Detail verbessert werden. Notwendige Einzelinformationen hierzu sind bislang aus den bekannten Experimenten kaum zu entnehmen. Eine Analyse der beim Forschungszentrum Karlsruhe kürzlich durchgeführten Experimente zur Wasserstoffverbrennung könnte hierzu einen weiteren Beitrag leisten.

7 Literatur

- /AZZ 97/ Azzopardi, B. Z.:
Drops in Annular Two-Phase Flow
Int. J. Multiphase Flow, Vol 23, Suppl., pp 1-53, 1997.
- /BLA 99/ T. K. Blanchat, M. M. Pilch, R. Y. Lee, L. Meyer, M. Petit
Direct Containment Heating Experiments at Low Reactor Coolant System
Pressure in the Surtsey Test Facility
U. S. Nuclear Regulatory Commission, NUREG/CR-5746.
- /BÜS 99/ T. Büscher et al.
Analyse theoretischer Ansätze zur Schmelzedispersion in der Reaktorgru-
be durch Gasaustritt aus dem Reaktordruckbehälter
Technischer Fachbericht, Ruhr-Uni Bochum, RUB E-I-225.
- /CRA 03/ M. Cranga, P. Giordano, R. Passalacqua, C. Caroli, L. Walle
ASTEC – RUPUICUV Code Version 1.2; Ex-Vessel Corium Discharge and
Corium Entrainment to Containment
ASTEC-V1/DOC/03-19, Technical Note DRS/SEMAR 2003/103, IRSN,
2003.
- /EPR 99/ Electric Power Research Institute
User's Manual of MAAP 4.04 – Volume 2 (Code Structure and Theory) –
EPRI Research Project 3131-02,1999.
- /GAR 01/ M. Gargallo, L. Meyer
Experimental Simulation of Melt Dispersion at Low Pressure in an Annular
Cavity
SMiRT16, Washington DC, USA, August 12-17, 2001.
- /KIM 95/ S. B. Kim, M. K. Chung, H. Y. Lee and H. D. Kim
Dispersal from a Reactor Vessel during High Pressure Ejection
International Communication in Heat and Mass Transfer, Vol. 22, No 1, pp.
25-34, 1995.

- /KLE 00/ W. Klein-Heßling, S. Arndt, G. Weber
 COCOSYS V1.2
 a) User Manual; GRS-P-3/1
 b) Program Reference Manual; GRS-P-3/2
 c) Implementation Manual; GRS-P-3/3
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Juli 2000.
- /KLE 06/ W. Klein-Heßling, S. Arndt
 COCOSYS V2.3 User's Manual, Revision 0
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Mai 2006.
- /KRE 06/ F. Kretzschmar
 Onset of Gas Blowthrough During Melt Expulsion From A Hole in a RPV –
 Numerical Analysis Using the SIMMER Code
 2006 ASME U.S.-European Fluids Engineering Summer Meeting, Miami,
 2006.
- /LAN 06/ J. Langhans
 Freisetzung von Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter
 Technischer Bericht, GRS - A - 3311, März 2006.
- /MEI 05/ R. Meignend, D. Plassert, C. Caroli, L. Meyer, D. Wilhelm
 Direct Containment Heating at Low Primary Pressure: Experimental Inves-
 tigation and Multidimensional Modelling,
 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics
 (NURETH-11), Avignon, France, 2005.
- /MEI 05b/ R. Meignen
 CONTAINMENT - DCH: Minutes of the 1st Workshop on DCH Modelling
 SARNET-CONT-M03, IRSN, January, 21, 2005.
- /MEI 06/ R. Meignend, S. Mikasser
 Direct Containment Heating: Comparison and Analysis of ASTEC,
 CONTAIN and MAAP Calculations for the LACOMERA L-1 Test,
 SARNET CONT-P09, IRSN, 2006.

- /MEI 06b/ R. Meignen
CONTAINMENT - DCH: Minutes of the 2nd Workshop on DCH Modelling
SARNET-CONT-M05, IRSN, March, 8, 2006.
- /MEY 03/ L. Meyer, M. Gargallo
Low-Pressure Corium Dispersion Experiments With Simulant Fluids In A
Scaled Annular Cavity
Nuclear Technology, Vol. 141, 2003.
- /MEY 03b/ L. Meyer, G. Albrecht, M. Kirstahler
Corium Dispersion and Direct Containment Heating Experiments at low
System Pressure
The 10th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hy-
draulics (NURETH-10), Seoul, Korea, October 5-9, 2003.
- /MEY 04/ L. Meyer, G. Albrecht, M. Kirstahler, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner
Melt Dispersion and Direct Containment Heating (DCH) Experiments in the
DISCO-H Test Facility
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6988, 2004.
- /MEY 06/ L. Meyer, M. Gargallo, M. Kirstahler, M. Schwall, E. Wachter, G. Wörner
Low Pressure Corium Dispersion Experiments in the DISCO Test Facility
with Cold Simulant Fluids
Forschungszentrum Karlsruhe, FZKA 6591, 2006.
- /MUR 97/ Murata, Williams, Tills et al.:
Code Manual for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor
Containment Analysis
NUREG/CR-6533, SAND97-1735, 1997.
- /PIL 85/ M. Pilch und W. W. Tarbell
High Pressure Ejection of Melt From A Reactor Pressure Vessel - The Dis-
charge Phase
NUREG/CR-4383; SAND85-0012, USNRC, 1985.

- /PIL 92/ M. Pilch und R.O. Griffith
 Gas Blowthrough and Flow Quality Correlations for Use in the Analysis of High Pressure Melt Ejection (HPME) Events
 SAND91-2322; UC-523, Sandia National Laboratories (SNL), 1992.
- /PIL 96/ M. Pilch
 A Two-Cell Equilibrium Model for Predicting Direct Containment Heating
 Nuclear Engineering and Design, Vol. 164, pp. 61-94, 1996.
- /PLA 04/ D. Plassart
 Large Scale Experiments on Core Degradation, Melt Retention, and Coolability (LACOMERA Project): DISCO-L1 Test Report.
 SAM-LACOMERA-D06, European Commission, November 2004.
- /SPE 06/ C. Spengler
 CONTAINMENT - DCH: CONTAIN Calculations for DISCO-L1,
 SARNET-CONT-P07 Rev1, GRS Cologne, June 2006.
- /WIL 96/ D. C. Williams and R. O. Griffith
 Assessment of Cavity Dispersal Correlations for Possible Implementation in the CONTAIN Code
 SANDIA Report SAND94-0015, UC-610, 1996.
- /WIL 01/ D. Wilhelm
 Analysis of a Thermite Experiment to Study Low Pressure Corium Dispersion
 FZKA 6602, Forschungszentrum Karlsruhe, 2001
- /WIL 06/ D. Wilhelm
 Analysis of Direct Containment Heating Experiments with Thermite in P'4 Geometry with the CFD code AFDM
 SARNET CONT-P05, Forschungszentrum Karlsruhe, 2006.

8 Verteiler

BMWi

Referat III B 4 1 x

GRS-FB

Internationale Verteilung 40 x

Projektbegleiter (seh) 3 x

GRS

Geschäftsführung (hah, stj) je 1 x

Bereichsleiter (ban, brw, zir, erv, lim, tes, prg) je 1 x

Abteilungsleiter (all, bea) je 1 x

Abteilung 301 (scw) 1 x

Abteilung 302 (luw) 1 x

Projektleitung (spc) 6 x

Projektbetreuung (kgf) 1 x

Bibliothek (Garching, Köln) je 1 x

Autoren (klh, spc) je 1 x

Gesamtauflage: 68 Exemplare