

Weiterentwicklung der
Rechenprogramme
COCOSYS und
ASTEC

Vorhaben RS 1159

Abschlussbericht

Abschlussbericht/ Final Report

Reaktorsicherheitsforschung-
Vorhabens Nr.:/
Reactor Safety Research-Project No.:
RS 1159

Vorhabensitel / Project Title:
Weiterentwicklung der
Rechenprogramme
COCOSYS und ASTEC

Further development of the
simulation codes COCOSYS and
ASTEC

Autor / Author:
C. Spengler, S. Arndt,
H. Nowack, W. Klein-Heßling,
W. Luther, N. Reinke,
S. Schwarz, B. Schramm,
B. Schwinges, G. Weber

Berichtszeitraum / Publication Date:
Oktober 2009

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS 1159 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Kurzfassung

Im Rahmen der Bereitstellung von Werkzeugen für die Bewertung von Stör- und Unfallabläufen und von Maßnahmen eines anlageninternen Notfallschutzes in Kernkraftwerken wurde vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) in diesem Vorhaben die Weiterentwicklung des Systemcodes COCOSYS (Containment Code System) und des deutsch-französischen Integralcodes ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) gefördert.

COCOSYS wird für umfassende Simulationen von Stör- und Unfallabläufen in einem Sicherheitsbehälter (Containment) eines Leichtwasserreaktors entwickelt und validiert. Zielsetzung ist die Simulation aller wichtigen Vorgänge und Bedingungen im Containment im Verlauf angenommener Stör- und Unfallabläufe (inklusive Auslegungsstörfälle) sowie die analytische Begleitung von Experimenten. Dabei sollen auch alle wesentlichen Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Phänomenen berücksichtigt werden.

ASTEC wird gemeinsam von IRSN und GRS mit dem Ziel entwickelt, einen schnell laufenden Code zur Berechnung des gesamten Ablaufs von Unfällen in einem Leichtwasserreaktor vom auslösenden Ereignis bis einschließlich der Spaltproduktfreisetzung in die Umgebung zur Verfügung zu stellen. Anwendungsfelder sind probabilistische Sicherheitsanalysen der Stufe 2 (PSA level 2), Untersuchungen von Stör- und Unfallsequenzen, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie die analytische Begleitung von Experimenten.

Wesentliche Arbeitsergebnisse lassen sich anhand des in sieben Arbeitspunkten gegliederten Arbeitsprogramms wie folgt zusammenfassen:

- Erhöhung der Aussagesicherheit von Quelltermanalysen
Grundlegende Arbeiten zur Integration eines Modells zur Berechnung des pH-Werts von Wasservorlagen wurden in COCOSYS durchgeführt sowie die Darstellung des Iodverhaltens in COCOSYS mit aktualisierten Modellen verbessert. Weitere Arbeiten wurden zum Einfluss von katalytischen Rekombinatoren und H₂-Verbrennungsvorgängen auf Aerosolverhalten/Iodchemie, zur Berechnung der Dosisleistung und zur Verbesserung der Bilanzierung von Aerosolen/Spaltprodukten durchgeführt (alle in COCOSYS).

- Verbesserung der Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens
Um die Einarbeitung neuerer experimenteller Erkenntnisse in die Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens zu ermöglichen, ist der gemeinsam von IRSN und GRS für ASTEC entwickelte MCCI-Code MEDICIS in COCOSYS integriert worden.
- Vervollständigung der Störfallsimulation
In COCOSYS wurden Verbesserungen an den Wärmeübergangsmodellen zwischen Atmosphäre im Sicherheitsbehälter und den Strukturen eingebracht. Diese berücksichtigen Rückwirkungen aus der Validierung zu den THAI-Thermohydraulikversuchen auf die Modelle (insbesondere zur Gasschichtung) durch Modellergänzungen in COCOSYS. Weiterhin wurde ein Filmverdampfungsmodell eingebaut und die Pyrolyse-Modelle in COCOSYS verbessert.
- SWR-Modelle
Die Schnittstelle zwischen dem Zonenmodell DRASYS für DRuckAbbauSYSteme im Thermohydraulik-Hauptmodul THY in COCOSYS und dem 'Pool Scrubbing' Modell SPARC wurde verbessert und die Integration von SPARC in das COCOSYS-Gesamtsystem erhöht.
- Lumped Parameter – CFD Kopplung
Das in CFX-11 implementierte Eddy-Dissipation-Modell für die Wasserstoffverbrennung wurde verbessert und die nötige Parameteranpassung für dieses modifizierte Modell durchgeführt. Die Rechnungen mit dem erweiterten Modell für die Wasserstoffverbrennungsversuche HYCOM01 und HYCOM02 zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten.
- Weiterentwicklung von ASTEC
Schwerpunkte der Weiterentwicklung von ASTEC waren die Modelle für die Bewegung einer Flammenfront bei H₂-Verbrennungsvorgängen, die Verbesserung und der Beginn der Ertüchtigung von ASTEC für Siedewasserreaktoren sowie für die Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens (Freisetzung der Schmelze aus dem RDB und DCH, Schmelzeausbreitung).
- Querschnittsaktivitäten
Aus den Aktivitäten im internationalen Rahmen von OECD-THAI, MCCI-2, GAMA sowie EU-SARNET wurden wichtige Erkenntnisse gewonnen. Ferner wurden notwendige Aktualisierungen von COCOSYS aufgrund der Rückflüsse von COCOSYS-Anwendern durchgeführt sowie periodische Maßnahmen zum Verwalten aktualisierter Codeversionen inklusive Qualitätssicherung abgewickelt.

Mit den in diesem Vorhaben durchgeführten Entwicklungsarbeiten sind die Erkenntnisse der aktuellen experimentellen Forschungsprogramme soweit wie möglich in COCOSYS eingebracht worden. Damit ist die Aussagesicherheit des Systemcodes COCOSYS weiterhin erhöht sowie die nationale und internationale Akzeptanz von COCOSYS als ein aktueller, detailliert-mechanistischer Referenzcode für Stör- und Unfallanalysen im Containment eines LWR gesteigert worden.

Substanzielle Fortschritte sind in diesem Vorhaben mit ASTEC in der Anwendbarkeit für Druck- und Siedewasserreaktoren, in der Anwendbarkeit auf das Kernfängerkonzept beim EPR sowie in der Erweiterung des Anwendungsspektrums bei PSA aufgrund des erweiterten H₂-Verbrennungsmodells erzielt worden.

Abstract

In connection with the provision of tools for the assessment of incident and accident sequences and of accident management measures in nuclear power plants, the Federal Ministry of Economics and Technology (BMWi) sponsored in this project the further development of the COCOSYS (Containment Code System) code system and the Franco-German ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) integral code.

COCOSYS is being developed and validated for the comprehensive simulation of incident, accidents and severe accidents in light-water reactor (LWR) containments. The general objective is the simulation of all relevant processes and conditions in the containment during the process of incident, accidents and severe accidents (including design basis accidents) as well as the analytical evaluation of experiments. This is also to include the consideration of all relevant interactions between the various phenomena.

ASTEC is being jointly developed by IRSN and GRS with the aim to provide a fast running code for the calculation of the entire sequence of a severe accident in a lightwater reactor, starting from the initiating event up to the release of fission products into the environment. The code's fields of application are level-2 probabilistic safety analyses, the analysis of accident and severe accident sequences, uncertainty and sensitivity analyses as well as the analytical evaluation of experiments.

Main work results are described in the following according to the program of work which is organized in seven working packages:

- Improvement of confidence of source term analyses
Basic work was done for the integration of a pH-model into COCOSYS and the description of iodine behaviour was improved with dedicated model actualisations. Further progress was done in considering the impact of passive autocatalytic recombiners (PAR) and hydrogen combustion processes on aerosol behaviour and iodine chemistry, in the calculation of dose rate and in the balance of aerosols/fission products (all in COCOSYS).
- Improvement of ex-vessel corium behaviour
In order to enable actualisations of models for corium melt behaviour according to latest knowledge from experiments the MCCI code MEDICIS, which is commonly developed by GRS and IRSN for ASTEC, was integrated into COCOSYS.

- **Completeness of accident simulation**
Improvements were made on the heat transfer models in the thermal hydraulics part of COCOSYS. The feedback from the validation of COCOSYS for the THAI-experiments were considered by dedicated model improvements and a model for film boiling was introduced into COCOSYS. Further, the COCOSYS models for pyrolysis were improved.
- **BWR-models**
Here, the interface between the zone model for pressure suppression systems (DRASYS) in the thermal-hydraulics module THY of COCOSYS and the pool scrubbing model SPARC was improved and the overall integration of SPARC into COCOSYS was increased.
- **Coupling between lumped parameter and CFD**
The Eddy-Dissipation-Model for burning of H₂, which was implemented in CFX-11, was improved and the open model parameters were adapted to experiments. The calculations with the extended model for the experiments HYCOM01 and HYCOM02 showed good agreements with measured data.
- **Further development of ASTEC**
Strong focuses were on the models for describing the movement of a flame front for H₂ combustion processes, on the improvement of applicability of ASTEC for BWR and for the simulation of ex-vessel melt behaviour (release from RPV and DCH, melt spreading).
- **Cross section actions**
Important new findings were obtained from actions embedded in the international frame of OECD-THAI, MCCI-2, GAMA and EU-SARNET. Further some necessary actualisations of COCOSYS as consequence of the feedbacks from applications with COCOSYS were realised as well as the periodic actions for the management and maintenance of COCOSYS updates, including software quality assurance.

With the development work of this project the latest results of recent experimental research programs are incorporated into COCOSYS as far as possible. Thus, the confidence of COCOSYS is further increased and the acceptance of COCOSYS as a detailed-mechanistic reference code is domestically as well as internationally promoted. With ASTEC substantial progress is achieved in the applicability for BWR and for the core-catcher concept of the EPR, as well as in the widening of the range of application within PSA because of the extensions on the hydrogen burning model.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Erhöhung der Aussagesicherheit von Quelltermanalysen	3
2.1	pH-Wert-Berechnung	3
2.1.1	Vergleich von pH-Wert-Modellen	3
2.2	Iodverhalten	10
2.2.1	Iod/Ozon-Reaktion	11
2.2.2	Iod/Stahl-Reaktion	13
2.2.3	Iod/Farbe-Reaktion	19
2.2.4	Aktualisierung der AIM-Beschreibung für das COCOSYS User Manual... 26	
2.2.5	Indizierung der Iodspezies im AIM Modul	27
2.3	Rückwirkungen katalytischer Rekombinatoren und von H ₂ - Verbrennungsvorgängen auf das Aerosolverhalten und die Iodchemie.... 28	
2.3.1	Zusammenstellung von Informationen	28
2.3.2	Identifikation der Einzelprozesse	31
2.3.3	Entwicklung einfacher Korrelationen/Modelle und Einbau in COCOSYS . 33	
2.3.4	Parameterrechnungen zum Einfluss auf den Quellterm	35
2.3.5	Konzipierung von Experimenten	41
2.4	Berechnung der Dosisleistung	42
2.4.1	Implementierung einer Modellerweiterung in AFP	42
2.4.2	Testen der Modellerweiterung	44
2.4.3	Fazit.....	50
2.5	Einheitliche Bilanzierung in AFP	51
2.5.1	Konzeption einer einheitlichen konsistenten und gemeinsamen Bilanzierung im AFP-Hauptmodul	51
2.5.1.1	Beschreibung der Problematik	52
2.5.1.2	Konzeption der neuen gemeinsamen Bilanz	55
2.5.2	Ergänzung der ATHLET-CD/COCOSYS-Kopplung - Quellen für die Spaltprodukte in COCOSYS	62

3	Verbesserung des Verständnisses sowie Erhöhung der Zuverlässigkeit der Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens	86
3.1	Integration von MEDICIS in COCOSYS - Erweiterung um ein Wärmeübergangsmodell.....	87
3.2	Integration von MEDICIS in COCOSYS - Vergleich der Ankopplung mit WECHSL anhand eines Anlagenszenarios	95
4	Vervollständigung der Störfallsimulation	103
4.1	Thermohydraulik.....	103
4.1.1	Wärmeübergangsmodelle.....	103
4.1.1.1	Überprüfung der verbesserten Wärmeübergangsmodelle.....	103
4.1.1.2	Fazit.....	114
4.1.2	THAI-Validierung	114
4.1.2.1	Erweiterung COCOSYS-Manual basierend auf THAI-Validierung.....	114
4.1.2.2	Optimierung des Diffusionsansatzes in den Verbindungsgleichungen ...	121
4.1.3	Filmverdampfungsmodell.....	132
4.1.3.1	Beschreibung des Modells.....	133
4.1.3.2	Untersuchungen anhand von THAI-Versuch TH9	134
4.1.3.3	COCOSYS Nodalisierung und Rechenmodelle.....	139
4.1.3.4	Vergleich COCOSYS-Rechnungen mit Experiment	141
4.1.3.5	Zusammenfassung	146
4.2	Pyrolyse.....	147
4.2.1	Nutzung von F&E-Ergebnissen zur Pyrolyse	147
4.2.2	Implementierung eines Plumemodells	148
4.2.3	Modellierung der Rußproduktion und -ausbreitung	159
4.2.4	Test des Rußmodells anhand des PRISME-SI-D3 Experiments	160
4.2.5	Analyse von Ansätzen zur Behandlung korrosiver Chemikalien.....	166
5	SWR-Modelle.....	172
5.1	Kopplung DRASYS mit SPARC-B	172
5.1.1	Allgemeine Änderungen in SPARC.....	173
5.1.2	Änderungen der Schnittstelle DRASYS - SPARC	174

5.1.3	Modifikation der Kriterien für den Aufruf von SPARC	175
5.2	Testrechnungen zur Überprüfung der modifizierten Kopplung DRASYS - SPARC	177
5.3	Nachrechnung ausgewählter POSEIDON-Experimente.....	184
5.4	Zusammenfassung	187
6	Lumped Parameter / CFD	189
6.1	Wasserstoffverbrennung.....	189
6.2	Wiederholungsrechnung zweier H ₂ -Verbrennungsversuche (aus HYCOM) mit CFX	190
6.2.1	Kurze Beschreibung des HYCOM01 Experiments	190
6.2.2	Turbulenzmodelle für die Simulation der H ₂ -Verbrennung mit CFX.....	191
6.2.3	Anpassung des Modellparameters A im Eddy-Dissipation-Modell.....	193
6.2.4	Modellierung der Zündung	193
6.2.5	Zeitliche Diskretisierung und Konvergenz	194
6.2.6	Räumliche Diskretisierung	194
6.2.7	Rechenergebnisse	195
7	Integralcode ASTEC	197
7.1	Weiterentwicklungsschritte	197
7.2	Modellerweiterungen	198
7.2.1	H ₂ -Verbrennungsvorgänge	198
7.2.1.1	Überblick über verfügbare H ₂ -Verbrennungsmodelle	198
7.2.1.2	Implementierung eines Flammenfrontmodells im CPA- Verbrennungsmodell.....	202
7.2.1.3	Austesten des Modells.....	209
7.2.1.4	Einbau eines Sigma-Lambda-Kriteriums.....	216
7.2.2	CESAR-DIVA-Kopplung.....	216
7.2.3	SWR-Modelle	218
7.2.3.1	Optimierung der Modellierung von Kondensationsrohren.....	219
7.2.3.2	Prioritäten weiterer SWR-Modellerweiterungen	224
7.2.3.3	CESAR für SWR.....	225
7.2.4	Arbeiten zur Konzeption des zukünftigen DCH-Modell in ASTEC	229

7.2.5	'Prototyping' der Schmelzeausbreitung in ASTEC.....	233
7.3	Verbesserung der Code-Infrastruktur.....	237
7.3.1	Erweiterung des ASTEC Post Processings.....	237
7.3.1.1	Bilder für Kühlkreislauf.....	239
7.3.1.2	Kopplung ASTEC-ATLAS: DIVA-Einbindung.....	243
7.3.1.3	Containment-Graphiken.....	245
7.3.1.4	Dokumentation zur Handhabung.....	247
7.3.1.5	ATLAS-Training.....	247
7.3.2	Harmonisierung der Codebeschreibung.....	248
7.3.2.1	CPA User manual (Eingabebeschreibung).....	249
7.3.2.2	Aerosolmodellbeschreibung für ASTEC –CPA.....	252
7.3.2.3	Benutzerempfehlungen.....	252
7.3.3	Abgestimmte Übertragung von Änderungen in COCOSYS nach ASTEC.....	253
7.3.4	Zukünftige ASTEC-Version.....	254
7.3.4.1	Konzept für zukünftige ASTEC-Version.....	254
7.4	Unterstützung von ASTEC-Nutzern.....	255
7.5	Abstimmung mit IRSN.....	262
8	Querschnittsaktivitäten.....	264
8.1	Modifikation der Modellierung aufgrund der Unterstützung interner und externer Nutzer.....	264
8.1.1	Optimierung der Iterationsprozedur für Pumpsysteme.....	264
8.1.2	Optimierung der INSERTION-Option zur Simulation von Kondensationsrohren.....	265
8.1.3	Korrektur der Blendengleichung (ORIFICE).....	266
8.1.4	Einbau eines von der RU Bochum entwickelten Modells zur Simulation der nassen Resuspension.....	270
8.1.5	Verbesserung der vereinfachten Simulation der Kondensationsrohre....	270
8.1.6	Einbau spezieller BOP Modelle für WWER1000/320 in der mit COCOSYS gekoppelten ATHLET-CD Version.....	271
8.2	Mitarbeit in internationalen Gruppen/Gremien.....	271
8.2.1	Mitarbeit in OECD/GAMA.....	271

8.2.2	Mitarbeit in der EU	274
8.2.2.1	Mitarbeit in CEG-SAM	274
8.2.2.2	SARNET - Forschungsaktivitäten	277
8.2.2.3	Beteiligung an PHÉBUS-FP	287
8.3	Aktualisierung von "Pre- und "Post Processing" für COCOSYS sowie der Online-Dokumentation	288
8.3.1	Pflege Pre- und Post processing für COCOSYS	288
8.3.2	Aktualisierung des COCOSYS-Manuals	289
8.4	Herausgabe einer neuen COCOSYS-Version.....	290
8.5	Qualitätssicherung	290
8.5.1	Konfigurations-/Änderungsmanagement.....	290
8.5.2	Aktualisierung von QS-Vorschriften	294
8.5.2.1	Identifizierung des Änderungsbedarfs.....	294
8.5.2.2	Überarbeitung des QS-Handbuchs	298
9	Zusammenfassung	299
10	Literatur	309
11	Verteil	325

Abbildungen

Abb. 1-1	Zielsetzung und Einsatz der GRS-Rechenprogramme	2
Abb. 2-1	pH-Verlauf im Basisfall mit MELCOR (durchgezogene rote Linie) und dem AREVA-Modell	6
Abb. 2-2	PHÉBUS FPT1; Gerechnete und gemessene Csl- und IOX-Aerosolkonzentration.....	12
Abb. 2-3	Auslegung Iod-16, ohne FeI ₂ -Reaktion, I ₂ -Konzentration im Gas	15
Abb. 2-4	Auslegung Iod-16, mit FeI ₂ -Reaktion, I ₂ -Konzentration im Gas. Bei niedrigen Temperaturen ist die effektive FeI ₂ -Bildung stärker als bei hohen	15
Abb. 2-5	Effektive gemessene Konversionsraten von abgelagertem I ₂ in Eiseniodid (FeI ₂) im THAI-Iodversuch	17
Abb. 2-6:	THAI Iod-12; Mit COCOSYS-AIM gerechnete I ₂ -Konzentration im Gas mit (a) und ohne FeI ₂ -Konversion (b) sowie Messwerte (c).....	18
Abb. 2-7	Iod-15, Mehrraum-Nodalisierung	20
Abb. 2-8	Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 0,5 cm/s, Iod-Ablagerung auf Farbblechen.....	21
Abb. 2-9	Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 2,5 cm/s, Iod-Ablagerung auf Farbblechen.....	21
Abb. 2-10	Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 0,5 cm/s, I ₂ -Konzentration im Gas	22
Abb. 2-11	THAI Iod-10; Gerechnete und gemessene I ₂ -Konzentration bei originaler Stahloberfläche (a) sowie mit einem fiktiven Farbanstrich (b)	24
Abb. 2-12	THAI Iod-21; Vorausgerechnete (grün) und gemessene I ₂ -Konzentrationen (Messwerte von AREVA). Auch eingetragen sind die Rechenergebnisse bei angenommener trockener Farbe (blau) und bei angenommener nasser Stahloberfläche (braun).....	26
Abb. 2-13	Csl-Konzentrationen in der Kuppel.....	36
Abb. 2-14	I ₂ -Konzentration in der Kuppel	37
Abb. 2-15	Csl-Konzentrationen in der Kuppel.....	38
Abb. 2-16	I ₂ -Konzentrationen in der Kuppel	39
Abb. 2-17	Freigesetzte Aerosolmasse bei 0,01 m ² Leck	40
Abb. 2-18	Verlauf des Transmissionsfaktors für Quellen am Rand des Sumpfes und im Sumpf	44
Abb. 2-19	Nodalisierung des einfachen Datensatzes einer KONVOI-Anlage	45

Abb. 2-20	Vergleich des Gesamtdrucks.....	46
Abb. 2-21	Vergleich der Temperaturen im Containment-Sumpfbereich	47
Abb. 2-22	Vergleich der Temperaturen im Bereich der Dampferzeuger SG12.....	47
Abb. 2-23	Vergleich des berechneten Wasserstandes im Raum RSG12.....	48
Abb. 2-24	Vergleich der berechneten Dosisleistung im Containment-Sumpf	48
Abb. 2-25	Vergleich der berechneten Dosisleistung in SG12I.....	49
Abb. 2-26	Vergleich der gesamten I2-Masse in der Atmosphäre	49
Abb. 2-27	Anzahl der Compartments mit Berücksichtigung der Iodchemie im Sumpfes.....	50
Abb. 2-28	Geometrie des Gesamtproblems.....	55
Abb. 2-29	Hierarchie der Bilanzen	57
Abb. 2-30	Überblick über die COCOSYS - ATHLET-CD Kopplung.....	63
Abb. 2-31	Übertragung von COCOSYS Randbedingungen an ATHLET-CD	63
Abb. 2-32	Überblick über die Datenstrukturen für die COCOSYS/ATHLET-CD Kopplung.....	64
Abb. 2-33	Druck im Reaktordruckbehälter und Containment	66
Abb. 2-34	Wasserstand im Druckhalter.....	66
Abb. 2-35	Pumpmassenstrom der ND-Notkühlsysteme	67
Abb. 2-36	Vergleich der Leckmassenströme in ATHLET und COCOSYS.....	68
Abb. 2-37	Vergleich der Leckenergieströme in ATHLET und COCOSYS	68
Abb. 2-38	Vergleich der integralen Massenfreisetzung	69
Abb. 2-39	Vergleich der "Außentemperaturen" des RDB.....	70
Abb. 2-40	Freisetzung der Systemwärme	70
Abb. 2-41	Vergleich der Borfreisetzung	71
Abb. 2-42	PHEBUS-Versuchsanlage (schematisch).....	72
Abb. 2-43	Freigesetzte Wasserstoffmasse	75
Abb. 2-44	Freigesetzte Xe-Masse.....	75
Abb. 2-45	Freigesetzte Xe-131 Masse.....	76
Abb. 2-46	Xe-Freisetzungsrage	76
Abb. 2-47	Freigesetzte Te-Masse.....	77
Abb. 2-48	Freigesetzte I2-Masse	77
Abb. 2-49	Freigesetzte Csl-Masse.....	78
Abb. 2-50	Freigesetzte CsOH-Masse	78
Abb. 2-51	Identifizierung der Unterschiede bzgl. Csl-Rate.....	79
Abb. 2-52	PHEBUS-FPT1: Wasserstoffeinspeisung in den Sicherheitsbehälter	81
Abb. 2-53	Zuordnung der SOPHAEROS-Daten nach AFP	82
Abb. 2-54	Freisetzung in den Vessel und Konzentration.....	83

Abb. 2-55	Druck und Temperatur im PHEBUS-Containment	84
Abb. 2-56	Bilanzierung der Aerosole und Spaltprodukte	85
Abb. 3-1	Ergebnisse für die axialen radialen Erosionstiefen in der blinden Nachrechnung (Benchmark) zu CCI-2.....	88
Abb. 3-2	Ergebnisse für die Schmelzetemperaturen in der blinden Nachrechnung (Benchmark) zu CCI-2.....	88
Abb. 3-3	Gemittelte Auswertung des effektiven Wärmeübergangs heff aus den Experimenten	91
Abb. 3-4	Annäherung der experimentellen Daten (schwarze Kreuze) mit der Nusselt-Korrelation für natürliche Konvektion in volumetrisch beheizten Flüssigkeiten (farbige Kreuze /JAH 75/) für das Ensemble von 25 Experimenten aus Tab. 3-3 unter Anwendung generischer Stoffdaten	93
Abb. 3-5	Annäherung der experimentellen Daten (schwarze Kreuze) mit dem Surface-Renewal-Modell (blaue Kreuze) für das Ensemble von 25 Experimenten aus Tab. 3-3 unter Anwendung generischer Stoffdaten	94
Abb. 3-6	Vergleich der berechneten Drücke im Dome-Bereich für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS- WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR	99
Abb. 3-7	Vergleich der berechneten Temperaturen in der Reaktorgrube für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS- WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR	99
Abb. 3-8	Vergleich der berechneten Gasfreisetzungen (H2) für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS-WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR	100
Abb. 4-1	HDR E11.4: Vergleich des Gesamtdrucks	106
Abb. 4-2	HDR E11.4: Vergleich der Temperaturen im Dom	107
Abb. 4-3	THAI-TH13: Vergleich des Gesamtdrucks	108
Abb. 4-4	THAI-TH13: Vergleich der Temperaturen im Dombereich	108
Abb. 4-5	THAI-TH13: Vergleich der Nebelkonzentrationen	109
Abb. 4-6	BMC-VANAM-M2*: Vergleich des Drucks.....	110
Abb. 4-7	BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Temperatur im Dom.....	111
Abb. 4-8	BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Feuchte in R8	111
Abb. 4-9	BMC-VANAM-M2*: Verhältnis der Koeffizienten $\frac{\alpha_{\text{konv}}}{\alpha_{\text{kond}}}$	112
Abb. 4-10	BMC-VANAM-M2*: Verhältnis der Wärmeübergangskoeffizienten $\frac{\alpha_{\text{konv}}}{\alpha_{\text{kond}}}$	112
Abb. 4-11	BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Volumenkondensationsrate in R8	113
Abb. 4-12	BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Aerosolkonzentrationen in R8.....	113

Abb. 4-13	COCOSYS Nodalisierung zum Versuch THAI HM-2	116
Abb. 4-14	COCOSYS Nodalisierung zum Versuch THAI HM-2, detaillierte Darstellung der Einspeisebereiche	117
Abb. 4-15	Ergebnisse der blinden COCOSYS-Rechnung zu THAI HM-2, Auflösung der Leichtgasschichtung, ersichtlich am Verlauf der Wasserstoffkonzentrationen	120
Abb. 4-16	COCOSYS-Nodalisierung zu THAI TH10	124
Abb. 4-17	THAI TH10 Experiment, Heliumkonzentrationsverläufe	124
Abb. 4-18	THAI TH10 Heliumkonzentrationen, COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell.....	125
Abb. 4-19	THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 3,1 und 7,7 m, Experiment und COCOSYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion	125
Abb. 4-20	THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 3,1 m, Experiment und COCOSYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion, (3) mit altem Modell	126
Abb. 4-21	THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 7,7 m, Experiment und COCOSYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion, (3) mit altem Modell	126
Abb. 4-22	Panda SETH T9, Anfangs- und Randbedingungen	127
Abb. 4-23	Panda SETH T9 COCOSYS-Nodalisierung Längsschnitt	128
Abb. 4-24	Panda SETH T9 COCOSYS-Nodalisierung Querschnitt bei 6.47 m	129
Abb. 4-25	Experiment und COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1	130
Abb. 4-26	Experiment und COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW2	130
Abb. 4-27	Experiment und COCOSYS-Rechnung mit altem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1	131
Abb. 4-28	Experiment und COCOSYS-Rechnung mit altem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW2.....	131
Abb. 4-29	Experiment und COCOSYS-Rechnung mit abgeschalteter Diffusion, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1	132
Abb. 4-30	THAI - TH9, COCOSYS-Nodalisierung und Kondensatstrompfade	135
Abb. 4-31	THAI TH9, Dampfeinspeiserate, Experiment und COCOSYS.....	137
Abb. 4-32	THAI TH9, Kühlleistung oberer Kühlmantel, Experiment und COCOSYS	137
Abb. 4-33	THAI TH9, Atmosphärendruck, Experiment und COCOSYS	138

Abb. 4-34	THAI TH9, Atmosphärentemperaturen, Experiment und COCOSYS	138
Abb. 4-35	THAI TH9, Temperaturdifferenzen zwischen der ungekühlten Behälterwand bei 5,6 m und 8,4 m und der gekühlten Wand bei 7 m, experimentelle Daten	141
Abb. 4-36	THAI TH9, relative Feuchte, Experiment und COCOSYS-Rechnungen.....	143
Abb. 4-37	THAI TH9, Wandtemperatur oberer Kühlmantel, Experiment und COCOSYS-Rechnungen	143
Abb. 4-38	THAI TH9, Wandtemperatur unterer Klöpperboden, Experiment und COCOSYS-Rechnungen	144
Abb. 4-39	THAI TH9, Verdampfungsrate unterer Klöpperboden, COCOSYS- Rechnungen	144
Abb. 4-40	THAI TH9, Verdampfungsrate an verschiedenen Strukturen, COCOSYS - Rechnung 3	145
Abb. 4-41	THAI TH9, Filmdicke an verschiedenen Strukturen, COCOSYS- Rechnung 3	145
Abb. 4-42	THAI TH9, Sumpfwassertemperaturen, Experiment und COCOSYS- Rechnungen	146
Abb. 4-43	Ansätze zur Berechnung der mittleren Temperatur	149
Abb. 4-44	In COCOSYS verwendete Plumeformel nach McCraffrey	151
Abb. 4-45	DIVA Versuchsanlage	152
Abb. 4-46	Schema des Ventilationssystems	153
Abb. 4-47	Simulation des Ventilationssystems mit COCOSYS	153
Abb. 4-48	Nodalisierung des Brandraums	154
Abb. 4-49	Nodalisierung mit Plumezonen	154
Abb. 4-50	Vergleich der berechneten Raumtemperaturen	156
Abb. 4-51	Temperaturprofil der maximalen Temperaturen.....	157
Abb. 4-52	Temperaturprofil bei 1500 s (stationäre Phase).....	157
Abb. 4-53	Vergleich der Gaskonzentrationen	158
Abb. 4-54	Vergleich der Entrainmentrate	159
Abb. 4-55	Schema des Ventilationssystems	161
Abb. 4-56	Simulation des Ventilationssystems mit COCOSYS	161
Abb. 4-57	Abbrandrate im SI-D3 Experiment (MLR)	162
Abb. 4-58	Vergleich der Temperaturen im Brandraum für Versuch SI-D3.....	163
Abb. 4-59	Vergleich der Gaskonzentrationen für Versuch SI-D3	164
Abb. 4-60	Verhalten des Ventilationssystems im Versuch SI-D3	165
Abb. 4-61	Vergleich der Rußkonzentrationen im Versuch SI-D3.....	166
Abb. 4-62	HCl-Deposition an Wandoberflächen.....	168

Abb. 4-63	HDR E42.2: Vergleich der Temperaturen im Brandraum	169
Abb. 4-64	HDR E42.2: Vergleich der Konzentrationen im Brandraum	170
Abb. 4-65	HDR E42.2: Vergleich der Konzentrationen im Flurbereich	170
Abb. 5-1	Änderung der Schnittstelle zwischen DRASYS und SPARC	175
Abb. 5-2	KKW Ignalina-2, Bruch eines Drucksammlers, Nodalisierung mit 22 Zonen.....	177
Abb. 5-3	Massenstrom der Gaskomponenten in Verbindung J3 und Kriterien für den SPARC Aufruf (alt = V2.3v0, neu = V2.4dev).....	179
Abb. 5-4	Aerosolmassenstrom durch Verbindung J3 und Kriterien für den SPARC Aufruf (alt = V2.3v0, neu = V2.4dev)	179
Abb. 5-5	KW Ignalina-2, Druckverlauf, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev).....	181
Abb. 5-6	KKW Ignalina-2, Effizienz der Aerosolrückhaltung, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)	181
Abb. 5-7	KKW Ignalina-2, Aerosolkonzentrationen, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)	182
Abb. 5-8	KKW Ignalina-2, Aerosolablagerung in ausgewählten Zonen, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev).....	182
Abb. 5-9	Versuchsaufbau für die POSEIDON Pool Scrubbing Experimente /GÜN 96/	185
Abb. 6-1	Geometrie der Experimente HYCOM01 und HYCOM02; dargestellt ist ein grobes CFX-Gitter	191
Abb. 6-2	Vergleich des Druckverlaufes für HYCOM01 zwischen Rechnung und Experiment in Abhängigkeit verschiedener A-Werte (A = 16...23, linke Seite) sowie für den Referenzwert A = 21 (rechte Seite).	196
Abb. 6-3	Vergleich des Druckverlaufes für HYCOM02 zwischen Rechnung und Experiment. In der rechten Abbildung wurde die Zeitachse der Simulation so verschoben, dass die Druckanstiege im Experiment und in der Simulation übereinander liegen	196
Abb. 7-1	RUT Versuchsanlage für den Versuch HYCOM01	210
Abb. 7-2	Nodalisierung der RUT Versuchsanlage für den Versuch HYCOM01	210
Abb. 7-3	Flammenfrontposition	211
Abb. 7-4	HDR-Versuchsanlage für den Versuch E12.3.2.....	212
Abb. 7-5	Druckverlauf in HDR E12.3.2.....	212
Abb. 7-6	Nodalisierung des Battelle Versuchscontainments für HX23	213
Abb. 7-7	Druck in allen Zonen	214

Abb. 7-8	Temperatur in allen Zonen	214
Abb. 7-9	Wasserstoffkonzentration in allen Zonen	215
Abb. 7-10	Schema der Kondensationsrohrsimulation durch ATM_VALV Verbindung plus INSERTION Option	220
Abb. 7-11	GKSS M1, Nodalisierung mit 4 Zonen	221
Abb. 7-12	GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Druck in Zonen R2-Break und D1-PSS	222
Abb. 7-13	GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Atmosphärentemperaturen in R2-Break und D1-PSS	223
Abb. 7-14	GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Massenstrom in Verbindung J1	223
Abb. 7-15:	Schnittdarstellung des Reaktordruckbehälters eines SWR	225
Abb. 7-16	Vereinfachter CESAR-Datensatz für einen SWR	227
Abb. 7-17	Struktur der CESAR-Nodalisierung für einen SWR	227
Abb. 7-18	Dampfmassenstrom (kg/s) zur Turbine als Funktion der Zeit (s)	228
Abb. 7-19	Interner Zirkulationsmassenstrom (kg/s) als Funktion der Zeit (s)	228
Abb. 7-20	Dampfvolumenanteile in den einzelnen Zonen als Funktion der Zeit (s)	229
Abb. 7-21	Blinde Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in RDB und Containment im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen	231
Abb. 7-22	Anbindung von LAVA an ASTEC (schematisch)	234
Abb. 7-23	Vergleich von mittlerer Dicke der Schmelze mit der im analytischen Ansatz berechneten Krustendicke für das Experiment ECOKATS-V1	235
Abb. 7-24	Vergleich der Annäherung mit dem analytischen Kriterium für die Bewegung der Ausbreitungsfront beim Experiment ECOKATS-V1	236
Abb. 7-25	Vergleich der Annäherung mit dem analytischen Kriterium für die von der Schmelze bedeckte Fläche beim Experiment ECOKATS-1	237
Abb. 7-26	ATLAS-Visualisierung des Druckes im Primarkreislauf eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor	241
Abb. 7-27	ATLAS-Visualisierung der Temperatur im Primarkreislauf eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor	241
Abb. 7-28	ATLAS-Visualisierung des Dampfgehaltes im Kühlkreislauf eines KONVOI 1300 MWe DWR	242
Abb. 7-29	ATLAS-Visualisierung der Kühlmitteltemperatur im Kühlkreislauf eines KONVOI 1300 MWe DWR	242
Abb. 7-30	Visualisierung der Kernkonfiguration einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER- 1000/-V320 Reaktor (t = 8104 s)	243

Abb. 7-31	Visualisierung der Kernzerstörung einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER-1000/-V320 Reaktor (t = 8104 s).....	244
Abb. 7-32	Visualisierung der Kernzerstörung einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER-1000/-V320 Reaktor (t = 13543 s).....	244
Abb. 7-33	ATLAS-Visualisierung des Dampfanteils in der Atmosphäre des Containments eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktors.....	246
Abb. 7-34	ATLAS-Visualisierung der Atmosphärentemperatur im Containment eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor	246
Abb. 7-35	MARCUS-Übersichtsdarstellung mit Kurzinfo über Anfragen zu ASTEC	256
Abb. 7-36	Eingabemaske für Problembeschreibung und Zusatzinformationen	257
Abb. 7-37	Eingabemaske zur Bereitstellung der Problemlösung (Action Card)	258
Abb. 8-1	Raumdruckverläufe	267
Abb. 8-2	Massenströme in Verbindung J1	267
Abb. 8-3	Geschwindigkeit in Verbindung J1	268
Abb. 8-4	Dämpfungsfunktionen für $\square D$	269
Abb. 8-5	Druckdifferenzverlauf über die Verbindung J1 in Abhängigkeit von der Dämpfung von $\square D$	270
Abb. 8-6	Ausschnitt aus der COCOSYS-Fehlerliste.....	293
Abb. 8-7	COCOSYS-Gesamtsystem	296

Tabellen

Tab. 2-1	Vergleich der pH-Modelle	4
Tab. 2-2	Bedingungen im Basisfall	5
Tab. 2-3	Temperatureffekt, Vergleich AREVA-Modell und MELCOR	7
Tab. 2-4	Effekt einzelner Elektrolyte auf den pH-Wert im Sumpf . Δ pH ist die Änderung des pH-Werts durch Weglassen bzw. Zugabe eines Elektrolyten	8
Tab. 2-5	Eckdaten der Auslegung von Iod-16 mit einem Temperaturanstieg	14
Tab. 2-6	Indizierung der Iodspezies.....	27
Tab. 3-1	Generische Stoffdaten der Schmelzetyphen.....	90
Tab. 3-2	Generische Stoffdaten der Betone	90
Tab. 3-3	MCCI-Experimente für die Ermittlung der Wärmeströme	90
Tab. 4-1	Fahrweise THAI TH10.....	123
Tab. 5-1	Zusammenstellung der experimentellen und der mit verschiedenen SPARC Versionen berechneten Dekontaminationsfaktoren für vier POSEIDON Experimente	186
Tab. 7-1	Vergleich der blinden COCOSYS-Ergebnisse mit den Experimenten FH01 und FH03 für die franz. P'4-Baureihe.....	231
Tab. 7-2	Vergleich der blinden COCOSYS-Ergebnisse mit den Experimenten KH01 und KH03 für die KONVOI-Baureihe.....	232
Tab. 7-3	Relative Fehler für die Prognose des Ausbreitungsergebnisses mit dem analytischen Kriterium in verschiedenen Experimenten	237
Tab. 7-4	Marcus Anfragen zu CPA	259
Tab. 8-1	EURSAFE Research Issue and Rationale for Selection	281

1 Einleitung

Umfassende Sicherheitsanalysen von Stöfallabläufen für Kernkraftwerke erfordern den Einsatz von Rechenprogrammen, die entsprechend dem jeweils aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik eine möglichst realitätsnahe Simulation - sogenannte 'best estimate'-Analysen - der Abläufe und der sich einstellenden Zustände erlauben. Diese Forderung wird sowohl für Auslegungsstörfälle als auch für auslegungsüberschreitende Stör- und Unfälle erhoben. Dabei stehen Analysen zur Beherrschung von Störfällen, zu Auswirkungen von Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes und zum Quellterm aus der Anlage in die Umgebung im Mittelpunkt des Interesses.

Solche umfassenden 'best estimate'-Analysen erfordern Analysewerkzeuge, welche nicht nur in der Lage sind, wichtige Einzelphänomene realitätsnah zu beschreiben, sondern insbesondere auch ihre Wechselwirkungen untereinander und das Gesamtverhalten der Anlage.

Zur Simulation der verschiedenen physikalisch-chemischen Vorgänge im Sicherheits-einschluss eines Kernkraftwerkes bei Unfällen (Störfälle mit Kernschmelzen) werden im Bereich der internationalen Reaktorsicherheitsforschung Rechenprogramme entwickelt und anhand verfügbarer Experimente validiert. Man unterscheidet zwischen mechanistischen Detailcodes zur Modellierung von Einzeleffekten, Codesystemen auf mechanistischer Basis, die auch Wechselwirkungen zwischen Phänomenen simulieren, und Integralcodes zur vereinfachten Simulation des Gesamtablaufs.

Im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung des BMWi werden hier mit der Entwicklung und der in einem Parallelvorhaben durchgeführten Validierung des Containment-Codesystems COCOSYS und des Integralcodes ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) die Analysewerkzeuge bereitgestellt, die für die umfassende Simulation von Stör- und Unfällen in Leichtwasserreaktoren notwendig sind (Abb. 1-1). Diese Rechenprogramme sind nicht nur in der Lage, wichtige Einzelphänomene realitätsnah zu beschreiben, sondern insbesondere auch deren Wechselwirkungen untereinander sowie das Gesamtverhalten der Anlagen.

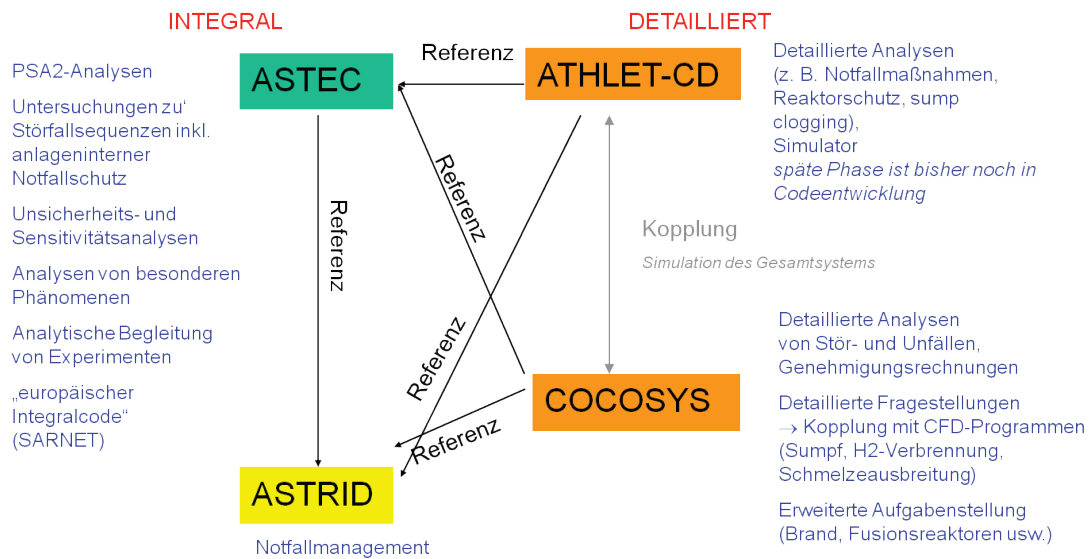


Abb. 1-1 Zielsetzung und Einsatz der GRS-Rechenprogramme

Mit COCOSYS sollen auf der Basis weitgehend mechanistischer Modelle alle wesentlichen Vorgänge und Zustände im Verlauf von Stör und Unfällen im Sicherheitsbehälter von Leichtwasserreaktoren simuliert werden, wobei abdeckend auch die Auslegungstörfälle berücksichtigt werden. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde COCOSYS gezielt weiterentwickelt, wobei die Simulation des Schmelzeverhaltens im Sicherheitsbehälter einen Schwerpunkt bildet.

Der Integralcode ASTEC zur Simulation des Gesamtablaufs schwerer Störfälle (Reaktorkühlkreislauf und Containment) auf der Basis teilweise z. B. gegenüber COCOSYS vereinfachter Modelle wird gemeinsam mit dem französischen Partner IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) entwickelt.

Das Verhalten des Reaktorkühlkreislaufs bei Betriebstransienten und Auslegungstörfällen sowie im auslegungsüberschreitenden Bereich wird mit Hilfe von ATHLET/ATHLET-CD simuliert.

In diesem Bericht werden die Entwicklungsarbeiten beschrieben, die im Rahmen dieses Vorhabens zu den beiden Rechenprogrammen COCOSYS und ASTEC durchgeführt worden sind, und es wird der erreichte Entwicklungsstand anhand zahlreicher Testrechnungen der Entwickler bewertet. Die Beschreibung der zahlreichen Einzelergebnisse orientiert sich an der Strukturierung des Arbeitsprogramms.

2 Erhöhung der Aussagesicherheit von Quelltermanalysen

2.1 pH-Wert-Berechnung

2.1.1 Vergleich von pH-Wert-Modellen

Für einen Einsatz in COCOSYS-AIM, dem Iodmodell in COCOSYS, wurden pH-Wert-Modelle überprüft und miteinander verglichen. Es standen zur Verfügung:

- alleinstehendes Modell von F. Funke /FUN 07/, auch als AREVA-Modell bezeichnet
- pH-Modell in MELCOR /GAU 05/
- Modell in den Iod-Rechenprogrammen IMOD/LIRIC von AECL (In der GRS existieren vom AECL-Modell nur das chemische Gleichungssystem und die Reaktionskonstanten. Es steht kein Quellcode zur Verfügung.)

In Tab. 2-1 sind die wesentlichsten Merkmale der drei Modelle gegenübergestellt. Die erfassten Substanzen (Elektrolyte), die den pH im Sumpf beeinflussen, sind eingetragen. Dabei wird das Wort „Sumpf“ im Weiteren im Wesentlichen für den Sumpf im Containment eines DWR genutzt. Eine Übertragung auf die Zustände in der Kondensationskammer eines SWR unter Unfallbedingungen erscheint möglich.

Im AREVA- und im MELCOR-Modell sind die Substanzen H_3BO_3 , Cs, HNO_3 und CO_2 modelliert. Im AREVA-Modell sind zusätzlich die im Normalbetrieb anfallenden Substanzen LiOH und NH_3 modelliert. Die im MELCOR-Modell zusätzlich enthaltenen Substanzen Na_3PO_4 und HCl sind für deutsche Reaktoren nicht relevant. In deutschen Reaktoren ist kein Sumpfwasser-Additiv (z. B. Na_3PO_4) zur Bindung von Iod vorgesehen. Auch ist in vielen deutschen Kernkraftwerken im Sicherheitsbehälter praktisch kein PVC mehr als Kabelisolierung, aus der beim Verbrennen Salzsäure (d. h. die wässrige Lösung des Chlorwasserstoffes HCl) entstehen kann, vorhanden. In jenen Anlagen, in denen noch PVC-Kabel verwendet werden, werden diese zunehmend von den Betreibern durch Kabel mit brandhemmenden Eigenschaften ersetzt /FUN 06/. Dadurch relativiert sich die Bedeutung von HCl in einem pH-Wert-Modell. Zu berücksichtigen ist auch, dass in Analysen von Kernschmelzunfällen in der Regel keine zusätzlichen Brandrechnungen durchgeführt werden.

Tab. 2-1 Vergleich der pH-Modelle

			AREVA	MELCOR	AECL	Anmerkungen
Art des Modells			alleinstehend	gekoppelt in MELCOR	nicht programmiert	AECL-Modell aus LIRIC und IMOD
pH-Berechnung			Gleichgewicht	Gleichgewicht	kinetisch	
Elektrolyt im Sumpf	Quelle	Effekt auf pH				
H₃BO₃ Borsäure	Primärkreis bei Normalbetrieb	↓	x	x		
LiOH Lithiumhydroxid	Primärkreis bei Normalbetrieb	↑	x			
NH₃ Ammoniak	Primärkreis bei Normalbetrieb	↑	x			
Cs⁺ Cäsium	Spaltprodukt	↑	x (CsOH)	x (CsOH und CsI)		
HNO₃ Salpetersäure	Radiolyse der Luft	↓	x	x	x	
CO₂ Kohlendioxid	MCCI	↓	x	x		
Na₃PO₄ Natriumphosphat	Sumpfwasser-Additiv (Buffer), Störfall-Maßnahme	↑		x		Keine Sumpfwasser-Additive in deutschen Anlagen
HCl	Salzsäure, schwerer Störfall, Kabelbrand	↓		x		PVC-haltiges Kabelmaterial nur in einigen deutschen Anlagen
Organisches Material	Aus Dekont-Anstrich, bildet CO ₂ (w)	↓			x	

Das AECL-Modell berücksichtigt nur die zwei Substanzen Salpetersäure und organisches Material im Sumpf. Es ist das einzige der untersuchten Modelle, das den pH-Wert kinetisch berechnet. Wegen der vergleichsweise langsam ablaufenden Iod-Reaktion im Sumpfwasser scheint diese aufwändige Berechnung des pH-Werts nicht erforderlich. Eine Integration ist aber für Substanzen erforderlich, deren Konzentration sich im Sumpf ändert. Dies gilt für organisches Material und Salpetersäure. Beide Prozesse hängen von der Dosisleistung ab und können durch eine entsprechende Erweiterung in AIM simuliert werden.

Da das AECL-Modell weder Borsäure noch Spaltprodukte berücksichtigt, ist es für einen Einbau in COCOSYS-AIM nicht geeignet. Es ist aber denkbar, das Teilmodell zum Auslaugen von organischem Material aus dem Farbanstrich und zur Bildung von CO₂ im Sumpfwasser in ein neues COCOSYS pH-Wert-Modell aufzunehmen.

Zum Vergleich der pH-Wert-Modelle von AREVA und in MELCOR wurden zuerst Rechnungen zu dem so genannten Basisfall gemacht. Danach wurden der Temperatureffekt und die Effekte einzelner Elektrolyte auf den pH-Wert untersucht.

Basisfall

Es wurde ein Reaktorsumpf in einen DWR-Containment unter Unfallbedingungen mit Schmelze-Beton-Wechselwirkung angenommen (Tab. 2-2). Um die Auswirkung der Elektrolyte auf den pH-Wert im Sumpf detailliert verfolgen zu können, wurden sie in der MELCOR-Rechnung nacheinander eingespeist. Die Reihenfolge entspricht in etwa jener in einem Reaktorunfall. Mit dem AREVA-Modell wurde der pH-Wert jeweils nach Ende der Zugabe eines Elektrolyten bestimmt.

Tab. 2-2 Bedingungen im Basisfall

Sumpfvolumen	2 000 m³
Containmentvolumen	70 000 m ³
Temperatur	100 °C
Druck	1,06 bar

Abb. 2-1 zeigt den berechneten pH-Verlauf für den Basisfall. Die Abweichungen der pH-Werte in den einzelnen Phasen sind berechnet.

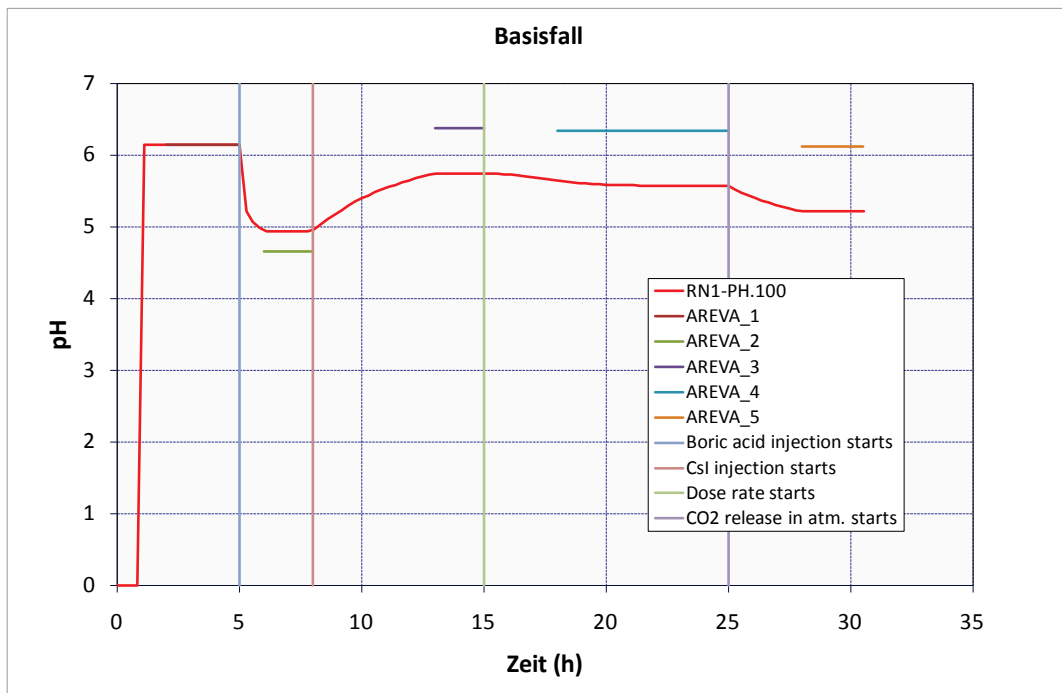


Abb. 2-1 pH-Verlauf im Basisfall mit MELCOR (durchgezogene rote Linie) und dem AREVA-Modell

Der Neutralpunkt bei 100 °C stimmt in beiden Modellen gut überein (AREVA: $pH_N = 6,144$; MELCOR: $pH_N = 6,138$). Der pH-Wert im Sumpf nach Zugabe aller Elektrolyte am Endes des Falls ($t = 30$ h) beträgt:

Basisfall: pH (Ende) = 6,1 (AREVA)
 pH (Ende) = 5,2 (MELCOR)

MELCOR berechnet den Sumpf deutlich saurer als das AREVA-Modell. Im Wesentlichen trägt dazu die unterschiedlich berechnete Wirkung des Spaltprodukts Cs bei.

Basisfall: ΔpH (durch Cs-Zugabe) = - 1,71 (AREVA)
 ΔpH (durch Cs-Zugabe) = - 0,8 (MELCOR)

Es ist zu berücksichtigen, dass Cs in den Rechnungen in unterschiedlicher Form in den Sumpf eingespeist wurde.

AREVA-Modell: Cs als CsOH
MELCOR: Cs als CsI oder CsOH

Da das Kerninventar etwa 10 Mal so viel Cäsium als Iod enthält, wird im AREVA-Modell angenommen, dass Cs im Sumpf nur als CsOH vorliegt. Die Nichtberücksichtigung von CsI ist keine wesentliche Einschränkung.

Temperatureffekt

Neben dem Basisfall mit $T_{\text{Sumpf}} = 100 \text{ °C}$ wurden Rechnungen mit $T_{\text{Sumpf}} = 50 \text{ °C}$ und $T_{\text{Sumpf}} = 150 \text{ °C}$ durchgeführt.

Am Ende der Rechnung mit $T = 50 \text{ °C}$ ist mit MELCOR der Sumpf um 2,7 pH-Punkte saurer als der mit dem AREVA-Modell berechnet. Bei $T = 150 \text{ °C}$ beträgt der Unterschied sogar 3,0 Punkte. Neben dem unterschiedlichen Einfluss von Cs auf den pH-Wert wird bei höherer und niedriger Temperatur ein stark unterschiedlicher Einfluss von HNO_3 deutlich (Tab. 2-3).

Tab. 2-3 Temperatureffekt, Vergleich AREVA-Modell und MELCOR

Temperatur °C		HNO_3 , kg	pH	$\Delta\text{pH} (\text{HNO}_3)$	Anmerkungen
50 (p = 1,06 bar)	AREVA MELCOR	18,3 65,0	6,0 (6,1) 3,3	gering - 2,4	Werte in Klammer: frühere AREVA- Rechnungen /FUN 07/ *) MELCOR: wenig HNO_3 wegen th/hy-Bedingungen
100 (Basisfall) (p = 1,06 bar)	AREVA MELCOR	18,3 3,2*	6,1 (6,2) 5,2	- 0,031 - 0,14	
150 (p = 5,88 bar)	AREVA MELCOR	18,3 52,6	6,5 (6,3) 3,5	- 0,03 - 2,2	

In der MELCOR-Rechnung beträgt die HNO_3 -Menge im Sumpf nur 3,2 kg, da die Stickstoffmenge wegen des hohen Dampfanteils im Containment gering ist. Bei $T = 50$ bzw. 150 °C beträgt sie 65 kg bzw. 52,6 kg. Im AREVA-Modell wird keine thermohydraulische Rechnung durchgeführt und es wird angenommen, dass HNO_3 nur durch Sumpfradiolyse entsteht. Da Wassermasse und Dosis gleich bleiben, ist die Salpetersäuremenge in allen drei Fällen 18,3 kg.

Die offenen Punkte bezüglich HNO_3 sind:

- Die saure Wirkung von HNO_3 ist mit dem AREVA-Modell wesentlich geringer als mit MELCOR.
- Im AREVA-Modell wird die HNO_3 -Bildung in der Atmosphäre nicht explizit erfasst. Es ist nur HNO_3 im Sumpf pauschal bilanziert. Tatsächlich wird HNO_3 im Wesentlichen in der Gasphase gebildet und gelangt über den Massentransfer und Drainage von Kondensat in den Sumpf. In MELCOR ist dieser Prozess modelliert.

Effekte einzelner Elektrolyte

Um den Effekt einzelner Elektrolyte auf den pH-Wert des Sumpfes zu quantifizieren, wurde die Basisrechnung unter Nullsetzen der Konzentration der jeweils betrachteten Elektrolyten wiederholt. Diese Rechnungen wurden sowohl mit dem AREVA-Modell als auch mit MELCOR durchgeführt (Tab. 2-4). In der Tabelle sind auch Ergebnisse vergleichbarer Rechnungen, die von AREVA früher durchgeführt wurden /FUN 07/, eingetragen. Die pH-Wert-Unterschiede im Fall „ohne Cs“ sind auf die Einspeisung verschiedener Cs-Spezies zurückzuführen. In der Rechnung mit dem AREVA-Modell wird nur CsOH und in der MELCOR-Rechnung nur CsI eingespeist. Die starke alkalische Wirkung von CsOH ist auf OH⁻ zurückzuführen.

Tab. 2-4 Effekt einzelner Elektrolyte auf den pH-Wert im Sumpf. Δ pH ist die Änderung des pH-Werts durch Weglassen bzw. Zugabe eines Elektrolyten

Fall	pH-Wert						Anmerkungen
	MELCOR		AREVA-Modell (Rechnung hier)		AREVA-Modell (frühere Rg. /FUN 07/)		
	pH	Δ pH	pH	Δ pH	pH	Δ pH	
Basisfall	5,2	-	6,1	-	-	-	Werte in Klammer: frühere AREVA-Rechnung; Fall weicht ab von Basisfall, es sind daher nur relative Änderungen vergleichbar (s. Text)
ohne Cs	4,5	- 0,7	4,1	- 2,0	(6,6 -> 6,2)	- 0,4	
ohne HNO₃	5,4	0,2	6,1	0	(6,2 -> 6,2)	0	
ohne CO₂	5,6	0,4	6,3	0,2	(6,1 -> 6,2)	0,1	
ohne H₃BO₃	5,4	0,7	6,5	0,4			
mit LiOH	-	-	6,3	0,2			5 ppm
mit NH₃	-	-	6,1	-			1 ppm

Schlussfolgerungen

Im Hinblick auf einen Einbau in COCOSYS wurden drei zur Verfügung stehende pH-Wert-Modelle für den Reaktorsumpf untersucht

- alleinstehendes AREVA-Modell
- Modell in MELCOR
- AECL-Modell

Das AECL-Modell scheidet für einen Einbau in COCOSYS unter anderem deswegen aus, weil keine Borsäure und keine Spaltprodukte (Cs) simuliert werden. Das Teilmodell zum Auslaugen von organischem Material aus dem Dekontaminationsanstrich im Sumpf ist in den anderen beiden untersuchten Modellen nicht enthalten und könnte aus dem AECL-Modell übernommen werden.

Die durchgeführten Vergleichsrechnungen zwischen dem AREVA-Modell und MELCOR zeigen Folgendes:

- Der pH-Neutralpunkt wird von beiden Modellen in guter Übereinstimmung berechnet.
- Die Abweichung in der Wirkung von Borsäure bzw. CO_2 auf den pH sind moderat (0,2 pH-Punkte).
- Die Abweichung in der Wirkung von Cs und HNO_3 auf den pH sind stark (≥ 2 pH-Punkte). Die Abweichung bei Cs ist auf unterschiedliche Cs-Species (CsOH und CsI) zurückzuführen.
- Im AREVA-Modell wird die HNO_3 -Bildung nur im Sumpf berücksichtigt (Beahm-Modell). Realitätsnäher ist die Simulation der HNO_3 -Bildung in MELCOR. Das in der Atmosphäre gebildete HNO_3 wird über Massentransfer und Drainage in den Sumpf transportiert.

Das AREVA-Modell ist bereits ein alleinstehendes Programm und ist prinzipiell für den Einbau in COCOSYS geeignet. Es kann unmittelbar in COCOSYS als Subroutine eingebaut werden. Es müssen aber noch folgende Punkte geklärt bzw. folgende Arbeiten durchgeführt werden:

- Überprüfung und ggf. Korrektur der möglicherweise zu starken Wirkung von Cs auf den pH-Wert.
- Überprüfung und ggf. Korrektur der möglicherweise zu geringen Wirkung von HNO_3 auf den pH-Wert.
- Erweiterung des Modells der HNO_3 -Bildung auf Radiolyse in der Atmosphäre.
- Ersetzen der zu stark vereinfachten Thermohydraulik-Rechnung durch COCOSYS-Größen (T_{Aim} , T_{W} , ρ_{W} , CO_2 -Massentransfer, etc.).

- Überprüfung einer Übernahme des Teils für organische Säuren aus dem AECL-Modell. Die Säuren bilden CO_2 im Sumpf. CO_2 wird im AREVA-Modell bereits berücksichtigt.

Eine punktuelle Überprüfung des AREVA-Modells für die Wirkung von Salpetersäure und Cäsium auf den Sumpf-pH könnte anhand einfacher Laborversuche erfolgen.

Eine Erweiterung des AREVA-Modells um das AECL-Modell für Auslaugen von organischem Material aus dem Dekontaminationsanstrich im Sumpf muss noch detailliert geprüft werden. Im Vordergrund steht dabei der Einfluss von organischen Säuren auf den Sumpf-pH. Gegebenenfalls wird das AREVA-Modell entsprechend erweitert.

2.2 Iodverhalten

Das Iodmodell AIM wird seit vielen Jahren für die Simulation des Iodtransports und des Iodverhaltens in Mehrraumgeometrien von der GRS entwickelt. AIM basiert ursprünglich auf dem Rechencode IMPAIR-3. AIM ist nur im Rahmen von COCOSYS anwendbar. In AIM wurden auch Einzelmodelle integriert, die in anderen Vorhaben bzw. von anderen Organisationen bereit gestellt worden sind. Ausgewählte Einzelmodelle werden durch die GRS in AIM eingebaut und anhand von Versuchsberechnungen bewertet. Eine Vielzahl von Weiterentwicklungen resultierte in der Version AIM-F2, der Vorgängerversion von AIM-3. Die neuesten Entwicklungen, die hauptsächlich aus den Erkenntnissen der Iod-Versuche in der THAI-Anlage und aus anderen internationalen Projekten entstammten, liegen in der aktuellen Version AIM-3 vor [/WEB 09/](#).

In diesem Vorhaben wurden die Modelle zum Iodverhalten in COCOSYS-AIM auf der Basis von Iodversuchen in der THAI-Anlage zu den Themen:

- Iod/Ozon-Reaktion
- Iod/Stahl-Reaktion
- Iod/Farbe-Reaktion

verbessert bzw. vervollständigt.

Die Notwendigkeit der Iod/Stahl-Versuche im Versuchsprogramm zu den THAI-Versuchen (Phase III, Vorhaben 1501325) hatte man erst aufgrund der Auswertung der

Iod-Mehrraumversuche erkannt, welche gezeigt hat, dass molekulares Iod (I_2) mit dem Stahl der Behälterwand reagiert /WEB 06/. Diese Reaktion war bisher in AIM nicht modelliert.

Alle Iodversuche wurden mit COCOSYS-AIM-Rechnungen (als Auslegungs-, Voraus- und/oder Nachrechnung) begleitet. Parallel dazu wurde die Modellierung der chemischen Reaktionen und, wo erforderlich, deren Wechselwirkung mit Thermohydraulik und Aerosolverhalten erweitert und verbessert.

2.2.1 Iod/Ozon-Reaktion

Bei der Iod/Ozon-Reaktion wird flüchtiges Iod in der Gasphase unter Strahlungseinfluss in ein feindisperses IO_x -Aerosol umgewandelt. Solche Reaktionen haben einen großen Einfluss auf den Quellterm. In COCOSYS wird dieser Einfluss stellvertretend durch die Berücksichtigung der Iod/Ozon-Reaktion behandelt, obwohl es noch weitere Radiolyseprodukte gibt, die oxidierend auf das Iod wirken. Obwohl in AIM und anderen Iodcodes modelliert, wurde die Iod/Ozon-Reaktion in Anwendungsrechnungen meist nicht berücksichtigt, da eine Validierung und aerosolphysikalische Daten zum IO_x fehlten.

In den THAI-Iodversuchen Iod-13 und Iod-14 konnten erstmals die aerosolphysikalischen Eigenschaften des IO_x -Aerosols präzise gemessen werden. Unter anderem führte die Information dazu, dass die Maypack-Auswertung aller PHÉBUS-Versuche durch IRSN komplett überarbeitet wurde. Mit Hilfe der Erfahrung aus THAI konnte in den PHÉBUS-Versuchen FPT1, FPT2 und FPT3 das IO_x -Aerosol erstmals quantifiziert werden. Diese Ergebnisse wurden in Vergleichsrechnungen mit ASTEC und COCOSYS zu FPT1 berücksichtigt.

In Abb. 2-2 sind die mit COCOSYS-AIM gerechneten und gemessenen Konzentrationen von CsI -Aerosol und IO_x -Aerosol in FPT1 dargestellt. Die IO_x -Partikelgrößenverteilung, die in PHÉBUS nicht gemessen wurde, wurde aus den THAI-Versuchen übernommen. Der gerechnete Konzentrationsverlauf stimmt gut mit den Maypack-Messungen und der Filtermessung bei $t = 2,26 \cdot 10^5$ s überein.

PHEBUS FPT1, ASTEC V1.3.2 and COCOSYS V2.4, x/Q, Spt08

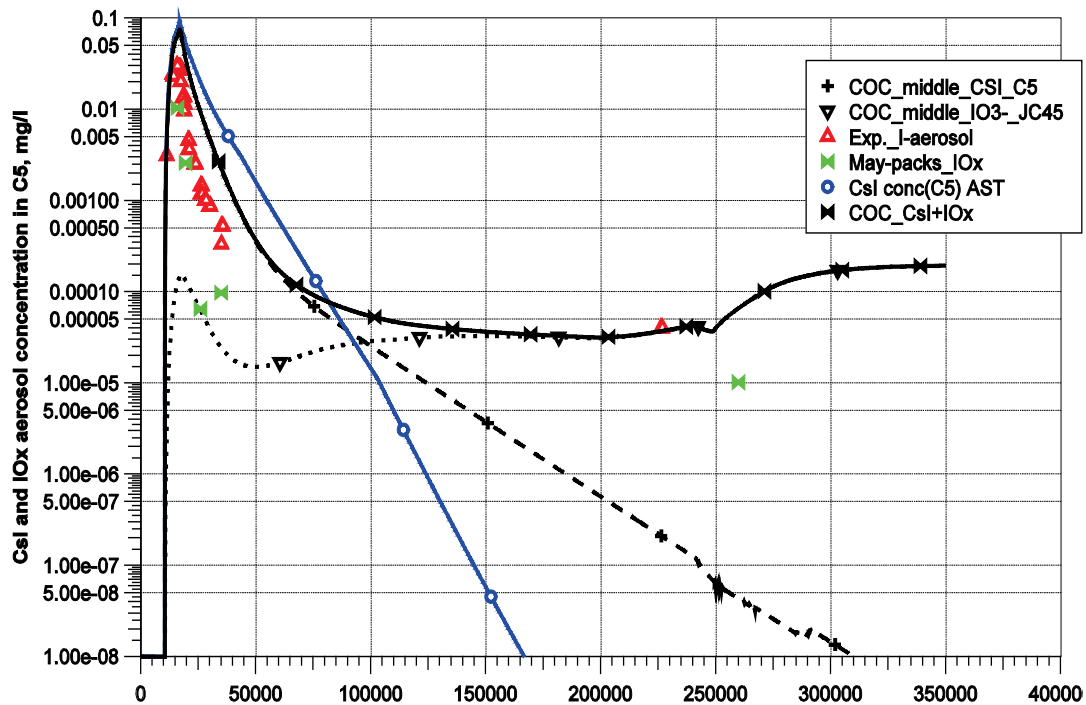


Abb. 2-2 PHÉBUS FPT1; Gerechnete und gemessene Csl- und IO_x-Aerosol-konzentration

Der in AIM-F2 nicht explizit berücksichtigte natürliche Abbau von O₃ in der Atmosphäre wurde durch einen einfach exponentiellen Ansatz mit vorzugebender Halbwertszeit modelliert.

$$\frac{d [O_3]}{dt} = S - \frac{[O_3] \cdot \ln 2}{HWZ}$$

[O₃] Ozonkonzentration in der Gasphase, mol/l

HWZ Halbwertszeit für die natürliche Zersetzung von O₃, s

S O₃-Quelle, mol/(l·s)

Eine große Unsicherheit im Iod/Ozon-Modell stellt nach wie vor die O₃-Bildung dar. COCOSYS-Rechnungen zu PHÉBUS FPT1 zeigen, dass die O₃-Bildung von AIM stark überschätzt wird. Es soll daher ein von AREVA entwickeltes verbessertes Modell für den natürlichen Abbau von O₃, das auch die Zersetzung an Oberflächen berücksichtigt, in AIM integriert werden. Weitere Unsicherheiten verbleiben aufgrund des nur stellver-

tretenden Charakters des Ozons im Hinblick auf mögliche Oxidationsreaktionen zwischen Iod und Radiolyseprodukten.

2.2.2 Iod/Stahl-Reaktion

Auf Stahloberflächen abgelagertes I_2 reagiert langsam zu nicht flüchtigem Eiseniodid (FeI_2). Diese Reaktion ist schon länger bekannt und wurde in Laborversuchen vor allem in Kanada und qualitativ auch bei AREVA untersucht. Auch in einigen THAI-Iodversuchen wurde die Reaktion beobachtet, konnte aber nur grob quantifiziert werden. Ein Teil des auf den Stahloberflächen abgelagerten I_2 war bei Temperaturerhöhungen nicht mehr wiederfreisetzbare. Im Iodmodell AIM-F2 ist diese Reaktion bisher nicht berücksichtigt, was zu erheblichen Unsicherheiten bei der Auswertung der durchgeführten Iodversuche im THAI-Behälter führte.

Die Modellierung der Iod/Stahl-Reaktion ist von Bedeutung für:

- die präzise Auswertung bereits durchgeführter und zukünftiger Iodversuche im THAI-Behälter,
- die Analyse von Iodversuchen anderer Programme, wie Phebus und EPICUR und
- die Berechnung der Iodablagerung auf RMI-Material (reflecting metal insulation).

RMI ist eine neuartige Wärmeisolation aus Stahl, die alternativ zu faserförmigem Isoliermaterial in einigen Ländern (nicht Deutschland) eingesetzt wird. Damit soll das 'sump clogging'-Problem reduziert werden.

Ziel der Iod/Stahl-Versuche war vor allem die zeitabhängige Bestimmung der Menge von nicht-flüchtigem Iod, wie FeI_2 , auf den Stahloberflächen in Abhängigkeit von Feuchte und Temperatur. In Laborversuchen kann das auf Oberflächen gebundene Iod direkt gemessen werden. Dies ist im THAI-Behälter nicht möglich. Es wurde daher eine neue Methode angewendet, bei der die FeI_2 -Bildung indirekt durch die Abnahme der I_2 -Konzentration im Behälter bestimmt wird.

Auf der Stahloberfläche abgelagertes I_2 steht bereits kurze Zeit nach Einspeisung im Gleichgewicht mit der I_2 -Konzentration in der Atmosphäre. Reagiert abgelagertes I_2 zu

Fel₂, wird das Gleichgewicht Atmosphäre/Wand gestört, was zu einer weiteren I₂-Ablagerung führt. Mit zunehmender Fel₂-Beladung der Oberfläche nimmt daher die I₂-Konzentration in der Atmosphäre kontinuierlich ab. Aus der Konzentrationsabnahme wird mit COCOSYS-AIM dann die Reaktionskonstante k(Fel₂) bestimmt.

Auslegung Iod-16

Für die Auslegung des ersten Versuchs Iod-16 wurde eine Fahrweise mit einem Temperaturanstieg gewählt. Bei dem Temperaturanstieg soll ein Großteil des abgelagerten und nicht in Fel₂ umgewandelten I₂ wieder freigesetzt werden. Die Eckdaten der Fahrweise, die in der THAI-Gruppe erarbeitet wurde, sind in Tab. 2-5 zusammengefasst.

Tab. 2-5 Eckdaten der Auslegung von Iod-16 mit einem Temperaturanstieg

Versuchsphasen	Zeit, h	Thermohydraulische Bedingungen			Iod - Einspei- sung
		Temperatur, °C	Rel. Feuchte, %	Einspei- sungen	
Konditionierung	t = 0	70	ca. 10		
Messphase A	0 bis 12	70	ca. 10		ab t= 0: 1,0 g I ₂
Messphase B	12 bis 21	> 70	10 → 90	Dampf	
Messphase C	21 bis 36	> 70→120	90	Wärme, Dampf	
Abkühlen, Bergen der Coupons, Reinigen des Be- hälters	t > 36				

Für die Auslegungsrechnung wurde die Fel₂-Reaktion provisorisch anhand der Erfahrung aus den Mehrraumversuchen Iod-10, -11 und -12 abgeleitet. Eine Temperaturabhängigkeit der Reaktion wurde nicht berücksichtigt. Stark vereinfacht wurde angenommen, dass die Reaktion bei trockener Atmosphäre (rF < 30 %) nicht abläuft und nur bei rF ≥ 30 % Fel₂ gebildet wird.

Die Abb. 2-3 und Abb. 2-4 zeigen die COCOSYS-AIM-Ergebnisse mit und ohne Berücksichtigung der Fel₂-Reaktion. Die Fel₂-Reaktionsgeschwindigkeit kann bei gegebener Fahrweise nur aus dem Abfall der I₂ (g)-Konzentration hergeleitet werden. Da bei hohen Temperaturen die I₂-Gleichgewichtskonzentration an der Wand geringer ist als bei niedrigen Temperaturen ist, ist bei T = 120 °C der I₂(g)-Abfall infolge der Fel₂-Reaktion deutlich geringer als bei T = 70 °C (Abb. 2-4).

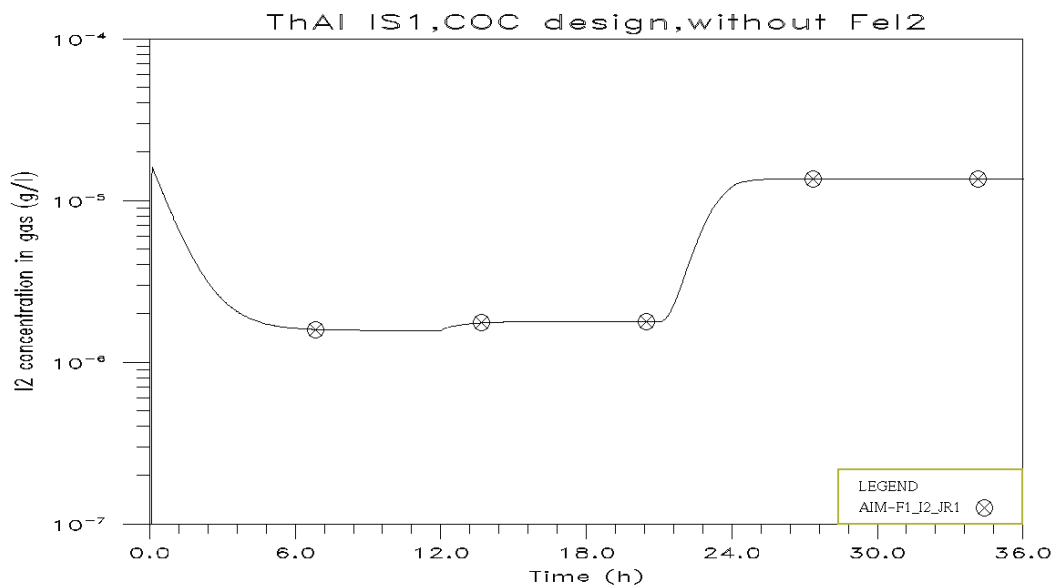


Abb. 2-3 Auslegung Iod-16, ohne FeI₂-Reaktion, I₂-Konzentration im Gas

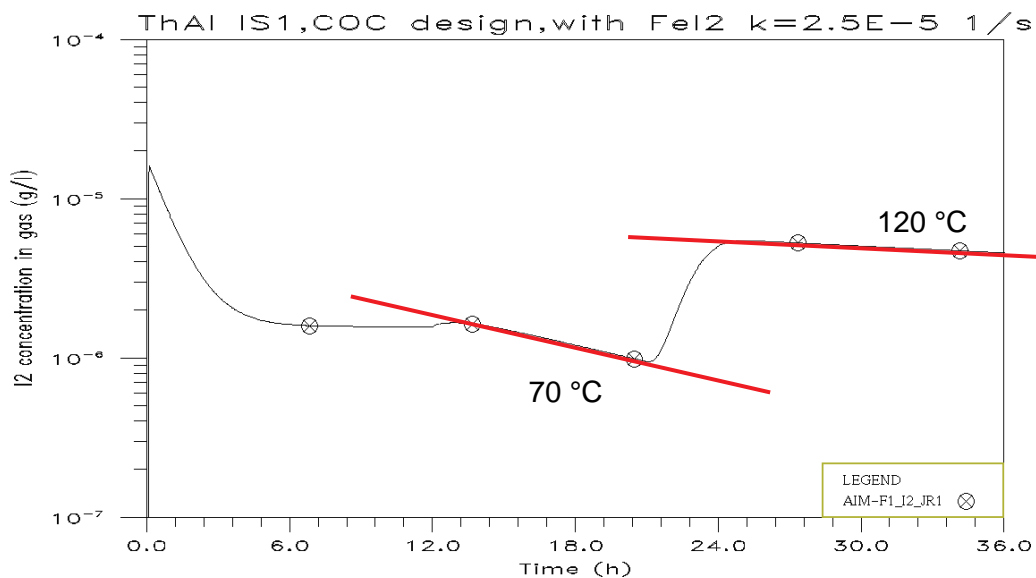


Abb. 2-4 Auslegung Iod-16, mit FeI₂-Reaktion, I₂-Konzentration im Gas. Bei niedrigen Temperaturen ist die effektive FeI₂-Bildung stärker als bei hohen

Die wesentlichsten Konsequenzen aus der durchgeführten Auslegungsrechnung sind:

- Die I₂ -> FeI₂-Reaktion läuft relativ langsam ab. Für eine präzise Messung sind daher lange Versuchsphasen (8 h) mit konstanten thermohydraulischen Bedingungen erforderlich.

- Eine direkte Temperaturabhängigkeit der Reaktion wurde in THAI bisher nicht beobachtet. Dies ist auch schwer, da das I_2 -Gleichgewicht zwischen Gas und Wand stark temperaturabhängig ist. Die auf der Stahlwand abgelagerte I_2 -Menge nimmt mit abnehmender Temperatur stark zu. Damit wächst die pro Zeiteinheit gebildete FeI_2 -Menge auch stark an. Dies führt dazu, dass bei niedrigen Temperaturen und gleicher I_2 -Menge infolge der FeI_2 -Reaktion die $I_2(g)$ -Konzentration im Behälter deutlich stärker abnimmt als bei hohen Temperaturen.
- In jeder Versuchsphase ist eine gleichmäßige I_2 -Belegung der Behälterwand notwendig. Dies erfordert eine gut durchmischte Behälteratmosphäre und einheitliche Wandtemperaturen.
- Die Reaktionsgeschwindigkeit kann im Wesentlichen nur indirekt aus dem $I_2(g)$ -Konzentrationsverlauf bestimmt werden. Damit sind einige Unsicherheiten verbunden. Diese lassen sich durch eine zusätzliche, direkte Messung von FeI_2 auf Coupons reduzieren. Neben dem beheizbaren Coupon mit Sondenmessung sollten auch bergbare Coupons (teilweise mit künstlich gealterter Oberfläche) eingesetzt werden.
- Für **Iod-16** ist die Fahrweise mit einem Temperaturanstieg und drei Versuchsphasen prinzipiell geeignet. Sie kann durch Änderung der Längen der einzelnen Phasen noch optimiert werden. Die durch die FeI_2 -Reaktion deutlich reduzierte I_2 -Wiederfreisetzung wird nach der Temperaturerhöhung in der letzten Phase gemessen.

Die Temperatur und Feuchteabhängigkeit der FeI_2 -Reaktion wurden in den Versuchen Iod-16 und Iod-18 gemessen. Die erstellte Korrelation, die die Feuchteabhängigkeit beschreibt, ist in Abb. 2-5 dargestellt.

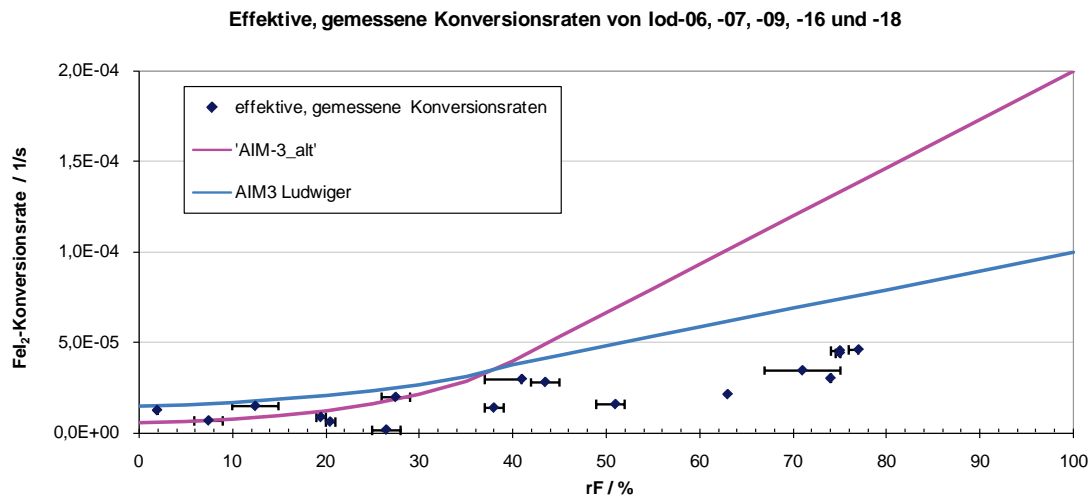


Abb. 2-5 Effektive gemessene Konversionsraten von abgelagertem I₂ in Eiseniodid (FeI₂) im THAI-Iodversuch

Die gemessenen "effektiven" Konversionsraten beinhalten implizit die I₂-Ablagerung auf der Stahloberfläche. Sie sind daher niedriger als die für das Modell erforderlichen "reinen" Konversionsraten.

FeI₂ kann mit dem Luftsauerstoff wieder zu flüchtigem Iod reagieren. Diese Reaktion ist langsam und wurde unter THAI-Bedingungen erst ein Mal gemessen. In AIM wird diese Rückreaktion zurzeit nur implizit berücksichtigt.

Im Rahmen des OECD-BIP-Vorhabens (Behaviour of Iodine Project) wird die I₂-Ablagerung und Resuspension auf einer THAI-Stahlprobe gemessen werden. Es werden auch Daten für die Rückreaktion von FeI₂ in I₂ erwartet.

Die GRS-Auswertungen der Iod/Stahl-, aber auch der Iod/Farbe-Versuche wurden von AREVA noch verfeinert /LAN 08/. Dafür wurden AREVA die COCOSYS-AIM Eingabedatensätze zur Verfügung gestellt. Es wurden einige Reaktionskonstanten modifiziert und diese auch für Wiederholungsrechnungen früherer Versuche eingesetzt. Die "verfeinerten" Reaktionskonstanten werden schließlich in die neue Version AIM-3 übernommen.

Fel₂-Konversion in Iod-12

Die Auswirkung der Modellierung der Fel₂-Konversion ist anhand des Mehrraumversuchs Iod-12 in Abb. 2-6 dargestellt. Die gerechneten I₂(g)-Konzentrationen hat mit Berücksichtigung der Konversion eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten.

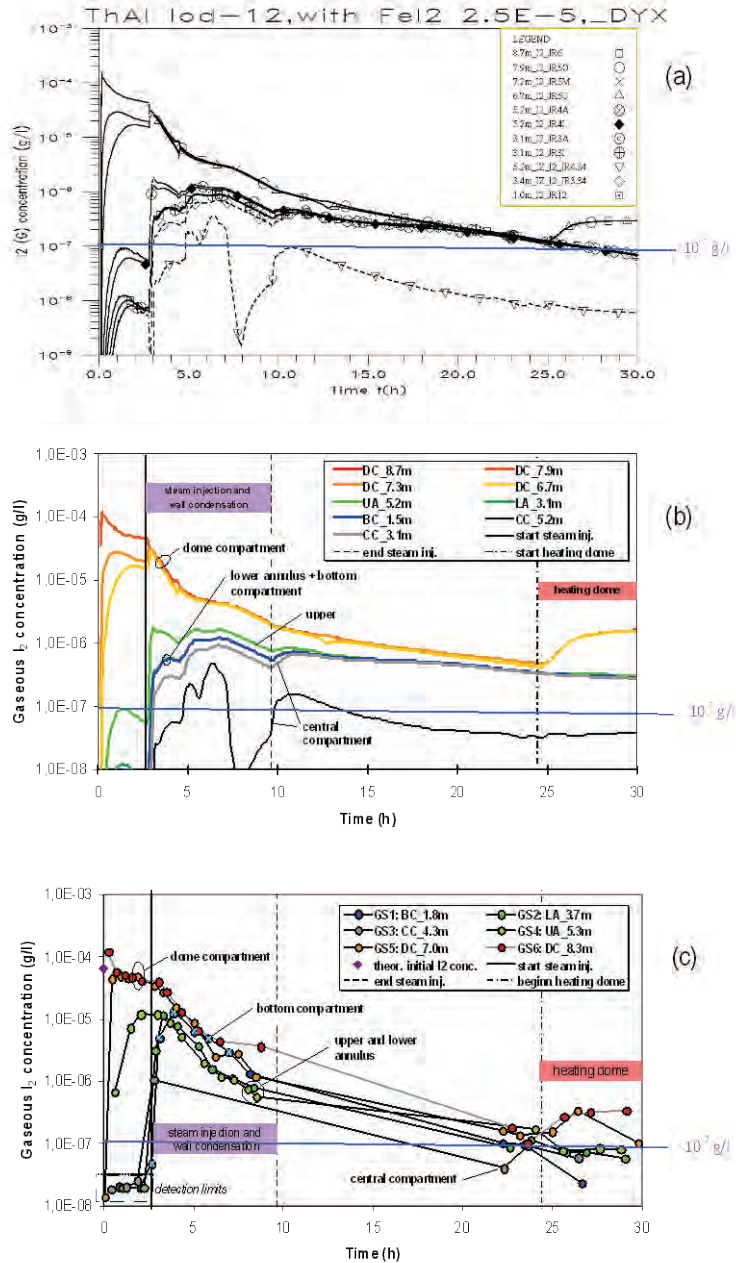


Abb. 2-6: THAI Iod-12; Mit COCOSYS-AIM gerechnete I₂-Konzentration im Gas mit (a) und ohne FeI₂-Konversion (b) sowie Messwerte (c)

2.2.3 Iod/Farbe-Reaktion

Mit AIM-F2 wird die I_2 -Ablagerung auf dem Dekontaminationsanstrich (Farbe) deutlich überschätzt. Auch kann prinzipiell bei genügend hohen Oberflächentemperaturen das gesamte abgelagerte I_2 in der Rechnung wieder freigesetzt werden.

Auslegung Iod-15

Zu Iod-15 wurden zwei Auslegungsrechnungen mit einer Mehrraum-Nodalisierung des THAI-Behälters durchgeführt. Schwerpunkt der Untersuchung war der Einfluss der schwachen Konvektionsströmung auf die lokale I_2 -Ablagerung. Die I_2 -haltige Atmosphäre war sowohl den Farbflächen als auch der Stahlwand ausgesetzt. Da die I_2 -Ablagerung auf Farbe wesentlich schneller als auf Stahl erfolgt, bestand die Gefahr einer inhomogenen I_2 -Ablagerung auf den über den ganzen Behälter verteilten Farbflächen. Eine solche Inhomogenität hätte die Auswertung des Versuches erschweren oder gar unmöglich gemacht.

Die Rechnung wurde mit der Anwenderversion COCOSYS V2.1v3 und dem integrierten Iodmodell AIM-F2 durchgeführt. Die Nodalisierung ist in Abb. 2-7 wiedergegeben. In jeder Zonen-Ebene hängen 8 Bleche mit zusammen 4 m^2 Farbe, somit insgesamt 20 m^2 . Das Strömungsmuster im THAI-Behälter wurde axialsymmetrisch angenommen. Die Atmosphärenströmung verläuft in der Mitte des Behälters von der Kuppel in den Sumpfraum und streicht von dort an den warmen Wänden wieder nach oben. Sie wird in der Rechnung mit Hilfe eines fiktiven Gebläses vorgegeben.

Die Atmosphärentemperatur beträgt 100 °C und bleibt im ganzen Versuch konstant. Die relative Feuchte wird in den Rechnungen mit 70% vorgegeben. Ab $t = 0$ wird $2,5 \text{ g}$ molekulares Iod in 30 s in den Kuppelraum eingespeist.

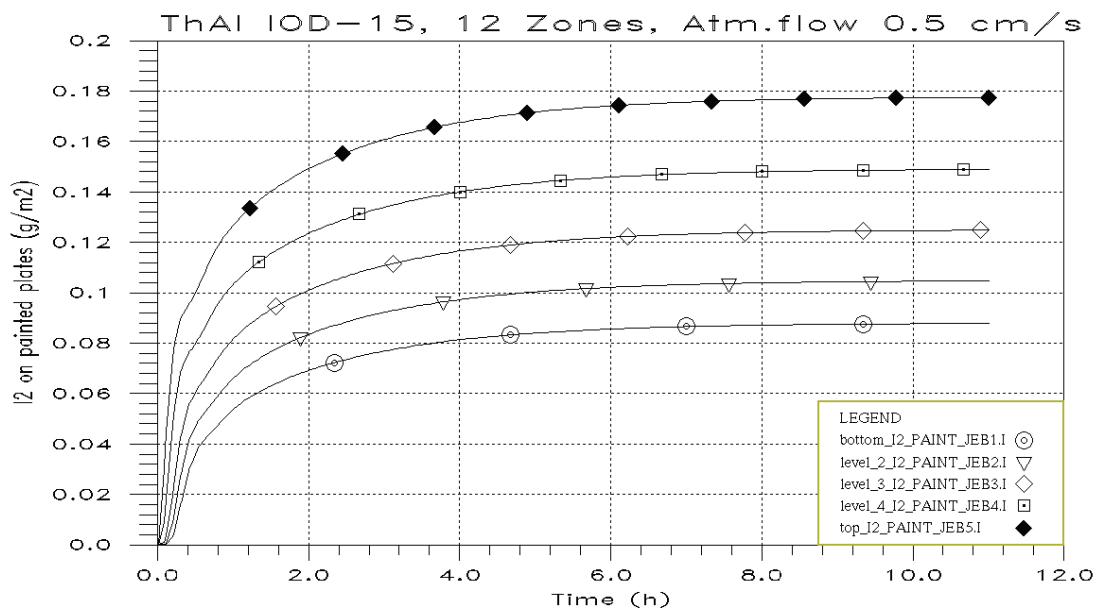


Abb. 2-8 Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 0,5 cm/s, Iod-Ablagerung auf Farbblechen

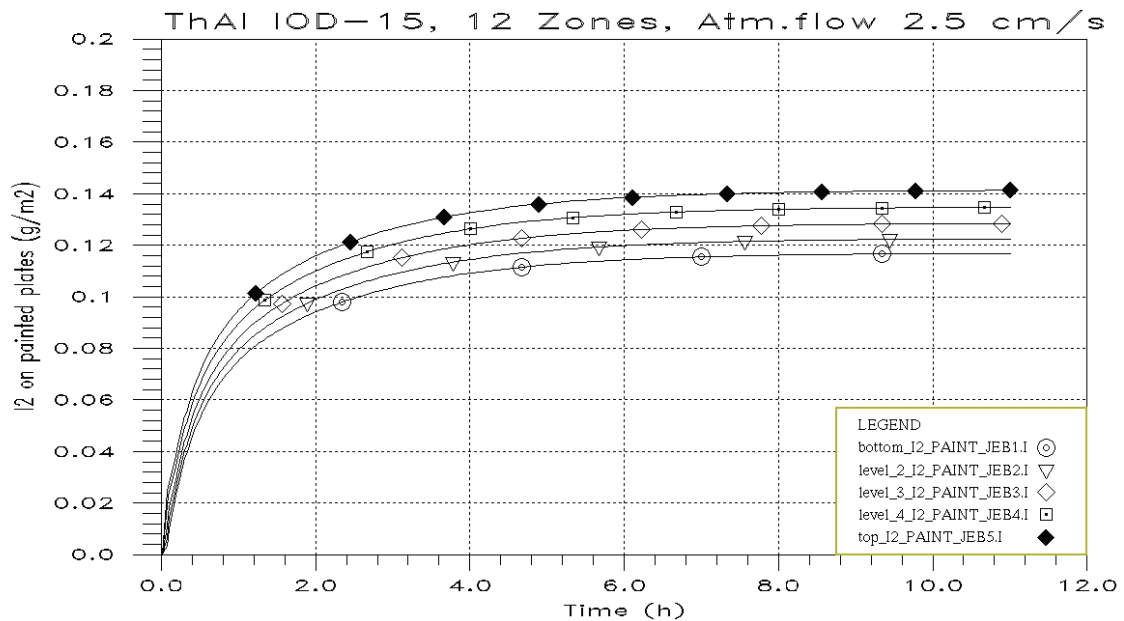


Abb. 2-9 Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 2,5 cm/s, Iod-Ablagerung auf Farbblechen

Auf die gute I_2 -Verteilung in der Behälteratmosphäre hat die Strömungsgeschwindigkeit nur einen geringen Einfluss. Die Konzentrationsunterschiede sind unmittelbar nach der Einspeisung am größten. Es ist nur das Ergebnis für 0,5 cm/s wiedergegeben (Abb. 2-10). Für 2,5 cm/s sind die I_2 -Konzentrationsunterschiede erwartungsgemäß kleiner.

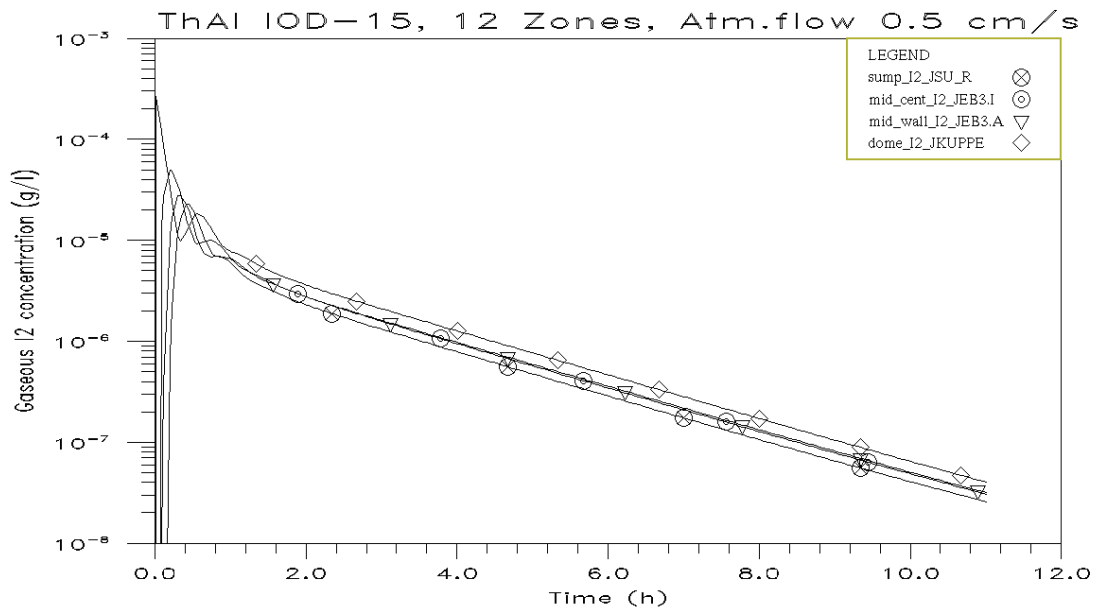


Abb. 2-10 Iod-15, Mehrraum-Vorausrechnung, Strömungsgeschwindigkeit 0,5 cm/s, I₂-Konzentration im Gas

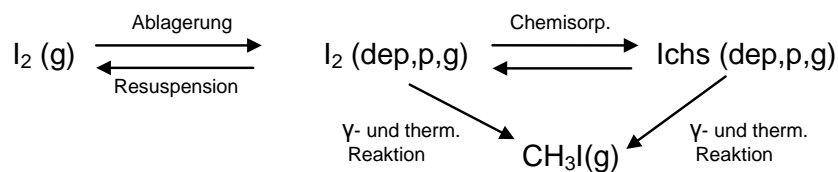
Die COCOSYS-AIM-Auslegungsrechnungen zu Iod-15 zeigen, dass eine ausreichend gute konvektive Durchmischung der Behälteratmosphäre und eine gleichmäßige I₂-Ablagerung auf den 40 Blechen zu erwarten ist, wenn folgende Bedingungen erfüllt werden:

- Die Naturkonvektionsströmung sollte durch leichtes Heizen des untersten oder der beiden untersten Mäntel moderat forciert werden. Die Deckeltemperatur kann anfangs auch leicht über der mittleren Atmosphärentemperatur (100 °C) liegen. Unterschiede zwischen den Behälter-Oberflächentemperaturen von maximal 10 K haben keine Auswirkungen auf die I₂-Ablagerung auf Farbe und Stahl.
- In unmittelbarer Nähe der I₂-Einspeisung (in der Kuppel) sollten keine Bleche montiert werden.
- Nach Möglichkeit sollten einige Bleche nach dem Versuch geborgen und ausgemessen werden. Wichtig wären vor allem Bleche aus der untersten und der obersten Ebene.

Diese Maßnahmen wurden im Versuch berücksichtigt. Die Iodbelegung auf den Farbflächen, die nach dem Versuch geborgen und ausgemessen wurden, war sehr

einheitlich belegt. Die maximale Abweichung zwischen den Flächen betrug nur ca. 30 %. Der Versuch konnte problemlos ausgewertet werden und lieferte belastbare Ergebnisse für eine Verbesserung des Iod/Farbe-Teilmodells in AIM.

Alle drei THAI Iod/Farbe-Versuche zeigten, dass ein Großteil des abgelagerten I_2 mit dem Farbmateriale zu nicht-flüchtigen Spezies reagiert (Chemisorption) und in der Farbschicht gebunden bleibt. Auch durch Abwaschen und leichtes Bürsten ist dieses chemisorbierte Iod nicht mehr zu entfernen. Für AIM-3 wurde daher das Iod/Farbe-Modell in Absprache mit AREVA um die chemisorbierte Spezies I_{CHS} (chemisorbiertes Iod) erweitert.



Die für das erweiterte Modell erforderlichen Reaktionskonstanten wurden auch in zwei weiteren Versuchen ermittelt:

Iod-15: I_2 -Ablagerung auf Farbe bei stationären 100 °C und 60 % rF

Iod-17: I_2 -Ablagerung und Resuspension nach einem Temperaturanstieg von 70 °C auf 120 °C

Iod-20: hohe Feuchte und hohe Temperatur (Reaktorfall). Dieser Versuch wurde von AREVA ausgelegt.

I_2 -Ausbreitung in Mehrraumgeometrie mit Farbanstrich

Zur Abschätzung der Auswirkung von Farboberflächen auf das I_2 -Ausbreitungsverhalten in einer Mehrraumgeometrie wurde die Rechnung zum Iod-Mehrraumversuch Iod-10 unter der Annahme wiederholt, dass alle Oberflächen mit Farbe beschichtet sind. Alle weiteren Randbedingungen und Einspeisungen blieben unverändert. In Abb. 2-11 ist die I_2 -Konzentration im Stahlbehälter (ursprüngliche Rechnung) sowie bei einer angenommenen Farboberfläche wiedergegeben.

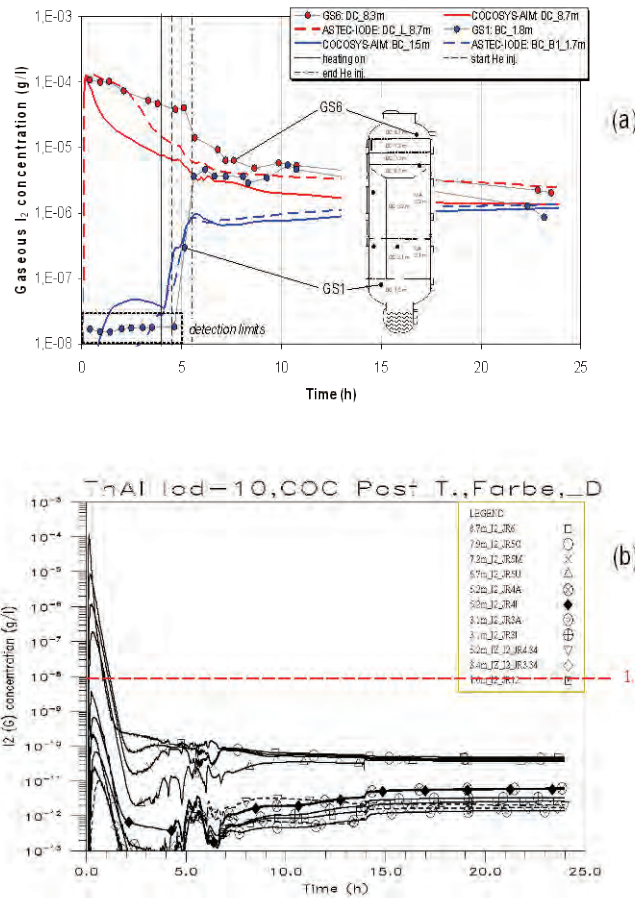


Abb. 2-11 THAI Iod-10; Gerechnete und gemessene I_2 -Konzentration bei originaler Stahloberfläche (a) sowie mit einem fiktiven Farbanstrich (b)

Aus den COCOSYS-AIM-Rechenergebnissen lassen sich folgende Schlussfolgerungen ziehen:

- In Gegenwart von Farboberflächen sind die I_2 -Konzentrationsunterschiede in geschichteter und durchmischter Atmosphäre stets größer als bei Stahloberflächen.
- Der Großteil des freigesetzten I_2 wird bereits an den Farboberflächen im Freisetzungsräum, das ist in einem DWR-Containment der Sumpfraum, abgelagert. Die Ablagerung auf Farbe läuft deutlich schneller als auf Stahl ab.
- Die Iodbelegung an farbeschichteten Wänden und inneren Strukturen weisen extreme Konzentrationsunterschiede von mehreren Größenordnungen auf. Für ein DWR-Containment sind Unterschiede bis zu 6 Größenordnungen

gen möglich. Die höchsten Iodbelegungen werden in Quellnähe, das ist vor allem der Raum über dem Sumpf, erwartet. Dementsprechend ist dort die Organoiodbildung auch am höchsten.

Im OECD BIP-Projekt wird unter anderem in Laborversuchen die I₂-Ablagerung auf Epoxy-Farben, wie AMERLOCK und RIPOLIN und die Organoiodfreisetzung unter Strahlungseinfluss gemessen. Andere Farben wie z. B. die deutsche GEHOPON-EXW sind vorerst nicht für Messungen vorgesehen. Es wird davon ausgegangen, dass das Ablagerungsverhalten von I₂ auf allen Epoxy-Farben quantitativ ähnlich ist.

Iod/Farbe-Reaktion bei Wandkondensation

In einem LWR-Containment ist lokal und temporär mit Wandkondensation zu rechnen, d. h. die I₂-Ablagerung erfolgt "nass". Neben der Ablagerung von I₂ durch Diffusion und der Stefan-Strömung mit dem kondensierenden Dampf auf dem Wasserfilm ist auch die Reaktion des abgelagerten I₂ mit dem Farbmateriale (Chemisorption) zu berücksichtigen. Ein Teil des abgelagerten I₂ wird mit dem Kondensatfilm abgewaschen und kann dabei zu I⁻ hydrolysieren.

Die nasse I₂-Ablagerung auf Farbe wurde im THAI-Versuch Iod-21 gemessen. Dazu wurden Farbkörper mit einer Gesamtoberfläche von 10 m² gekühlt bis sich Wandkondensation einstellte. Es wurde eine Phase mit schwacher ($2 \cdot 10^{-5}/(\text{m}^2 \text{ s})$) und eine mit starker ($2 \cdot 10^{-4}/(\text{m}^2 \text{ s})$) Wandkondensation gefahren. Abb. 2-12 zeigt die Voraussrechnung mit COCOSYS-AIM und die Messergebnisse sowie zwei weitere Rechnungen mit unterschiedlichen Annahmen zur Oberfläche.

Die zusätzlichen Rechnungen beschreiben Einhüllende, zwischen denen das Ergebnis der nassen I₂-Ablagerung erwartet wird. Bei sehr kleiner Wandkondensation geht das Ergebnis in das bei trockener Ablagerung auf Farbe über. Bei sehr starker Wandkondensation sollte sich die nasse Ablagerung auf Farbe wenig von der nassen Ablagerung auf Stahl unterscheiden, da der Großteil des I₂ mit dem ablaufenden Wasserfilm abtransportiert (*abgewaschen*) wird.

Zurzeit existieren nur erste Ansätze für eine Neuformulierung der nassen Ablagerung auf Farbe.

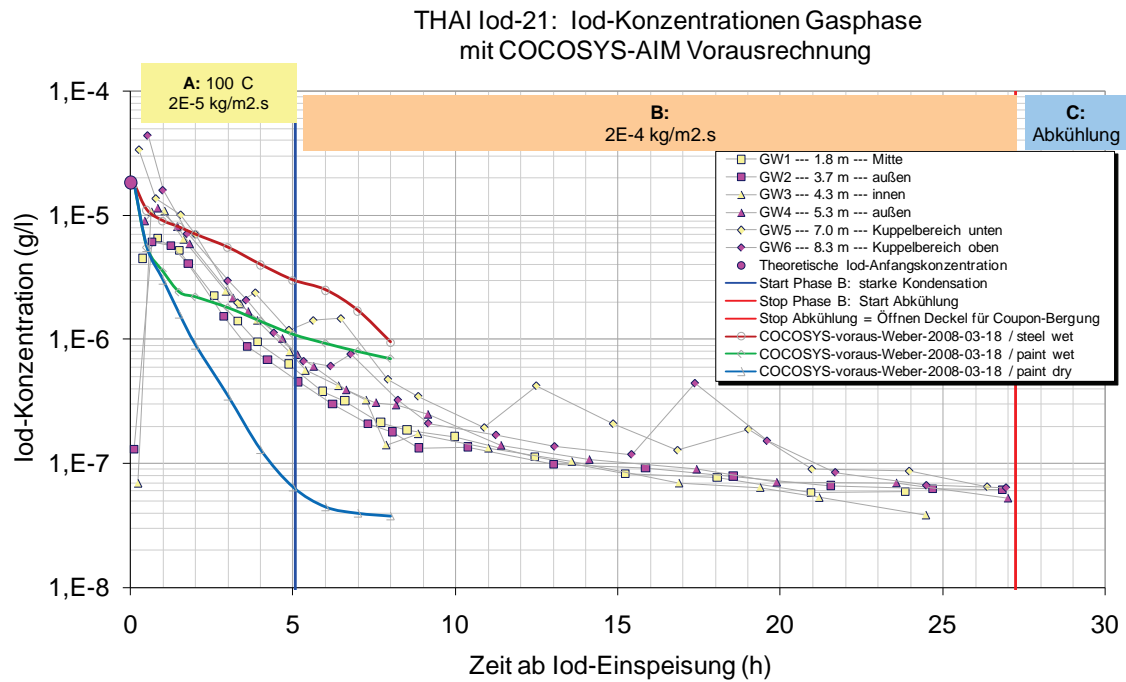


Abb. 2-12 THAI Iod-21; Vausgerechnete (grün) und gemessene I_2 -Konzentrationen (Messwerte von AREVA). Auch eingetragen sind die Rechenergebnisse bei angenommener trockener Farbe (blau) und bei angenommener nasser Stahloberfläche (braun).

2.2.4 Aktualisierung der AIM-Beschreibung für das COCOSYS User Manual

AIM-F2 ist die aktuelle Anwenderversion, die zusammen mit COCOSYS V2.3 freigegeben wurde. Die Beschreibung für AIM-F2 wurde aktualisiert und ist in einer Technischen Notiz dokumentiert /WEB 07/. Sie wurde jenen COCOSYS-Anwendern zur Verfügung gestellt, die auch Iodrechnungen durchführen.

AIM-3 ist die Entwicklerversion, die in Kürze mit der neuen Version COCOSYS V2.4 freigegeben werden soll. Dafür wurde die AIM-Beschreibung überarbeitet. Unter anderem werden alle modifizierten bzw. neu modellierten Reaktionen ausführlich beschrieben und Zusatzinformation für ihre Anwendung bereitgestellt. Dieses neue AIM-User Manual steht als gesonderter Bericht /WEB 09/ zur Verfügung.

2.2.5 Indizierung der Iodspezies im AIM Modul

Die Reihenfolge der Iodspezies ist im Modul AIM festgelegt. Weiterhin wurden bei speziellen Eigenschaften der entsprechenden Iodspezies die Indizes direkt in den jeweiligen Unterprogrammen verwendet.

Tab. 2-6 Indizierung der Iodspezies

Atmosphäre			Sumpf		
Nr.	Variablenname	Spezies	Nr.	Variablenname	Spezies
1	IA%I ₂	I ₂	1	IS%I ₂	I ₂
2	IA%IM	I ⁻	2	IS%IM	I ⁻
3	IA%IO ₃ M	IO ₃ ⁻	3	IS%IO ₃ M	IO ₃ ⁻
4	IA%RI	org. Iod	4	IS%AGI	Agl
5	IA%I ₂ P	I ₂ auf Farbe	5	IS%RI	org. Iod
6	IA%AGI	Agl	6	IS%AG	Silber
7	IA%FEI ₂	FeI ₂ auf Stahl	7	IS%R	org. Rest
8	IA%I ₂ S	I ₂ auf Stahl	8	IS%HOI	HOI
9	IA%I ₂ C	I ₂ auf Beton	9	IS%I ₂ P	I ₂ auf Farbe
10	IA%IMDR	I ⁻ -Tröpfchen	10	IS%AGOX	Silberoxid
11	IA%IO ₃ DR	IO ₃ ⁻ -Tröpfchen	11	IS%I ₂ S	I ₂ auf Stahl
12	IA%HOI	HOI	12	IS%I ₂ C	I ₂ auf Beton
13	IA%R	org. Rest	13	IS%BOR	Bor
14	IA%ICHS	chem. geb. Iod	14	IS%IMP	I ⁻ auf Beton
15	IA%CSDP	abgelag. Csl			
16	IA%IO ₃ DP	abgelag. IO ₃ ⁻			
17	IA%AGIDP	abgelag. Agl			
18	IA%O ₃	Ozon			
19	IA%AG	Silber			
20	IA%AGDP	abgelag. Silber			

Im Rahmen der Verbesserungen und Erweiterungen der Iodmodellierung werden das hochmolekulare Iod (HMWI) und der entsprechende organische Rest nicht weiter betrachtet, da zu diesen Spezies keine speziellen Experimente zur Bestimmung der Reaktionskonstanten vorhanden sind. Organische Iodkomponenten werden zusammenfassend betrachtet. Daher wurde der Name CH₃I im Programm in RI umbenannt.

Weiterhin wurden zwei neue Spezies FeI_2 und das chemisch gebundene Iod auf Farb-
anstrichen I_{CHS} eingeführt.

Bei der Implementierung der neuen Spezies wurden die Strukturen IA und IS einge-
führt, welche die Indexnummern der jeweiligen Spezies enthält. Die jeweiligen Namen
und deren Bedeutung sind in Tab. 2-6 dargestellt.

2.3 Rückwirkungen katalytischer Rekombinatoren und von H_2 -Verbren- nungsvorgängen auf das Aerosolverhalten und die Iodchemie

Obwohl nur eine begrenzte Anzahl von frei verfügbaren Informationen vorliegt, ist nicht
auszuschließen, dass die Anwesenheit von passiven autokatalytischen
Rekombinatoren zum Wasserstoffabbau unter Unfallbedingungen im Sicherheitsbehäl-
ter das Aerosolverhalten und die Iodchemie beeinflussen. Dies gilt gleichermaßen auch
für "milde" H_2 -Verbrennungsvorgänge, die auch trotz des Rekombinatoreinsatzes in ei-
nem realen Sicherheitsbehälter im Falle eines schweren Störfalls nicht komplett auszu-
schließen sind.

Die in diesem Arbeitspunkt untersuchten rückwirkenden Effekte lassen sich in zwei Ka-
tegorien unterteilen. Zum einen die Konversion der Aerosolkomponente CsI in moleku-
lares Iod (I_2), die durch die hohen Temperaturen nach einer Wasserstoffverbrennung
oder in arbeitenden autokatalytischen Rekombinatoren auftritt. Zum anderen die tro-
ckene Resuspension von bereits auf festen Oberflächen abgelagerten Aerosolpartikeln
durch verstärkte atmosphärische Strömungen, die nach einer Wasserstoffverbrennung
auftritt.

2.3.1 Zusammenstellung von Informationen

Die zu diesen physikalischen Effekten durchgeführten Arbeiten sind im Einzelnen in
der Dissertation von H. Nowack beschrieben /NOW 08/ und werden hier zusammenge-
fasst.

CsI-Konversion: Durch die Konversion aus einem aerosolförmigen Feststoff (CsI) wird
ein wesentlich flüchtigerer Stoff (I_2) gebildet. I_2 hat einen Schmelzpunkt von $113,7\text{ °C}$,
wird aber trotzdem bei unfalltypischen Temperaturen gasförmig in die Atmosphäre ab-
gegeben, da es einen hohen Dampfdruck aufweist.

Zu dem Thema der I_2 -Bildung aus Csl nach Wasserstoffverbrennungen sind zwischen 1985 und 1993 mehrere Experimente durchgeführt worden. Nelson /NEL 85/ untersucht 1985 bei Sandia den Einfluss von offenen Wasserstoffverbrennungen auf verschiedene Aerosole in einem $5,1 \text{ m}^3$ großen Behälter. Brown /BRO 90/ führt 1990 bei ORNL Versuche mit einem Brenner durch, in dessen Wasserstoffflamme Csl-Aerosol eingebracht wird. Weitere offene Verbrennungsexperimente sind 1992 von Kupferschmidt /KUP 92/ bei Whiteshell in einem $6,6 \text{ m}^3$ großen Behälter durchgeführt worden. Ein anderer Brenner-Versuch mit einer Wasserstoffflamme ist 1993 von Schmitt /SCH 93/ bei Battelle realisiert worden. Die Versuche zeigen starke Unterschiede in dem Ausmaß der zu erwartenden Csl-Konversion nach einer Wasserstoffverbrennung. Unklar bleibt auch die Rolle von Feuchtigkeit. Brown erwartet eine höhere Konversion bei höherer Luftfeuchtigkeit, während Kupferschmidt beobachtet, dass ein Wasserdampfanteil von 10 % die Konversion unterbinden kann.

Für den Effekt der Csl-Konversion in Rekombinatoren sind zwei wichtige Versuchsreihen durchgeführt worden. Die französischen RECI-Versuche /DES 04, SAB 05/ untersuchen eine mögliche Konversion von Csl und Cdl Aerosolen in molekulares Iod in Laborexperimenten mit einer Röhre, die anstelle eines Rekombinators benutzt wird. Die Röhre ist etwa 50 cm lang und hat einen Durchmesser von 1 cm. Im unteren Teil ist auf einer Länge von 14 cm ein Stück einer katalytischen Folie aus einem Rekombinator eingefügt. Der Teil der Röhre, in dem sich dieses Stück befindet, wird extern in einem Ofen beheizt, um die hohe Temperaturentwicklung beim Katalyseprozess zu simulieren. In den RECI-Versuchen findet keine katalytische Rekombination von Wasserstoff statt. Je nach der Größe der untersuchten Aerosolpartikel werden unterschiedliche Konversionsraten von Csl bzw. Cdl zu I_2 gemessen. Im Falle kleiner Partikel mit einem aerodynamischen Massenmedian von $0,3 \mu\text{m}$ wird eine Konversionsrate von bis zu 35 % für Csl und bis zu 50 % von Cdl beobachtet, wenn die angelegte Temperatur einen Wert von $800 \text{ }^\circ\text{C}$ überschreitet. Außerdem wird die Bildung einer kleineren Aerosolkomponente mit einem aerodynamischen Durchmesser von nur $0,1 \mu\text{m}$ bei diesen Temperaturen beobachtet. Die Konversionsrate nimmt mit größeren Partikeldurchmessern und fallenden Temperaturen ab.

Im THAI-Behälter sind die Versuche Aer-2 und Aer-5 /KAN 07/ durchgeführt worden, um den Einfluss von Rekombinatoren auf die Iodchemie zu untersuchen. Während dieser Versuche wurde ein originaler Rekombinator im Versuchstand angebracht. Benutzt worden ist ein kleines Modell mit 15 katalytischen Folien. Anders als in RECI kann kein

Nachweis geliefert werden, dass Csl-Aerosole bei einem Durchgang durch den Rekombinator gasförmiges Iod bilden. Allerdings hat die angewendete Messtechnik eine begrenzte Messgenauigkeit. Es kann ausgeschlossen werden, dass die Konversionsraten für die I₂-Bildung größer als 3 % des in Rekombinatoren eintretenden Csl sind. Auch eine Verschiebung zu kleineren Partikaldurchmessern konnte nicht gezeigt werden

Trockene Resuspension: Versuche mit Bedingungen wie bei einer Wasserstoffverbrennung haben eine nur kurz wirkende, aber heftige Strömung. Untersucht wird keine zeitliche Auflösung des Resuspensionsflusses, sondern der Gesamteintrag resuspendierter Partikel. Bei dieser Art der Resuspension wird erwartet, dass die Partikel nicht schichtweise, sondern mit einem Mal mehrere Schichten abgetragen werden.

Der **VANAM-M4 Zusatzversuch** /KAN 93/ untersucht den Einfluss einer offenen Wasserstoffdeflagration auf die Aerosolkonzentration im Battelle Model Containment. Zu diesem Zweck wird ein SnO₂ - NaOH Mischaerosol eingespeist. Dieses Partikelmaterial lagert sich auf Oberflächen innerhalb des Behälters ab. Danach wird Wasserstoff eingespeist und durch einen Zünder entflammt.

Die **AEREST**-Versuche (Aerosol Resuspension Shock Tube) der TU München /SCH 03/ untersuchen den Einfluss einer sehr schnellen Schockwelle auf eine Partikelablagerung in einem 7,5 m Stoßrohr. Ein schnell ausströmender Luftstrom trifft auf eine Partikelablagerung, die dadurch resuspendiert wird. Leider sind diese Versuche nicht gut reproduzierbar und haben eine starke Schwankung in den Messwerten.

In der **THAI**-Anlage sind die Versuche **Aer-1**, **Aer-3** und **Aer-4** /KAN 07/ durchgeführt worden. Während dieser Versuche befindet sich ein vertikales Deflagrationsrohr im THAI-Behälter. Oberhalb des Sumpfraums befindet sich eine Ablagerungsplatte, die etwa 1/3 des Behälterquerschnitts abdeckt. Das Deflagrationsrohr endet mit einer Düse oberhalb dieser Platte. Während einer ersten Phase wird Csl-Aerosol in den Behälter eingespeist, das sich in der folgenden Zeit auf den Oberflächen innerhalb des Behälters ablagern kann. In einer zweiten Phase wird Wasserstoff in das vertikale Rohr eingespeist. Durch eine Zündung am unteren Ende des Rohres brennt der Wasserstoff ab und das erzeugte Gas strömt über eine Düse horizontal über die Ablagerungsplatte, von der Aerosolmaterial in die Behälteratmosphäre resuspendiert wird. Durch die Geometrie mit einer flachen Düse soll ein möglichst gut bestimmtes Strömungsprofil oberhalb der Ablagerungsplatte erreicht werden.

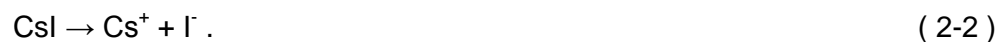
Von besonderer Bedeutung für die durchgeführten Arbeiten ist das Resuspensionsmodell von Fromentin /FRO 89/, das den Resuspensionsprozess unter stationären Strömungen durch einen einfachen stochastischen Algorithmus beschreibt. Das Partikelbett wird als Anordnung gleich großer Partikel abgebildet. Die wirkenden Kräfte folgen in Fromentins Modell Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen. Jedem Partikel an der Oberfläche wird mit einem Zufallszahlengenerator eine adhäsive Kraft F_{adh} und eine aerodynamische Kraft F_{aero} zugeordnet. Für jedes Partikel werden die beiden Kräfte verglichen. Falls $F_{aero} > F_{adh}$ wird das jeweilige betrachtete Partikel abgetragen und an dessen Stelle tritt das darunter liegende Partikel, anderenfalls bleibt es an seiner Stelle. Dieser Vorgang wird für mehrere Zeitschritte hintereinander durchgeführt, wodurch sich eine zeitabhängige Resuspensionsrate ermitteln lässt.

2.3.2 Identifikation der Einzelprozesse

CsI-Konversion: Der Wasserstoff im Containment kann mit dem Sauerstoff in der Atmosphäre reagieren. Die Nettoreaktionsgleichung bei einer Wasserstoffverbrennung im Dreistoffgemisch Wasserstoff - Luft - Wasserdampf ist dieselbe wie bei einer Knallgasreaktion:



Die stark exotherme Reaktion hat eine Reaktionsenthalpie von 242 kJ/mol Wasserdampf. In der Flammenfront ist eine Vielzahl von beteiligten chemischen Reaktionen zu erwarten. Laut Kupferschmidt /KUP 92/ kommen für die Bildung gasförmigen Iods I_2 verschiedene chemische Prozesse in Betracht. Durch den stark exothermen Charakter der Wasserstoffverbrennung ist eine Dissoziation von CsI zu erwarten:



Alternativ können in der Flammenfront weitere vorhandene Radikale (z. B. OH^\cdot , HO_2 , O , H^+ usw.) direkt mit CsI reagieren:



Elementares Iod kann dann z. B. mit Protonen weiter reagieren und durch aufeinander folgende Reaktionen schließlich gasförmiges I_2 bilden:



Auch denkbar ist eine direkte Bildung von I_2 durch eine Reaktion von zwei Iod-Anionen ohne eine Beteiligung weiterer Stoffe:



Ohne eine Berücksichtigung der genauen chemischen Vorgänge lässt sich die Reaktion durch folgende chemische Reaktionsgleichung zusammenfassen:



Die Cs-Ionen stehen danach für eine Bildung von z. B. Cäsiumhydroxid CsOH mit Wasserdampf zur Verfügung.

Gleichzeitig zur Bildung von I_2 bilden sich während der Abkühlphase kleinere Aerosolpartikel durch homogene Keimbildung beim erneuten Übergang des CsI in die flüssige bzw. feste Phase. Der Durchmesser dieser neu gebildeten Partikel liegt in der Größenordnung von nur $0,1 \mu\text{m}$, was für die Keimbildung typisch ist /HIN 99, Seite 293/. Da kleinere Partikel längere Zeit luftgetragen bleiben, kann daher die Aerosolkonzentration längere Zeit erhöht bleiben.

Trockene Resuspension: Bei der Resuspension von Partikeln treten zwei unterschiedliche Mechanismen auf.

Erosion bezeichnet das langsame Abtragen von Aerosolpartikeln von der Oberfläche einer Ablagerungsschicht unter einer kontinuierlichen Strömung, wobei die Schichten einzeln abgetragen werden.

Denudation bezeichnet das abrupte Abtragen mehrerer Partikelschichten innerhalb einer sehr kurzen Zeit. Dieser Effekt tritt auf, wenn sich die Strömungsgeschwindigkeit oberhalb des Partikelbetts rasch erhöht, aber nicht mehr, wenn diese Strömung schon einige Zeit lang herrscht. Es handelt sich also um einen Anfangseffekt, der an einzelnen Stellen des Partikelbetts die Oberfläche freilegen kann.

Wasserstoffverbrennungen sind sehr schnelle Vorgänge, die sich in einem Zeitraum von nur wenigen Sekunden abspielen. Daher ist anzunehmen, dass der Anfangseffekt der Denudation einen entscheidenden Einfluss auf das Ausmaß der Resuspension hat. Die Resuspension von Aerosolpartikeln hängt von einer Vielzahl von Einflussparametern ab. Daher ist eine vollständig mechanistische Beschreibung aller physikalischen Einflussgrößen schwierig. Das Partikelbett besteht aus Aerosolen verschiedener Größe, unterschiedlichen Materials und es gibt viele weitere im Reaktorfall unbekannte Einflussparameter wie Feuchte, Oberflächenrauigkeit oder die Dicke der Ablagerungsschicht. Innerhalb der Ablagerungsschicht können die Aerosole agglomerieren. Die Effekte, die es ermöglichen, Teilchen aus dieser laminaren Grenzschicht in die Atmosphäre anzuheben, sind nicht vollständig verstanden. Einigkeit herrscht unter allen Autoren, dass eine Strömung turbulent sein muss, damit es zur Resuspension von Aerosolen kommen kann. Die Wandschubspannung τ gilt als die entscheidende Größe zur Beschreibung der durch die wirkende Strömung entstehenden Kräfte.

2.3.3 Entwicklung einfacher Korrelationen/Modelle und Einbau in COCOSYS

Csl-Konversion nach Wasserstoffverbrennung

Eine Auswertung der experimentellen Arbeiten zur Csl-Konversion nach Wasserstoffverbrennungen hat ergeben, dass unter Störfallbedingungen mit einer 20 %-igen Konversion von Csl in I_2 zu rechnen ist. Eine solche Konversion lässt sich in COCOSYS mittels Einspeisetabellen und im Falle von Csl durch negative Einspeiseraten simulieren. Daher ist keine Erweiterung der COCOSYS Modelle für Stör- und Unfallrechnungen notwendig.

Csl-Konversion in Rekombinatoren

Um den Einfluss verschiedener Konversionsraten in Rekombinatoren auf die Iodchemie im Sicherheitsbehälter abschätzen zu können, ist die Entwicklerversion von COCOSYS dahingehend geändert worden, dass eine Konversionsrate von Iodid zu I_2 vorgegeben werden kann. Diese Änderungen sind nicht in eine Anwenderversion übernommen werden. Mit der Csl-Konzentration C_{I^-} und dem Volumenfluss durch den Rekombinator \dot{V} ergibt sich die Aerosolrate \dot{M}_{e,I^-} am Einlass des Rekombinators, die die pro Zeiteinheit in den Rekombinator eingesaugte Aerosolmenge von Csl angibt: (2-8)

$$\dot{M}_{e,I^-} = \dot{V} C_{I^-} .$$

Mit dem Konversionsfaktor k wird ein bestimmter Teil des in den Rekombinator eingesaugten Aerosols aus der Atmosphäre entnommen. Die Änderung der Aerosolrate von $\dot{M}_{a,I}$ am Rekombinatoreingang beträgt dann:

$$d\dot{M}_{a,I} = -k\dot{M}_{e,I} \quad (2-9)$$

Gleichzeitig wird unter Berücksichtigung des Molverhältnisses die halbe Menge molekularen Iods eingespeist, wodurch sich die I_2 -Rate \dot{M}_{a,I_2} vergrößert:

$$d\dot{M}_{a,I_2} = \frac{1}{2}k\dot{M}_{e,I} \quad (2-10)$$

Auf diese Weise bleibt die Gesamtmenge an Iod bei dem Durchgang durch den Rekombinator konstant.

Trockene Resuspension: Für den Effekt der trockenen Resuspension ist das Modell von Fromentin auf die Bedingungen, die nach einer Wasserstoffverbrennung herrschen, angepasst worden. Als Grundlage dient das Partikelbett nach Fromentin /FRO 89/ mit gleich großen Partikeln. Genau wie in dem Originalmodell werden jedem Partikel in dem Partikelbett eine aerodynamische und eine adhäsive Kraft zugeordnet. Anders als unter kontinuierlichen Strömungen sind Wasserstoffverbrennungen sehr schnelle Ereignisse, deren Strömungen innerhalb weniger Sekunden wieder abflachen. Bei einer Wasserstoffverbrennung ist mit einem schnellen Abtragen aus mehreren Partikelschichten gleichzeitig zu rechnen. Daher wirken die aerodynamischen Kräfte nicht mehr nur auf die obersten Partikel. Falls eine aerodynamische Kraft groß genug ist, um ein Partikel in der obersten Schicht zu resuspendieren, wird überprüft, ob sie auch stark genug ist, das darunter liegende Partikel abzutragen. Um die kurze Zeitspanne des Resuspensionsprozesses zu berücksichtigen, wird nur ein einzelner Zeitschritt berechnet. Die mittlere Größe der aerodynamischen Kräfte wird nur anhand der Maximalgeschwindigkeit der Strömung über der Partikelablagerung und der Dauer der Strömung bestimmt. Offene Modellparameter sind mit Hilfe der experimentellen Arbeiten im VANAM-M4 Zusatzversuch, in der AEREST-Anlage und den THAI-Resuspensionsversuchen Aer-1, Aer-3 und Aer-4 ermittelt worden. Das Modell ist in die Entwicklungsversion von COCOSYS eingebaut worden und wird auch mit Version V2.4 bereitgestellt.

2.3.4 Parameterrechnungen zum Einfluss auf den Quellterm

Csl-Konversion nach Wasserstoffverbrennung: Die untersuchten experimentellen Arbeiten zu diesem Thema lassen den Schluss zu, dass unter Störfallbedingungen mit einer 20 %-igen Konversion von Csl zu I_2 zu rechnen ist. Dieser Wert wird in einer COCOSYS-Rechnung mit angenommener Wasserstoffverbrennung in einem KONVOI-Reaktor unterstellt. Verwendet wird ein grober COCOSYS-Datensatz, der als Testbeispiel für das Anwendungsgebiet von COCOSYS zur Verfügung steht. In dieser einfachen Nodalisierung mit 17 Zonen entfallen auf den Sicherheitsbehälter nur 8 Zonen. Die übrigen Räume stellen den Ringraum und das Hilfsanlagegebäude dar.

Als Ausgangsszenario für diese Rechnung dient ein 50 cm^2 großes Leck im heißen Strang der Hauptkühlmittelleitung mit Ausfall der Dampferzeuger-Wärmeabfuhr. Die in das Containment freigesetzten Mengen von Aerosolen und gasförmigen Komponenten stammen aus MELCOR-Rechnungen der Version 1.8.3 /SON 98/. Die Freisetzungsraten von Wasser, Wasserdampf, Wasserstoff und Aerosolmengen als auch die als Wärme in den Sicherheitsbehälter abgegebene Energiemenge werden in dem COCOSYS-Datensatz als Einspeisetabellen vorgegeben.

Es werden zwei Variationsrechnungen zum Zeitpunkt 15.000 s (frühe Konversion in Folge einer unterstellten H_2 -Verbrennung) und 100.000 s (späte Konversion in Folge einer unterstellten H_2 -Verbrennung) nach Störfallbeginn erstellt, um das unterschiedliche Verhältnis der Csl- und I_2 -Konzentrationen in verschiedenen Störfallphasen zu berücksichtigen. Diese beiden Rechnungen werden mit dem Fall ohne Csl-Konversion verglichen.

Die Iodergebnisse zeigen aufgrund der einfachen Nodalisierung nur geringe Unterschiede in den verschiedenen Zonen. Im Folgenden wird beispielhaft die Kuppel-Zone ausgewertet, die ein charakteristisches Verhalten zeigt. In Abb. 2-13 ist die Csl-Konzentration für alle drei Rechnungen über der Zeit aufgetragen. Die Csl-Konzentration fällt in dieser Rechnung um 4 Größenordnungen, daher ist der Einfluss einer 20 %-igen Csl-Konversion als gering einzuschätzen. Auf der logarithmischen Skala in der Grafik fällt die Änderung sowohl bei der frühen als auch bei der späten Zersetzung nicht wesentlich ins Gewicht.

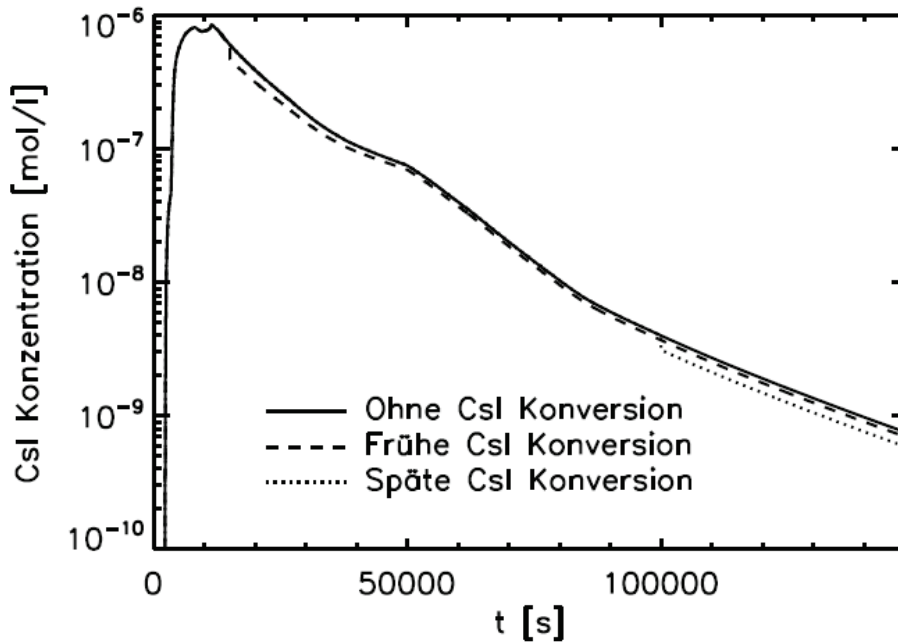


Abb. 2-13 CsI-Konzentrationen in der Kuppel

Da die I₂-Konzentration in einem typischen Störfallverlauf mehrere Größenordnungen niedriger ist als die CsI-Konzentration, kann eine CsI-Zersetzung von 20 % allerdings eine entscheidende Quelle für I₂ darstellen. In Abb. 2-14 ist die I₂-Konzentration über der Zeit aufgetragen. Durch die Konversion von CsI erhöht sich die Konzentration bei der Annahme einer frühen Wasserstoffverbrennung schlagartig um 4 Größenordnungen. Das so entstandene molekulare Iod nimmt zwar innerhalb von 10.000 s um 3 Größenordnungen wieder ab, aber die I₂-Konzentration bleibt über den gesamten betrachteten Zeitraum erhöht. Bei der CsI-Konversion im späten Störfallverlauf bei 100.000 s hat sich das meiste Aerosol bereits abgelagert und das Verhältnis von CsI zu I₂ ist geringer geworden. Daher steigt bei dieser Annahme die CsI-Konzentration nur um ein bis zwei Größenordnungen. In diesem Fall nimmt die I₂-Konzentration schnell wieder ab und erreicht nach 2.000 s das alte Niveau.

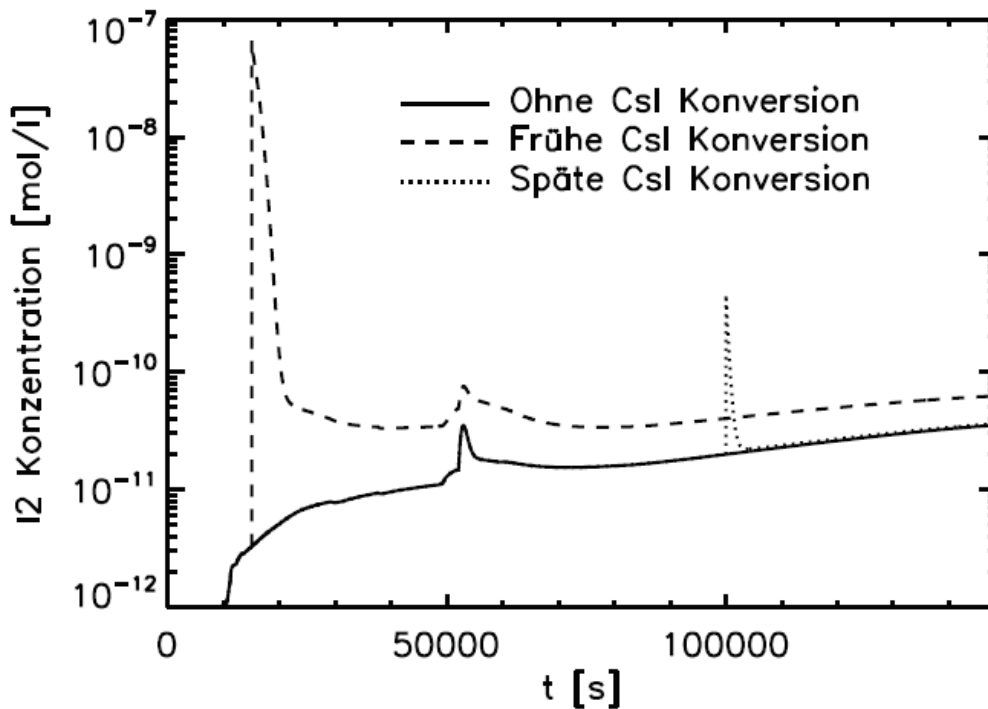


Abb. 2-14 I₂-Konzentration in der Kuppel

Csl-Konversion in Rekombinatoren: Für Abschätzungen zur Csl-Konversion in Rekombinatoren ist dasselbe Szenario berechnet worden, allerdings wird jetzt keine Wasserstoffverbrennung unterstellt, sondern eine Csl-Konversion in den Rekombinatoren. Dazu wird die interne Entwicklerversion mit den oben dargestellten Korrelationen benutzt, wobei verschiedene Konversionsfaktoren k von Csl vorgegeben werden.

Bei diesem Vorgehen ergibt sich für die Csl-Menge nur eine geringe Änderung der Konzentration, wie Abb. 2-15 zeigt. Dargestellt ist die Csl-Konzentration über der Zeit. Selbst eine 10 %-ige Umwandlung des in die Rekombinatoren eintretenden Csl in I₂ ergibt nur einen Unterschied von einem Faktor 2 in der Csl-Konzentration nach 50.000 s. Bei den übrigen Konversionsraten ist die Verringerung von Csl vernachlässigbar.

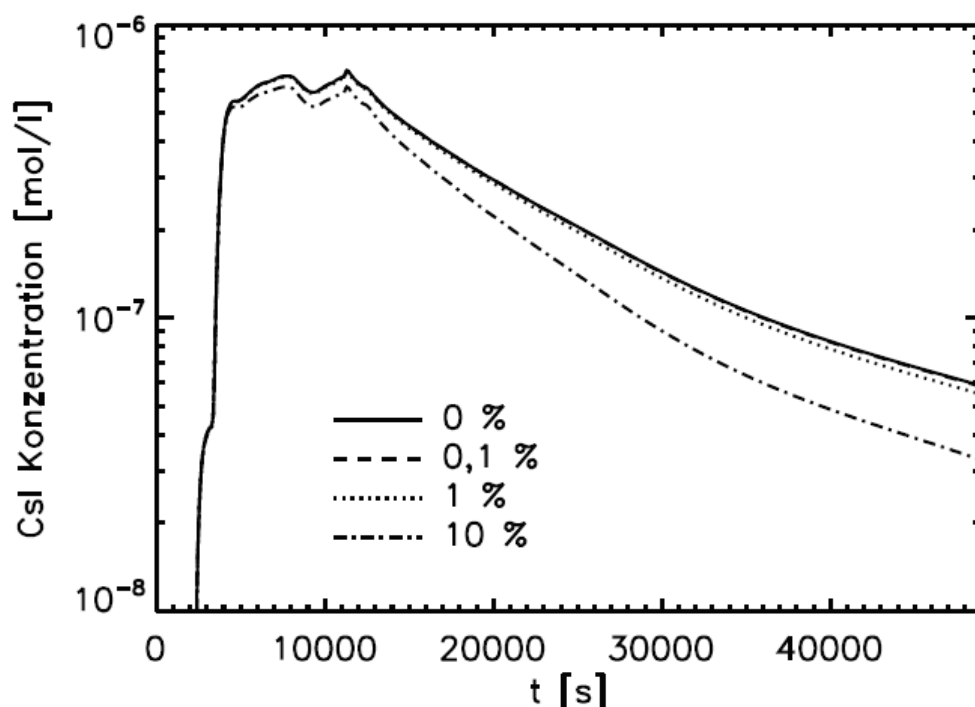


Abb. 2-15 CsI-Konzentrationen in der Kuppel

Anders ist das Verhalten für die Bildung molekularen Iods. Wie schon im vorherigen Abschnitt diskutiert, ist die CsI-Konzentration um mehrere Größenordnungen höher als die des I₂. Daher spielt schon eine Konversionsrate von 0,1 % des in den Rekombinator eintretenden CsI eine entscheidende Rolle für die Produktion von I₂.

In Abb. 2-16 ist zu erkennen, dass selbst eine so geringe Konversionsrate bei Störfallbeginn die entscheidende Quelle für I₂ sein kann. Die Rekombinatoren können bereits molekulares Iod in der Atmosphäre bilden, bevor CsI-Aerosol in die Sümpfe gelangt ist. Daher tritt die I₂-Bildung in Rekombinatoren wesentlich eher auf als die Freisetzung aus dem Sumpf. Im späten Störfallverlauf nimmt der Einfluss der Rekombinatoren ab. Bei den höheren Konversionsraten von 1 % bzw. 10 % ist aber immer noch die Bildung in Rekombinatoren dominierend im Vergleich zur Freisetzung aus dem Sumpf.

Wie auch schon bei der CsI-Konversion nach Wasserstoffverbrennung ist ein möglicher Einfluss der I₂-Bildung gerade während der ersten 10 h nach Störfallbeginn relevant. Im späteren Zeitverlauf hat sich schon eine größere Menge CsI in die Sümpfe abgelagert und die radiolytische Bildung molekularen Iods nimmt eine stärkere Rolle ein. Dennoch sind die experimentellen Ergebnisse derzeit noch so ungenau, dass eine genaue Quantifizierung dieses Effektes derzeit nicht möglich ist. Die erzielten Ergebnisse zeigen aber, dass dieser Effekt in der Phase bis 10 h nach Störfallbeginn eine

starke Bedeutung haben kann, weshalb genauere experimentelle Untersuchungen gerade zur I_2 -Bildung in Rekombinatoren wünschenswert sind.

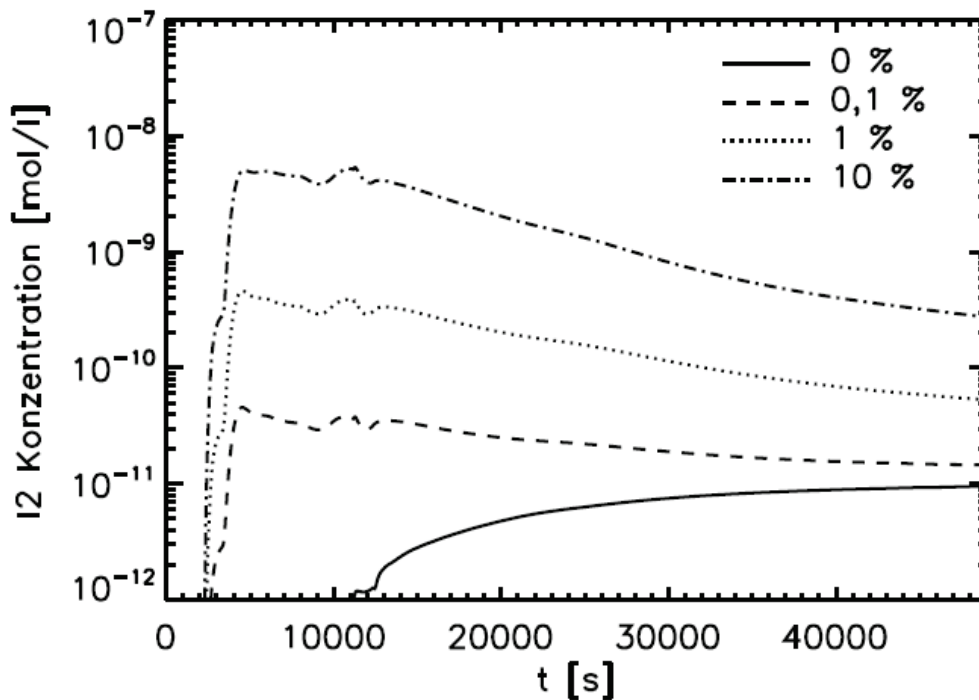


Abb. 2-16 I_2 -Konzentrationen in der Kuppel

Trockene Resuspension: Für Untersuchungen über den Einfluss der trockenen Resuspension von Aerosolen in Folge von Wasserstoffverbrennungen sind Containmentrechnungen mit dem neu in COCOSYS eingebauten Resuspensionsmodell durchgeführt worden. Das Störfallszenario eines 50 cm² Lecks ohne Dampferzeuger-Wärmeabfuhr ist dasselbe wie in den beiden vorhergehenden Fällen zur CsI-Konversion. Allerdings wird jetzt ein detaillierter KONVOI-Datensatz mit 196 Zonen benutzt, um die Ablagerungszonen für Aerosole genau zu identifizieren. Verschiedene Fälle mit unterschiedlichen Leckagen im Sicherheitsbehälter werden unterstellt. Als erstes wird angenommen, dass während der Deflagration keine zusätzliche Leckage am Sicherheitsbehälter entsteht. In dem Originaldatensatz wird eine Auslegungsleckage von 10⁻⁵ m² aus dem Sicherheitsbehälter in den Ringraum berücksichtigt, die eine Freisetzung von Aerosolen über das Hauptgebäude in die Umwelt ermöglicht. Im zweiten Fall wird als theoretischer Extremfall ein größeres Versagen des Sicherheitsbehälters als direkte Folge der Wasserstoffdeflagration unterstellt. In diesem Fall wird eine 1 m² große Leckage direkt in die Umwelt angenommen. Im dritten Fall wird ein vergrößertes 0,01 m² Leck des Sicherheitsbehälters an derselben Stelle wie bei der Auslegungsleckage unterstellt. Diese drei unterschiedlichen Leckagen ver-

ursachen ein unterschiedliches Ausströmen der Containmentatmosphäre, mit der das Aerosol transportiert wird. Die durch die Verbrennung von Wasserstoff zu erwartenden Geschwindigkeiten in den Zonen werden vereinfacht simuliert. Sie liegen in der gleichen Größenordnung wie in früher durchgeführten CFX-Rechnungen /HEI 03/. In dem untersuchten Szenario versagt der biologische Schild durch den Erosionsvorgang der Schmelze in der Reaktorgrube nach 49.025 s und die Schmelze kommt in Kontakt mit dem Sumpfwasser. Eine Wasserstoffverbrennung wird eine Stunde später also bei 52.625 s unterstellt.

Die in die Umwelt freigesetzte Aerosolmasse für den Fall der 0,01 m²-Leckage ist in Abb. 2-17 dargestellt. Bei diesem Leck in den Ringraum nimmt die freigesetzte Aerosolmasse mit dem Einsetzen der Leckage langsam zu. In der Simulation werden die Aerosole durch das Hilfsanlagegebäude gelenkt, bevor sie in die Umwelt freigesetzt werden. In der Rechnung ohne trockene Resuspension sind nach 100.000 s etwa 0,5 kg in die Umwelt gelangt und in der Rechnung mit Resuspension etwa 2,0 kg. Der Unterschied beträgt in diesem Fall also einen Faktor 4.

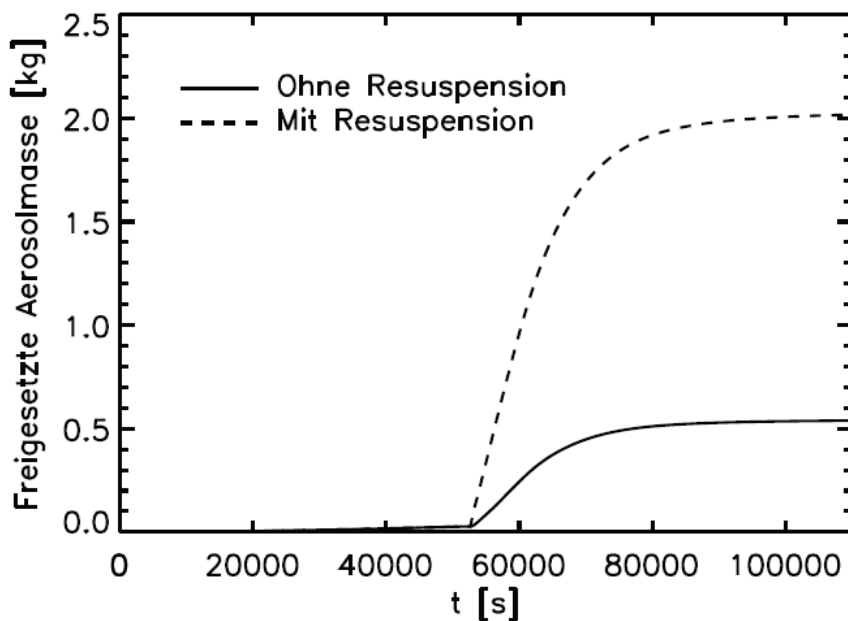


Abb. 2-17 Freigesetzte Aerosolmasse bei 0,01 m² Leck

Die durchgeführten Rechnungen zeigen, dass bei einer Auslegungsleckage nur ein minimaler Einfluss zu erwarten ist, während bei einer 0,01 m²-Leckage der Aerosolquellterm um einen Faktor 4 steigen kann. Bei einem Totalversagen des Sicherheitsbehälters ist sogar mit einer Zunahme des Aerosolquellterms aufgrund der trockenen Resuspension um einen Faktor 10 zu rechnen. Die größten Unsicherheiten entstehen

bei diesen Betrachtungen durch die Strömungsbedingungen, die nach einer Wasserstoffverbrennung auftreten können. An den dazu in COCOSYS vorhandenen Modellen wird im nächsten Vorhaben noch gearbeitet. Die Vorgabe eines Strömungsprofils als Folge der H₂-Verbrennung wie in den Rechenfällen stellt daher eine akzeptable Näherung dar.

2.3.5 Konzipierung von Experimenten

CsI-Konversion: Die Experimente im Bereich der CsI-Konversion weisen starke Unsicherheiten sowohl infolge der H₂-Verbrennung als auch in Rekombinatoren auf. Im Falle der H₂-Verbrennungen sind die Einzelprozesse bei der CsI-Konversion weitgehend unverstanden. Die Versuche von Schmitt bei Battelle legen den Schluss nahe, dass insbesondere die Abkühlphase im Anschluss an die H₂-Verbrennung bedeutend sein kann. Sowohl die Geschwindigkeit des Abkühlvorgangs als auch das Vorhandensein von Konkurrenzreaktionen zur Bildung von I₂ können einen Einfluss auf die Menge des gebildeten gasförmigen Iods haben. Zur Abbildung dieser Prozesse müssten die Iodmodelle in den Temperaturbereich, der bei H₂-Verbrennungen erreicht wird, fortgeführt werden.

Im Bereich der CsI-Konversion in Rekombinatoren weisen die THAI-Versuche Aer-2 und Aer-5 zwar realistische Bedingung auf, allerdings ist die Messgenauigkeit bzw. der Messbereich in diesen Versuchen nicht hinreichend, das Ausmaß der CsI-Konversion ausreichend genau zu bestimmen. Unterhalb der Messgenauigkeit dieser Versuche könnte eine relevante Menge molekularen Iods gebildet worden sein, ohne dass dieses nachgewiesen worden ist. Daher ist ein Wiederholungsversuch in THAI mit verbesserter Messtechnik sinnvoll. Ein solcher Versuch ist im OECD-THAI Versuchsprogramm vorgesehen.

Trockene Resuspension: Im Bereich der trockenen Resuspension bestehen die größten Unsicherheiten in der Berechnung der nach einer Wasserstoffverbrennung auftretenden Atmosphärenströmungen. Diese lassen sich mit einem 'lumped parameter'-Code wie COCOSYS nicht detailliert berechnen. Notwendig sind genauere Bestimmungen der zu erwartenden Strömungsgeschwindigkeiten und der von den beschleunigten Strömungen betroffenen Ablagerungsflächen. Erfolg versprechend sind zukünftige Rechnungen mit CFD-Codes, deren typische Ergebnisse bezüglich atmosphäri-

scher Strömungen in COCOSYS übernommen werden sollten. Die Durchführung neuer Experimente erscheint im Augenblick nicht sinnvoll.

2.4 Berechnung der Dosisleistung

Die Dosisleistung ist eine wichtige Randbedingung in der Iodchemie bei der Bildung von flüchtigen Iodspezies. Sie hängt sowohl vom aktuellen Nuklidinventar im Kontrollvolumen als auch von der aktuellen Geometrie und den Materialeigenschaften des absorbierenden Mediums, in dem sich das Iod befindet, ab. Bisher muss die Dosisleistung als eine zeitabhängige Funktion per Tabelle vorgegeben werden, was aber die Kenntnisse des Unfallablaufs voraussetzt. Dies entspricht daher nicht der Philosophie in COCOSYS, alle relevanten Kopplungen selbständig zu berechnen. Daher wurde im ersten Schritt ein vereinfachtes Modell in COCOSYS implementiert.

2.4.1 Implementierung einer Modellerweiterung in AFP

Das in COCOSYS implementierte Modell behandelt zunächst nur die Berechnung der Dosisleistung und die Verteilung der Nachzerfallsleistung in Sümpfen/Wasserpools. Wobei bezüglich der Modellerweiterung vorwiegend die Gammastrahlung betrachtet wird. Bisher wird die in der Wasserphase frei werdende Nachzerfallsleistung vollständig in dieser Phase freigesetzt. Damit werden allerdings die Nachzerfallsleistung und die Dosisleistung in Sümpfen mit Wasserständen unter einem Meter überschätzt, da ein Teil der Strahlung die Wasservorlage durchdringt (Abb. 2-18).

In dem implementierten Modell wird davon ausgegangen, dass die Höhe des Wasserstandes klein gegenüber der Bodenfläche ist. Dadurch lässt sich das Problem aus Symmetriegründen als ein eindimensionales Problem formulieren. Wie in /KLE 00/ beschrieben, gibt es in COCOSYS bereits ein Modell in dem die Verteilung der Nachzerfallsleistung in Strukturen aufgrund der Gammastrahlung berechnet wird. Dabei wird ein typisches Gammaskpektrum angenommen /HES 93/, welches in 5 Gruppen mit typischen Absorptionskoeffizienten β_i und den Verteilungsfaktoren a_i eingeteilt ist.

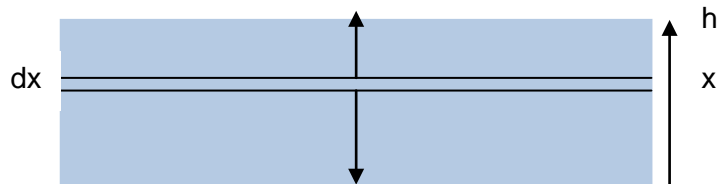
Bezügliches des Sumpfes werden zwei verschiedene Situationen betrachtet:

- Die Strahlung erfolgt von oben bzw. unten durch den Sumpf. Der Gammafluss ϕ welche den Sumpf mit dem Wasserstand h durchdringt beträgt dann:

$$\varphi = \varphi_0 \sum_i a_i e^{-\beta_i h}$$

mit φ_0 als Gammafluss der Quelle.

- Ist die Strahlenquelle homogen im Sumpf verteilt, z. B. bei gelösten Spaltprodukten, muss über das Volumen integriert werden um die Abstrahlung aus dem Sumpfvolumen zu berechnen.



Die resultierende Gleichung lautet:

$$\varphi = \frac{1}{h} \int_0^h \left(\frac{\varphi(x)}{2} + \frac{\varphi(h-x)}{2} \right) dx = \frac{1}{2h} \int_0^h \varphi(x) dx - \frac{1}{2h} \int_h^0 \varphi(y) dy \quad \text{mit } y = h-x$$

Beide Summanden lassen sich wieder zusammenfassen. Daraus folgt:

$$\varphi = \frac{1}{h} \int_0^h \varphi(x) dx = \frac{1}{h} \varphi_0 \sum_i a_i \int_0^h e^{-\beta_i x} dx = \frac{1}{h} \varphi_0 \sum_i \frac{a_i}{\beta_i} (1 - e^{-\beta_i h})$$

Das Verhalten der beiden resultierenden Gleichungen ist in Abb. 2-18 dargestellt. Diese Abbildung zeigt den Gammafluss φ aus dem Sumpf (Transmissionsfaktor) und den Absorptionsfaktor der Gammastrahlung $(1-\varphi)$, wenn sich die Quellen am Sumpfboden (durchgezogene Linien) bzw. homogen verteilt im Sumpf befinden (gestrichelt). Daraus ergibt sich, dass sich bei ca. 1 m Wasserhöhe praktisch die gesamte Strahlung absorbiert wird, wenn sich die Quelle am „Rand“ befindet. Bei Volumenquellen dringt noch ca. 15 % der ursprünglichen Strahlung nach außen.

Für sehr flache Sümpfe (unter ca. 1 cm) sollte die Transmission der Betastrahlung bzw. der daraus resultierenden Bremsstrahlung durch den Sumpf berücksichtigt werden. Das Verhalten der Absorption der Betastrahlung ist dabei anders als bei der Gammastrahlung /KRI 04/. In dem implementierten Modell wird dieses allerdings bisher nicht berücksichtigt, sondern die Betastrahlung analog zur Gammastrahlung behandelt. D. h. für die Absorption der Betastrahlung wird eine exponentielle Abhängigkeit angenommen. Hier sind zukünftig noch Modellierungsarbeiten notwendig.

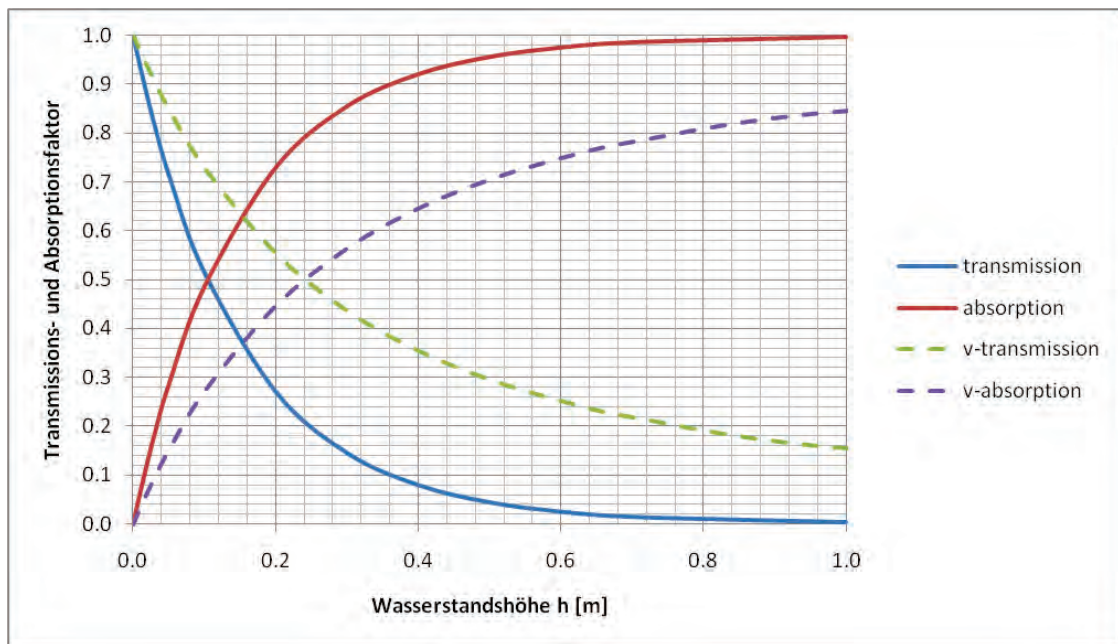


Abb. 2-18 Verlauf des Transmissionsfaktors für Quellen am Rand des Sumpfes und im Sumpf

In der Routine GFPHEAT werden nun die Transmissionsfaktoren für den Sumpf berechnet. Dazu wurde eine neue Routine GAMPOW_S entsprechend zu GAMPOW geschrieben. Die Verteilung der Nachzerfallsleistung aufgrund der Gammastrahlung wird bereits in /KLE 00/ beschrieben. Dort wurden schon die Transmissionsfaktoren formal berücksichtigt. Wenn die Verteilung der Nachzerfallsleistung bekannt ist, berechnet sich die Dosisleistung D_s im Sumpf zu:

$$D_s = \frac{\dot{Q}_s}{M_w}$$

mit der resultierenden freiwerdenden Nachzerfallsleistung \dot{Q}_s im Sumpf und der Sumpfwassermasse M_w .

2.4.2 Testen der Modellerweiterung

Zur Überprüfung wurden Testrechnungen anhand eines einfachen Datensatzes für eine Anlage vom Typ KONVOI durchgeführt. Die Nodalisierung des Datensatzes ist in Abb. 2-19 dargestellt. Die Ergebnisse der ursprünglichen Version (Rechnung „NTS“) sind in roten Kurven in Abb. 2-20 dargestellt. Hier wird angenommen, dass die Beta- und Gammastrahlung immer vollständig im Sumpf absorbiert wird. Somit sind die Abweichungen gerade bei den Wasservorlagen mit niedrigen Wasserständen am höchsten. Die Ergebnisse mit der Modellerweiterung (Rechnung „COC“) sind in blauen Kur-

ven dargestellt. Weiterhin wurde noch eine Vergleichsrechnung mit der COCOSYS-Anwenderversion V2.3v22 (Rechnung „V2.3“, grüne Kurven) und eine Rechnung mit dem implementierten Modell und einer höheren kritischen Höhe CRTHE für den Sumpf von 1 cm, statt 1 mm, durchgeführt (Rechnung „1CM“, schwarze Kurven). Die Eingabegröße CRTHE bestimmt, ab welchem Wasserstand die Chemie im Sumpf berechnet und somit die entsprechenden Gleichungen aktiviert werden. Unterschreitet der Wasserstand diese Höhe hat somit nur noch die berechnete Nachzerfallsleistung einen Einfluss auf den thermohydraulischen Zustand im Sumpf.

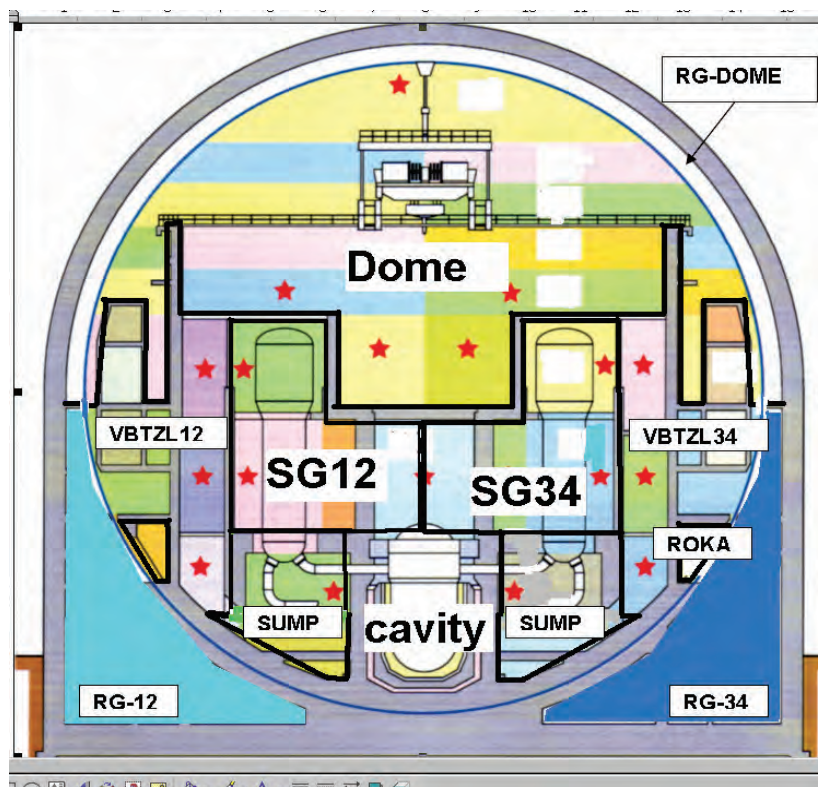


Abb. 2-19 Nodalisierung des einfachen Datensatzes einer KONVOI-Anlage

Die Auswirkungen der Modellerweiterung auf den berechneten Verlauf des Gesamtdrucks ist gering (Abb. 2-20). Dies gilt auch für die Temperaturen im Containmentsumpf (Abb. 2-21). Insbesondere für die kleinen Wasservorlagen („Pfützen“) hat die Modellerweiterung Auswirkungen. So ist es möglich dass nun diese nicht mehr vollständig verdunsten (Abb. 2-22, Abb. 2-23). Im AIM-Modul wird die Chemie im Sumpf erst bei einer vom Anwender vorgegebenen kritischen Höhe aktiviert (Option CRTHE). Die gesamte Anzahl der „aktiven“ Sümpfe ist in Abb. 2-27 dargestellt. Insbesondere der Vergleich zwischen der blauen Kurve (CRTHE = 1 mm) und der schwarzen Kurve (CRTHE = 1 cm) zeigt den Einfluss dieser Option. Die Dosisleistung be-

rechnet sich aus der aufgenommenen Nachzerfallsleistung durch die Wassermasse. In den ursprünglichen Rechnungen „NTS“ und „V2.3“ divergiert wegen dem fallenden Wasserstand die Dosisleistung (Abb. 2-25) und führt in der Folge zu höheren I_2 -Konzentrationen in der Atmosphäre (Abb. 2-26). Sobald die Wasservorlagen verdunstet sind sinkt die I_2 -Masse wieder ab. Mit der Modellerweiterung sind die berechneten Dosisleistungen (Abb. 2-24, Abb. 2-25) geringer und somit die I_2 -Masse in der Atmosphäre ebenfalls niedriger.

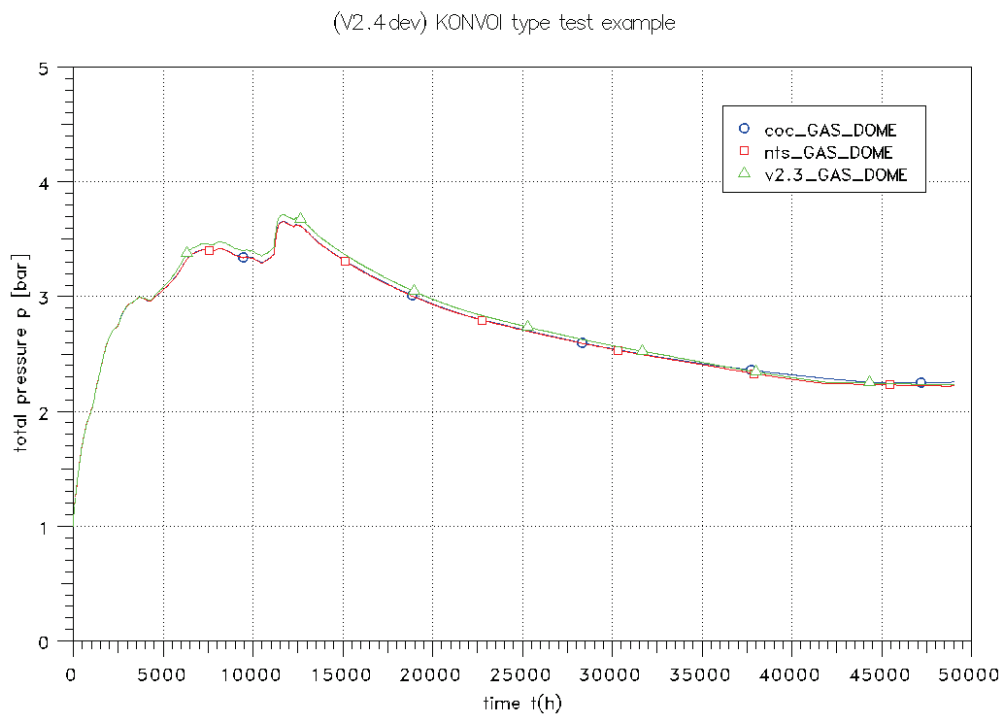


Abb. 2-20 Vergleich des Gesamtdrucks

(V2.4 dev) KONVOI type test example

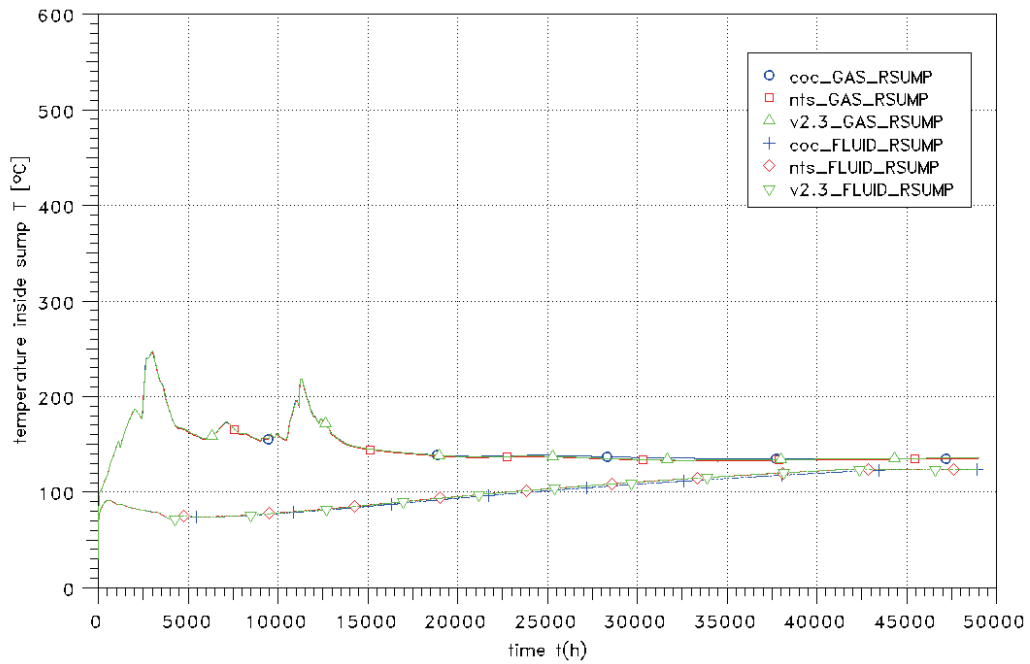


Abb. 2-21 Vergleich der Temperaturen im Containment-Sumpfbereich

(V2.4 dev) KONVOI type test example

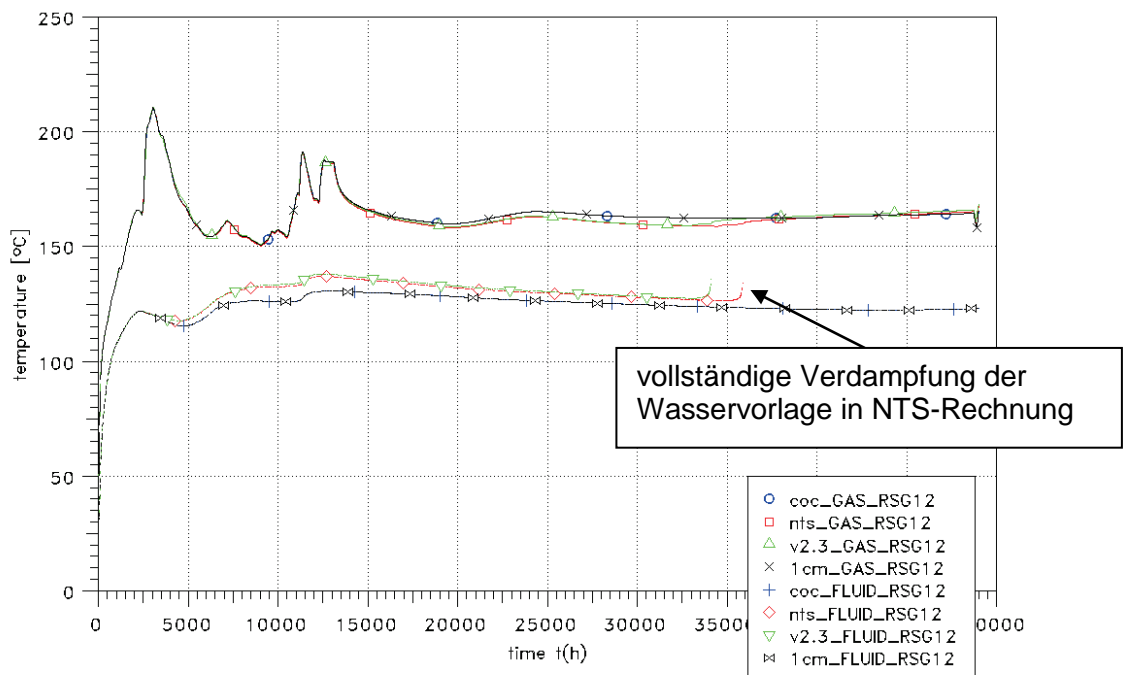


Abb. 2-22 Vergleich der Temperaturen im Bereich der Dampferzeuger SG12

(V2.4 dev) KONVOI type test example

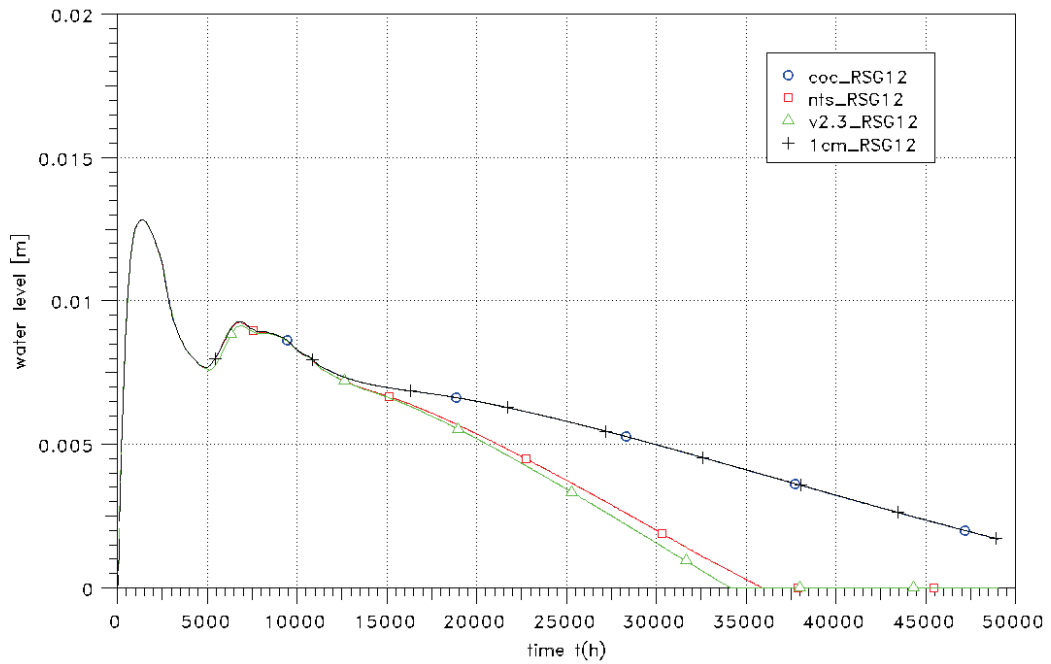


Abb. 2-23 Vergleich des berechneten Wasserstandes im Raum RSG12

(V2.4 dev) KONVOI type test example

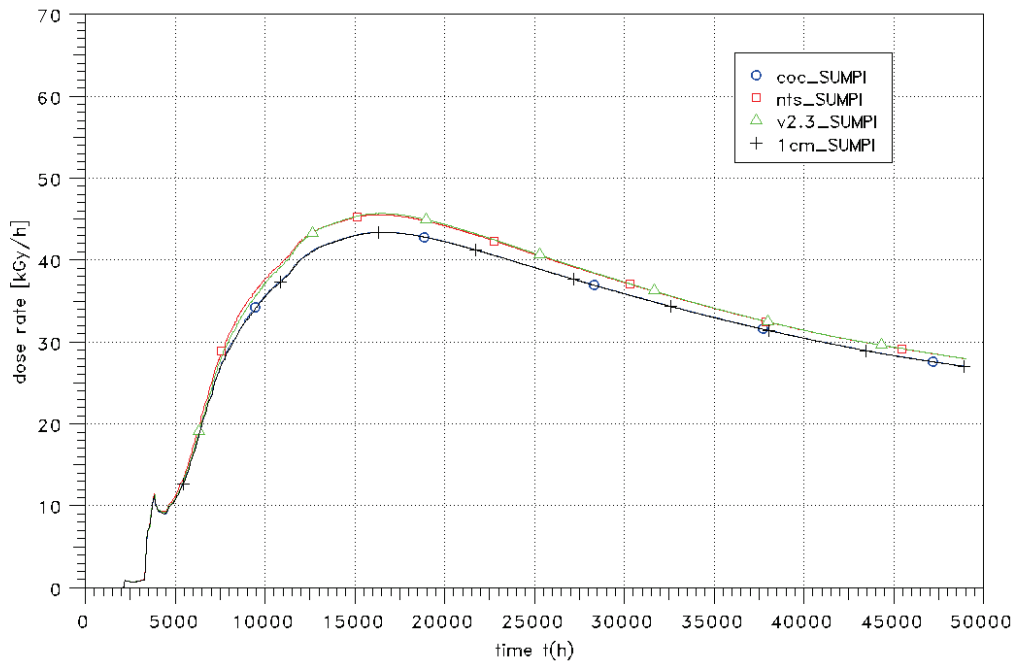


Abb. 2-24 Vergleich der berechneten Dosisleistung im Containment-Sumpf

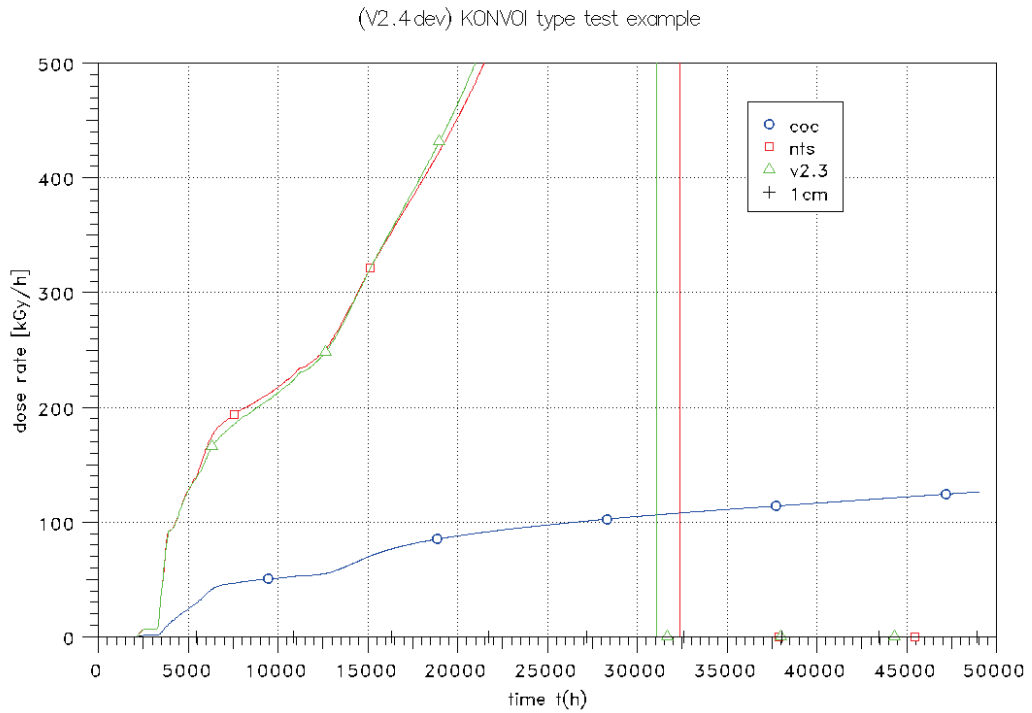


Abb. 2-25 Vergleich der berechneten Dosisleistung in SG12I

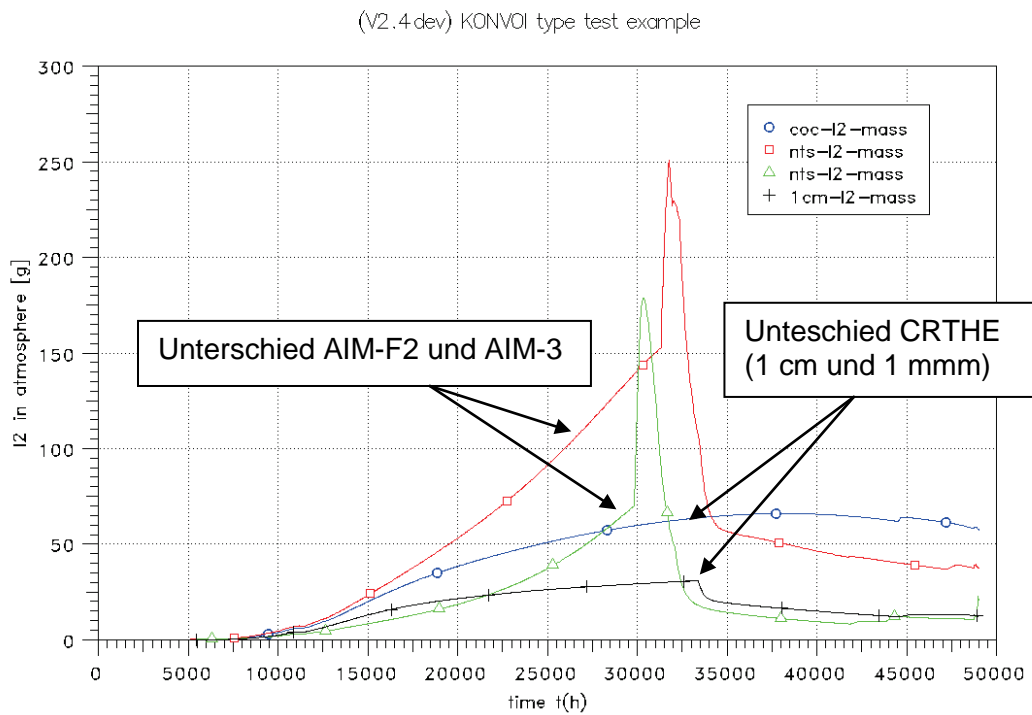


Abb. 2-26 Vergleich der gesamten I2-Masse in der Atmosphäre

(V2.4 dev) KONVOI type test example

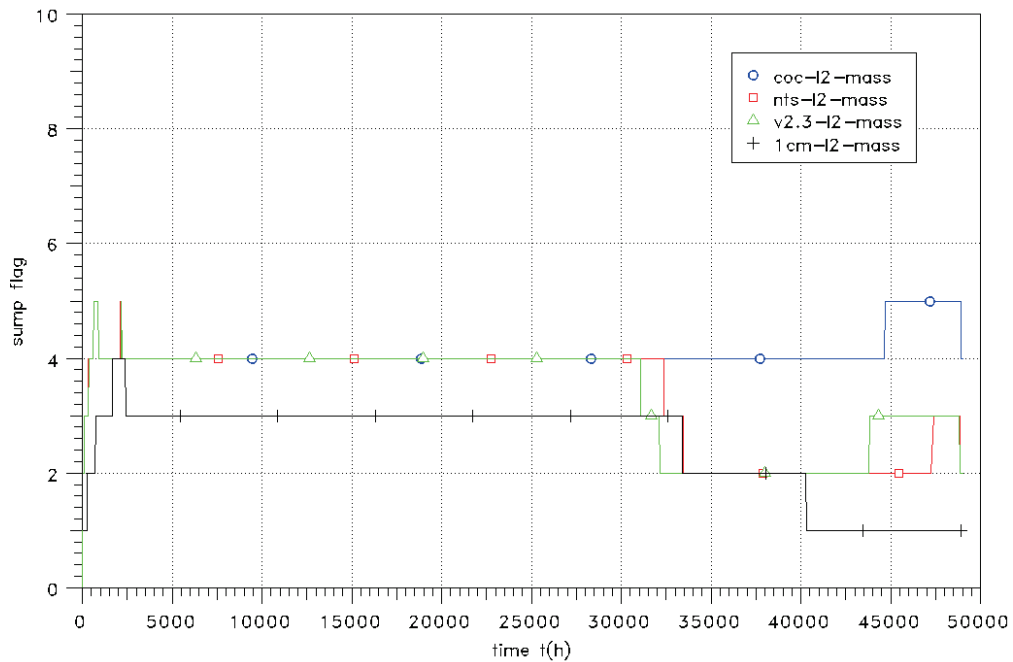


Abb. 2-27 Anzahl der Compartments mit Berücksichtigung der Iodchemie im Sumpfes

2.4.3 Fazit

Mit der durchgeführten Modellerweiterung wird die Dosisleistung insbesondere in flachen Sümpfen realistischer berechnet. Dies hat, wie in der Testrechnung gezeigt wird, einen deutlichen Einfluss auf die berechnete I_2 -Konzentration in der Atmosphäre. Großen Einfluss hat auch die Option CRTHE („kritische Wasserhöhe des Sumpfes“). Hier sollten noch weitere Untersuchungen durchgeführt werden. Die Absorption der Betastrahlung wird bisher nur sehr vereinfacht behandelt und sollte noch erweitert werden, sofern flache Sümpfe für die I_2 -Konzentration von Bedeutung sind. Für höhere Wasserstände kann eine vollständige Absorption der Betastrahlung angenommen werden. Für Sümpfe mit einer größeren Tiefe, bzw. speziellen Geometrien (z. B. Kondensationskammer im SWR) sind noch Modellerweiterungen notwendig. Wie groß der Einfluss der realen geometrischen Randbedingungen ist, sollte anhand von Vergleichsrechnungen mit spezifischen Programmen zur Berechnung der Dosisleistung überprüft werden. Ferner sollte überprüft werden, ob die Anwendung eines „Standard-Spektrums“ für die Gammastrahlung ausreichend ist.

Die Situation zur Berechnung der Dosisleistung in der Atmosphäre ist komplizierter:

- Eine Standardisierung ist (wie beim flachen Sumpf) nicht so ohne weiteres möglich.
- Die Gammastrahlung kann sich über Zonengrenzen ausbreiten, wobei die Absorption innerhalb der Atmosphäre berücksichtigt werden muss.
- Die Dosisleistung an Wandstrukturen mit abgelagerten Strukturen muss gesondert betrachtet werden (gilt im Übrigen auch für den Sumpfboden).

In der jetzigen Struktur des AFP-Hauptmoduls werden im Hinblick auf die Spaltproduktablagerung alle Wandstrukturen zusammenfassend betrachtet (entspricht dem „Host 3“ im FIPHOST Modul). Dadurch ist eine notwendige räumliche Auflösung nicht möglich. In Zukunft ist vorgesehen, jede einzelne Wandstruktur separat zu betrachten. Dies ist notwendig im Hinblick auf die Berechnung der Dosisleistung in der Atmosphäre.

2.5 Einheitliche Bilanzierung in AFP

2.5.1 Konzeption einer einheitlichen konsistenten und gemeinsamen Bilanzierung im AFP-Hauptmodul

Der Hauptmodul AFP besteht aus den Modulen AERIKA zur Berechnung des Aerosolverhaltens, AIM zur Simulation der Iodchemie, FIPHOST und FIPISO zur Simulation des Spaltprodukttransports und des Nuklidverhaltens (Nachzerfall) sowie SPARC-B zur Simulation des 'pool scrubbing'. Alle diese einzelnen Module benutzen eigene Bilanzen. Die Kopplung erfolgt über Ratenberechnungen. Teilweise werden in diesen Modulen verschiedene Modellansätze für gleiche Phänomene verwendet (z. B. Abwaschvorgänge von Aerosolen und Spaltprodukten).

Es ist dringend erforderlich, eine gemeinsame konsistente Bilanz für alle Module zu implementieren. Vorgesehen ist, dass sämtliche Module ihre Daten aus dieser Bilanz lesen, daraus die für das Modul relevanten Daten (z. B. Aerosole) definieren, entsprechende Rechnungen soweit möglich wie bisher ausführen und abschließend die Bilanzen in entsprechender Weise modifizieren. Ein solches Verfahren würde eine konsistente Bilanz für alle Module und Spezies (Eindeutigkeit) gewährleisten. Ein Kopplungs-

fehler besteht nur noch darin, dass die verschiedenen zeitlich parallelen physikalischen Prozesse hintereinander betrachtet werden.

2.5.1.1 Beschreibung der Problematik

Im AFP-Hauptmodul sind folgende Module enthalten:

- Aerosolmodul AERIKA zur Simulation des Aerosolverhaltens (Ablagerung, Größenklassenverteilung, Hygroskopie, Nebel usw.),
- Spaltproduktmodul FIPHOST zur Simulation des Spaltprodukttransports,
- Iodchemie AIM,
- Nuklidverhalten FIPISO,
- Pool scrubbing-Modul SPARC (hat keine Bilanz).

Im Folgenden werden die vorhandenen Probleme im Detail aufgelistet:

Inkonsistente und mehrfache Bilanzen

Im AFP-Hauptmodul werden teilweise Bilanzen für bestimmte chemische Verbindungen mehrfach geführt. Diese sind:

- Csl, Agl und Ag
Bei einer engen Kopplung zwischen dem Aerosolmodul AERIKA und dem Iodchemiemodul AIM (Option KAEJOD = 2) wird das Aerosolverhalten der oben genannten chemischen Verbindungen bzw. Elemente in AERIKA gerechnet. Die luftgetragenen Mengen (Aerosolkonzentrationen) werden unmittelbar in AIM verwendet. Dies ist insofern möglich, da eine chemische Reaktion für aerosolförmige Verbindungen in der Atmosphäre nicht simuliert wird.
- Ag
Das Element Silber wird ebenfalls in FIPHOST betrachtet. Die Kopplung erfolgt über Raten. Aufgrund von Modellunterschieden im Abwaschmodell sind unterschiedliche Werte in den Bilanzen für abgelagerte Silbermengen möglich.
- Einspeiseraten
Je nach Kopplung zwischen AERIKA und AIM muss Csl, Agl und Ag nur als "Aero-

sol" eingespeist bzw. als "Aerosol" und "Iodspezies" eingespeist werden. Dies erschwert die Handhabung des Programms, da der Nutzer eine detaillierte Kenntnis über die Kopplung dieser Verbindungen bzw. Elemente benötigt.

- Kopplung mittels Übertragung von Raten (z. B. Ablagerungsraten)
Die Kopplung erfolgt mittels Ratenberechnung. Dies führt automatisch zu Kopplungsfehlern im Hinblick auf konsistente Massen. Weiterhin ist die Struktur des Programmsystems sehr komplex. Einbau von neuen Transportphänomenen (wie Wasserdrainage von Wand zur Wand) ist sehr komplex und daher fehleranfällig.

Mehrfache Modellierung von Phänomenen und unterschiedliche Konzepte

Unterschiedliche geometrische Abbildung und Grenzen in der Bilanzierung

Im Modul AERIKA werden die luftgetragenen Aerosolmassen in der Atmosphäre und die abgelagerten Aerosolmassen bilanziert, dabei wird zwischen Decke, Seitenwand und Boden unterschieden. Die Aerosolmassen im Sumpf werden nur vereinfacht über die so genannte Restkonzentration betrachtet. In FIPHOST werden die Spaltproduktmassen in der Atmosphäre, im Sumpf und die an "Atmosphären"- und "Sumpf"-Wänden abgelagerten Massen simuliert. Im Iodmodul AIM wird das Verhalten der Spezies in der Atmosphäre, im Sumpf und an den Wänden (zugeordnet zu Atmosphäre und Sumpf) unterschieden nach den Oberflächentypen Farbe, Stahl und Beton simuliert. Eine separate Betrachtung einzelner im Thermohydraulikmodul simulierter Wandstrukturen ist in allen Modellen nicht vorgesehen. Die unterschiedliche geometrische Betrachtung und die Grenzen der Bilanzen führen zwangsläufig zu unterschiedlichen Modellkonzepten und im Folgenden zu unterschiedlichen Ergebnissen in den Bilanzen. Da einzelne Verbindungen bzw. Elemente doppelt geführt werden (siehe oben), können die Werte inkonsistent sein. Insbesondere für Iodverbindungen entstehen Schwierigkeiten, da es nicht eindeutig ist, welche Daten für den Quellterm verwendet werden sollen.

Unterschiedliche Modelle zum Abwaschen

Durch das Ablauen von Wandkondensat können auch Aerosole und Spaltprodukte von den Wänden abgewaschen werden. Hierzu sind in den verschiedenen Modulen AERIKA, FIPHOST und AIM Modelle enthalten, die sich inhaltlich, aber auch konzeptionell unterscheiden. Im Abwaschmodell von AERIKA wird per Eingabe eine Filmdicke vorgegeben. Mit der Wandfläche und der Filmdicke wird das Volumen des Wasserfilms berechnet. Hieraus wird mit Hilfe der vorgegebenen komponentenspezifischen Rest-

konzentration die an der Wand verbliebene Aerosolmasse bestimmt. Die "überschüssige" Aerosolmasse kann dann abgewaschen werden. In FIPHOST dagegen wird ein Abwaschfaktor per Eingabe vorgegeben. Damit wird das Verhältnis zwischen Abwaschrate und Kondensationsrate festgelegt. Sofern der Abwaschfaktor größer als Null ist, werden die zugehörigen Spaltprodukte bei Kondensation langfristig vollständig abgewaschen. Im Iodchemiemodell AIM wird entsprechend der Eingabegröße ACOND festgelegt, ob trockene bzw. nasse Randbedingungen vorliegen. Entsprechend wird dann der Transport abgelagerter Iodspezies berechnet.

Je nach thermohydraulischen Randbedingungen können die Unterschiede in den Modellannahmen, deren Eingabegrößen sowie der unterschiedlichen Konzepte zu erheblichen Unterschieden in der Verteilung der Spaltprodukte führen.

Unvollständige Modellierung

Im Folgenden werden die zurzeit offenen Punkte bzgl. der Modellierung des Spaltproduktverhaltens aufgelistet:

- Im Thermohydraulikmodul ist es nun möglich, Wandkondensat direkt an andere tiefer liegende Wandstrukturen weiterzuleiten, sofern diese direkt vertikal übereinander stehen. Damit entfällt der indirekte (und nicht realistische) Weg über den Sumpf der anliegenden Zone. Allerdings wurde der entsprechende Transport von Aerosolen und Spaltprodukten mit dem Kondensatfilm noch nicht modelliert.
- Kopplung Iodchemie und FIPHOST/FIPIISO
Im Iodchemiemodul AIM wird der Massentransfer aufgrund von verschiedenen Prozessen (z. B. zwischen Sumpf und Atmosphäre, Desorption und Adsorption und Wänden usw.) berechnet. Dieser Massenaustausch wird in FIPIISO/FIPHOST bisher nicht berücksichtigt. Somit ist die direkte Verwendung von FIPIISO-Daten zur Bewertung des Quellterms nicht sinnvoll, sondern es sollten hier die Ioddaten aus AIM verwendet werden. Die Nuklidspektren sind entsprechend umzurechnen.
- Kopplung Schmelze/DCH mit FIPHOST/FIPIISO
Der Spaltprodukttransport durch DCH (Direct Containment Heating - Schmelzeintrag in die Containmentatmosphäre bei RDB-Versagen unter erhöhten Innendruck) wird in FIPHOST/FIPIISO nicht berücksichtigt. Ebenso ist die Freisetzung von Aerosolen und Spaltprodukten aus der Schmelze nicht modelliert.

- Freisetzung von Aerosolen in der Wasserphase
Es ist möglich, Spaltprodukte und Iodspezies in der Wasserphase freizusetzen (wasserhaltiger Bruchmassenstrom, Freisetzung über S&E-Ventile). Dies gilt bisher aber nicht für Aerosole.

2.5.1.2 Konzeption der neuen gemeinsamen Bilanz

In diesem Kapitel wird die Konzeption der gemeinsamen Bilanz von Aerosolen, Spaltprodukten und Iodspezies im Detail beschrieben. Im Hinblick auf die geplante Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP wird hier nun auch zusätzlich das Gesamtkonzept näher betrachtet. Dies bedingt, dass zum Teil auch die Übergabe der thermohydraulischen Randbedingungen in Zukunft etwas überarbeitet werden muss.

Geometrie des Gesamtproblems

Im ersten Schritt wird die Geometrie des Problems beschrieben. Im Gegensatz zu dem bisherigen Vorgehen soll die Geometrie für alle Module identisch sein. Sämtliche Wandoberflächen werden separat betrachtet, d. h. es wird keine Zusammenfassung von Wänden und Mittelung der thermischen Randbedingungen durchgeführt. Eine Wandoberfläche hat drei Zustände: trocken, nass und eingetaucht im zugehörigen Sumpf (Abb. 2-28). Die Flächenanteile der jeweiligen Zustände sollen vom Thermohydraulik-Hauptmodul berechnet werden. Ob die Wände auch innen (thermodynamisch) getrennt betrachtet werden sollen, muss noch diskutiert werden. In Anbetracht der Tatsache, dass unter Umständen die Flutung ganzer Raumbereiche vorgesehen ist, kann eine solche Einteilung sinnvoll sein. Die Ausrichtung der Wandoberfläche kann beliebig sein.

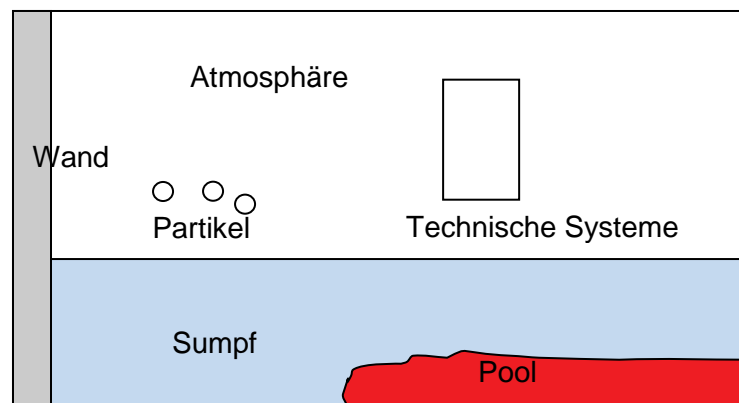


Abb. 2-28 Geometrie des Gesamtproblems

Die Oberflächeneigenschaften einer Wand (Struktur) sind somit wie folgt:

- Ausrichtung (Boden, Decke, vertikal, schräg)
- Oberflächeneigenschaften (Beton, Stahltyp, Farbtyp)
Es können unterschiedliche Stahl- und Farbtypen vorgegeben werden, da die Reaktionskonstanten in der Iodchemie unterschiedlich sein können.
- Bedeckung (trocken, nass, unterhalb der Sumpfoberfläche)
Die Flächenverhältnisse können sich zeitlich ändern. Dies soll durch das THY-Hauptmodul berechnet werden. Die Bilanzen werden getrennt durchgeführt und entsprechend der Änderung der Flächenverhältnisse entsprechende Transferraten berechnet.
- Wasserfilm
Bisher wird der Wasserfilm im THY-Hauptmodul nicht unbedingt separat betrachtet (nur bei Verwendung der Wasserfilmoption). Es ist angedacht, für den Wasserfilm immer eine separate Massenbilanz und - wenn möglich - eine Energiebilanz durchzuführen. Somit können dann Spaltproduktkonzentrationen im Wasserfilm betrachtet werden.
- Technische Systeme
Die Anlagerung von Aerosol- und Spaltprodukten in technischen Systemen, welche nicht durch Wandstrukturen abgebildet werden, muss ebenfalls möglich sein. Hier sind vor allem katalytische Rekombinatoren und Filtersysteme zu nennen.

Hierarchie der Bilanzen

In der vorgesehenen Konzeption hinsichtlich der Bilanzen wird vorgeschlagen, verschiedene Hierarchien einzuführen. In der höchsten Hierarchie wird die örtliche Lage der Spezies unterschieden. In der zweiten Hierarchie wird die Komposition der Spezies betrachtet. Diese können gasförmig, aerosolförmig oder gelöst sein. Die darunter liegende Ebene unterscheidet chemische Verbindungen. In den folgenden beiden Ebenen werden die Elemente und die Isotope betrachtet. Ein Gesamtüberblick wird in Abb. 2-29 dargestellt.

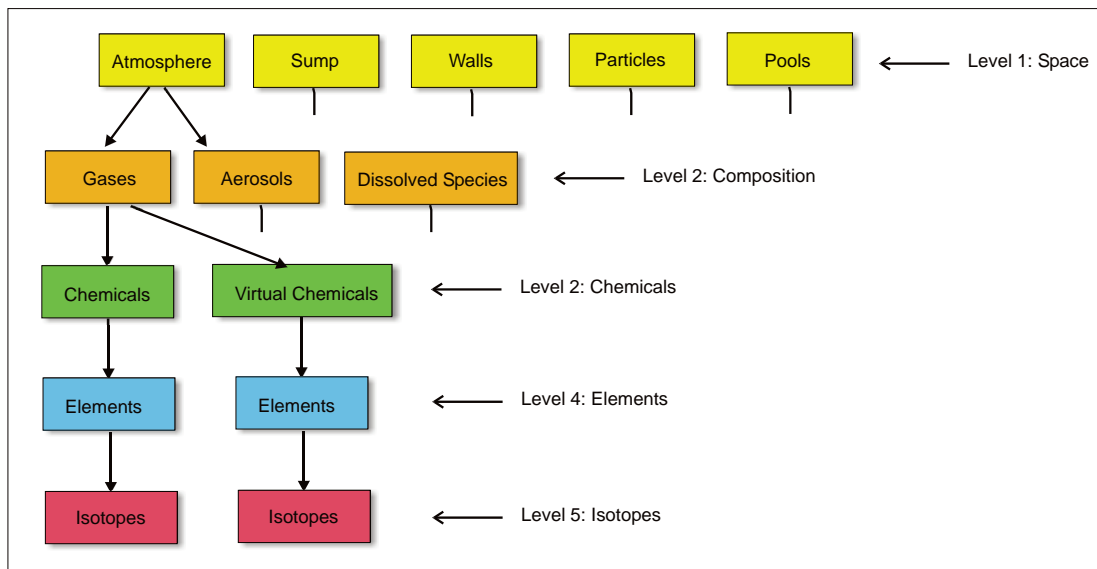


Abb. 2-29 Hierarchie der Bilanzen

Im Folgenden werden die Hierarchien näher erläutert:

– Ebene 1: Lage

In dieser Ebene wird die Lage der Spezies unterschieden. Folgende Lagen (Orte) sind dabei vorgesehen:

- Atmosphäre unterschieden nach Zonenteil
- Wand (unterschieden nach trocken, nass und unterhalb Sumpfoberfläche)
- im Wasserfilm
- im Sumpf
- in Partikeln (unterschieden nach DCH-Partikel, Sprühtröpfchen)
- in Pools (z. B. Schmelzpool)

– Ebene 2: Komposition

In dieser Ebene wird unterschieden nach grundlegenden physikalischen Eigenschaften. Folgende Möglichkeiten sind vorgesehen:

– Gasförmige Kompositionen

Hier werden alle gasförmigen Spezies betrachtet. Mögliche Orte sind die Atmosphäre(n) in einer Zone, im Sumpf einer Zone und eingelagert in feste Strukturen wie Wände.

– Aerosolförmige Kompositionen

In aerosolförmigen Kompositionen wird die Größenverteilung betrachtet. Aero-

sol förmige Kompositionen können eine oder mehrere chemische Verbindungen enthalten (z. B. die separate Betrachtung von Csl oder die Zusammenfassung aller festen Spaltprodukte in einem Aerosol). Ferner ist es möglich, dass gasförmige (und flüssige) Spezies eingelagert sind. Auch die Berücksichtigung sehr unterschiedlicher Größenklassen bei der Freisetzung soll möglich sein. So ist vorgesehen, Aerosole mit sehr unterschiedlicher Größenverteilung (Aerosole aus dem Kühlkreislauf und aus der Schmelze- Beton-Wechselwirkung) getrennt betrachten zu können. Aerosole an verschiedenen Orten (Lagen) werden getrennt bilanziert. Mögliche Orte (Lagen) sind: luftgetragen, abgelagert (trockene Wand und nasse Wand, Wand unterhalb Sumpfoberfläche), Wasserfilm, Sumpf.

- Gelöste Kompositionen

Hier wird das Spaltproduktinventar in Sprühtröpfchen und in DCH-Partikeln bilanziert sowie Schmelzepools. Da ein Transport dieser Partikel über Zonengrenzen hinweg vorgesehen ist, ist eine separate Bilanzierung sinnvoll.

- Ebene 3: Chemische Verbindungen

In dieser Ebene werden chemische Verbindungen betrachtet.

- Ebene 4: Elemente

In dieser Ebene werden die einzelnen Elemente betrachtet.

- Ebene 5: Isotope

In dieser Ebene werden die Isotope betrachtet.

Beziehungen zwischen den Hierarchien

Die Beziehungen in den Ebenen 3 bis 5 sind eindeutig, d. h. die Gesamtmasse aller Isotope eines Elements gibt die Elementmasse wieder und die Beziehung zwischen Element und chemischer Verbindung ist über die Stöchiometrie der chemischen Verbindung bestimmt. Die Ebene 5 wird nur verwendet, wenn das Modul FIPISO aktiv ist. In den Rechnungen wird nicht für alle Elemente die Chemie betrachtet. Diese werden dann formal in "virtuellen" chemischen Verbindungen zusammengefasst.

Die Relation zwischen Ebene 2 und 3 wird über Massenanteile bestimmt, z. B. die chemische Zusammensetzung eines Gases und die von Aerosolen. Werden Aerosole oder Gase transportiert, müssen die entsprechenden chemischen Verbindungen ebenfalls transportiert werden. Ein Kopplungsfehler besteht darin, dass die verschiedenen zeitlich parallelen physikalischen Prozesse hintereinander betrachtet werden. Im Einzelnen heißt das: Modul A und B benutzen nicht den Ausgangszustand $y(t_0)$, sondern Modul A benutzt den Ausgangszustand $y(t_0)$ und definiert einen neuen Zustand $y_A(t_1)$, der dann von Modul B als $y_A(t_0)$ benutzt wird.

Entsprechend der Lage werden verschiedene Kompositionen bilanziert. Diese sind:

- Atmosphäre: Gase, Aerosole
- Trockene Wand: Gase (z. B. im Zusammenhang mit Iodchemie), abgelagerte Aerosole (ohne Berücksichtigung der Größenverteilung)
- Nasse Wand: Gase, abgelagerte Aerosole unter Berücksichtigung der Löslichkeit und Unterscheidung zwischen transportfähigen und nicht transportfähigen Aerosolen
- Wand unterhalb der Sumpfoberfläche: Gase, abgelagerte nicht-lösliche Aerosole
- Wasserfilm: Gase, Aerosole (Berücksichtigung der Löslichkeit von Aerosolen)
- Sumpf: Gase, Aerosole (Berücksichtigung der Löslichkeit)
- Partikel: Lösung von Gasen und Aerosolen in Sprühtröpfchen, Zusammensetzung von DCH-Partikeln (chemische und elementweise Betrachtung)
- Schmelzpool: Zusammensetzung der Schmelze (chemische Verbindungen und Elemente)

Bei Prozessen auf niedrigeren Ebenen (z. B. Nuklidzerfall bilanziert in Ebene 5) müssen auch die Bilanzen in den darüber liegenden Ebenen entsprechend umgerechnet werden. D. h. bei einem Zerfall eines Isotops (z. B. I131) und damit verbundenen Elementwechsel müssen die Elemente (hier I) in Ebene 4 entsprechend umgerechnet werden. Entsprechendes gilt dann für die chemischen Verbindungen (Ebene 3) und die Massenanteile in den Aerosolen bzw. Gasen (Ebene 2). Da meistens die geänderte chemische Verbindung nicht separat bilanziert wird, werden die Elemente und Isotope auf die "virtuelle" chemische Verbindung verlagert.

Programmtechnische Umsetzung

Für die modulübergreifende Bilanzierung werden spezielle FORTRAN-95 Datenstrukturen definiert (ähnlich der Struktur zum Abspeichern der Daten für die Kopplung der Hauptmodule im Treiber). Die Verwendung von speziellen Datentypen und Strukturen (Pointer) erlaubt eine flexible Gestaltung und kann auch in Zukunft bei Bedarf entsprechend erweitert werden (z. B. aufgrund von neuen Erkenntnissen der Abwaschversuche in THAI). Der Zugriff auf diese Datenstruktur erfolgt durch noch zu erstellende spezielle Operatoren, die die konsistente Verlagerung der Bilanzen gewährleisten und die notwendigen Informationen für die verschiedenen Module extrahieren (z. B. eine bestimmte Isotopenmasse im Sumpf einer Zone über alle chemischen Verbindungen).

Eine vollständige Implementierung einer gemeinsamen, modulübergreifenden Bilanz wie in der Konzeption vorgesehen würde zum jetzigen Bearbeitungsstand des AFP-Hauptmoduls jedoch zum Teil erhebliche Ergänzungen der bereits existierenden Routinen in den Einzelmodulen erfordern. Ein wesentlicher Grund besteht darin, dass für die gemeinsame Bilanzierung von Größen die Änderungen dieser nach Einzelvorgängen (z. B. einzelnen Reaktionen) separat nachgehalten (integriert) werden müssen. Bislang liegen diese Änderungen innerhalb der Module oft nur in der Summe über viele beteiligte Einzelvorgänge (z. B. Reaktionen) vor. Daraus folgt, dass der Integrationsvektor in den einzelnen Modulen entsprechend ergänzt werden müsste. Diese Änderungen sind aber vor dem Hintergrund der in RS1185 geplanten, weitergehenden Strukturänderungen im AFP-Hauptmodul, die auch die Modellierung von vielen Einzelvorgängen betreffen, nicht sinnvoll.

Daher sind stattdessen die Überlegungen hinsichtlich einer gemeinsamen Bilanz im erweiterten Rahmen unter dem Aspekt betrachtet werden, dass zusätzlich die in

RS1185 vorgesehenen Ergänzungen in der Gesamtstruktur des AFP-Hauptmoduls mit berücksichtigt werden können. So werden in dieser Konzeption nun auch:

- die Ablagerung auf einzelne Strukturen unter zeitlich veränderlichen Randbedingungen
- Überlegungen zu Abwaschmodellen (separate Bilanzen, Teilüberdeckung der Strukturen mit Wasserfilm)
- Überlegungen zur Vervollständigung der Kopplung (AIM - FIPISO, AIM - CCI)

berücksichtigt.

Zusammenfassung

Die Einführung einer gemeinsamen Bilanz gewährleistet eine konsistente Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Containment. Mit der in RS1185 geplanten Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP werden alle Module auf dieser sehr allgemeinen Basis harmonisiert. Die Simulation weiterer Transportprozesse in der Zukunft wird damit ebenfalls sehr vereinfacht.

Die hier erzielten Ergebnisse dienen als Ausgangspunkt für die in RS1185 zu erstellende Konzeption der neuen Struktur im AFP-Hauptmodul.

2.5.2 Ergänzung der ATHLET-CD/COCOSYS-Kopplung - Quellen für die Spaltprodukte in COCOSYS

Unterschiedliche Entwicklungspfade ergeben sich insbesondere für die Kopplung externer Programme, welche separat verwaltet werden. Die erzielten Verbesserungen bei der Modellierung des Spaltproduktverhaltens im Systemcode ATHLET/ATHLET-CD Version 2.1B haben auch Auswirkungen auf die jeweiligen Quellen, die COCOSYS als Ausgangsbedingungen benötigt. Entsprechende Anpassungen sind daher erforderlich. Die erweiterte gekoppelte COCOSYS/ATHLET-CD Version wurde beispielhaft anhand eines einfachen DWR und eines Versuchs der PHEBUS-FPT-Reihe erneut getestet.

Ergänzung der COCOSYS/ATHLET-CD Kopplung

Im Laufe des Vorhabens RS 1159 wurde die ATHLET-CD Version V2.1B freigegeben. Diese unterscheidet sich hinsichtlich der Kopplung insbesondere im Modul SOPHAEROS und durch die Einbindung des Moduls FIPISO. Im Modul SOPHAEROS, das zur Simulation der Chemie und Ablagerung der Spaltprodukte im Kühlkreislauf dient, wurde insbesondere der Chemieteil erweitert. So kann nun die Freisetzung einer großen Anzahl von chemischen Verbindungen berechnet werden. In der ergänzten Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD wird nun diese Information so weitgehend wie möglich, d. h. soweit in COCOSYS diese chemischen Verbindungen berücksichtigt werden, übertragen. Bezüglich des Moduls FIPISO, der zur Simulation des Nuklidzerfalls und des Kerninventars dient, wurde die Kopplung neu entwickelt. Hier gilt es, die vorliegenden Informationen zu nutzen und sicher zu stellen, dass mit konsistenten Kerninventaren und Nuklidspektren in beiden Programmsystemen gerechnet wird.

Ein Überblick über die bestehende Kopplung wird in Abb. 2-30 gegeben. Übertragen wird der Bruchmassenstrom mit der Möglichkeit einer Rückströmung vom Containment in den Kühlkreislauf inklusive der Freisetzung von Bor und Spaltprodukten (Aerosole, Spaltprodukte und Iodspezies). Die Schnittstellen hinsichtlich Notkühlsysteme (oder allgemein Pumpsysteme) und Systemwärme werden separat berücksichtigt. Die Randbedingungen aus COCOSYS (z. B. Druck, Temperatur, Gaszusammensetzung) werden an ATHLET-CD übertragen. In ATHLET-CD ist es möglich diese Daten einzelnen GCSM-Signalen zuzuordnen, die dann wie üblich in ATHLET-CD als Randbedingung verwendet werden (Abb. 2-31).

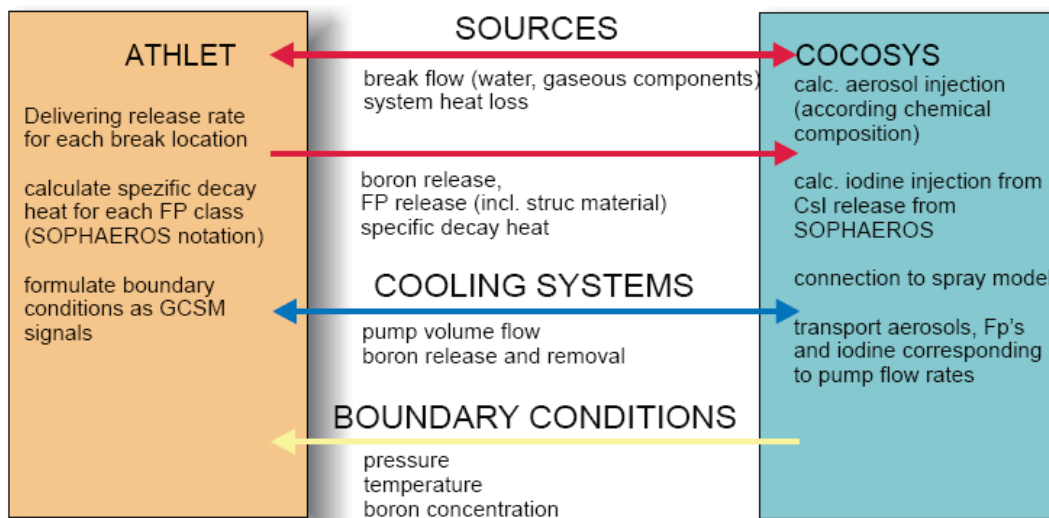


Abb. 2-30 Überblick über die COCOSYS - ATHLET-CD Kopplung

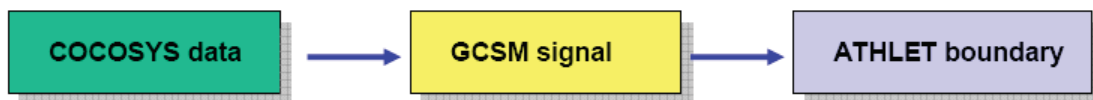


Abb. 2-31 Übertragung von COCOSYS Randbedingungen an ATHLET-CD

Im Folgenden wird auf einzelne Aspekte der COCOSYS/ATHLET-CD Kopplung vertieft eingegangen. Eine detaillierte Beschreibung wurde im COCOSYS Referenz Manual erstellt.

- **Synchronisation**

Die Synchronisation von ATHLET-CD mit dem COCOSYS Treiber und den anderen Hauptmodulen (THY und AFP) musste nicht angepasst werden. Für die Kopplung wurden Default-Werte festgelegt. Mit diesen Einstellungen wird die Synchronisation der Zeitschritte durch den Thermohydraulik-Hauptmodul vorgegeben. Die Anzahl der ATHLET-CD Unterzeitschritte ist auf 5 begrenzt.

- **Schnittstelle zwischen ATHLET-CD und COCOSYS**

Die Abb. 2-32 gibt einen Überblick über die verwendeten Datenstrukturen für die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS. Die Daten hinsichtlich Bruchmassenstrom, Systemwärme und Pumpenmassenströme werden in der Datenstruktur Y_GLOBAL_INTERFACE des Treibers für jeden ATHLET-CD (Unter)Zeitschritt gespeichert. Bezüglich der Spaltprodukte wird zu Beginn der Rechnung analysiert, ob die in SOPHAEROS betrachtete chemische Verbindung auch im

Hauptmodul AFP als Aerosol (z. B. CsOH) bzw. als Iodchemiekomponente (z. B. I₂) verwendet wird. Wenn ja, werden die Ergebnisse von SOPHAEROS direkt in AFP verwendet. Für alle nicht in COCOSYS bekannten chemischen Iodverbindungen wird abgefragt, ob diese unter Containmentrandbedingungen gas- oder aerosolförmig sind. Diese Verbindungen werden dann stöchiometrisch umgerechnet dem I₂ bzw. CsI zugeordnet. Damit ist sichergestellt, dass die freigesetzte Iodmenge aus ATHLET-CD auch im Iodmodul AIM von COCOSYS berücksichtigt wird. Für die "restlichen" Elemente kann der Nutzer per Eingabe eine Zuordnung zu den entsprechenden Aerosolkomponenten vorgeben.

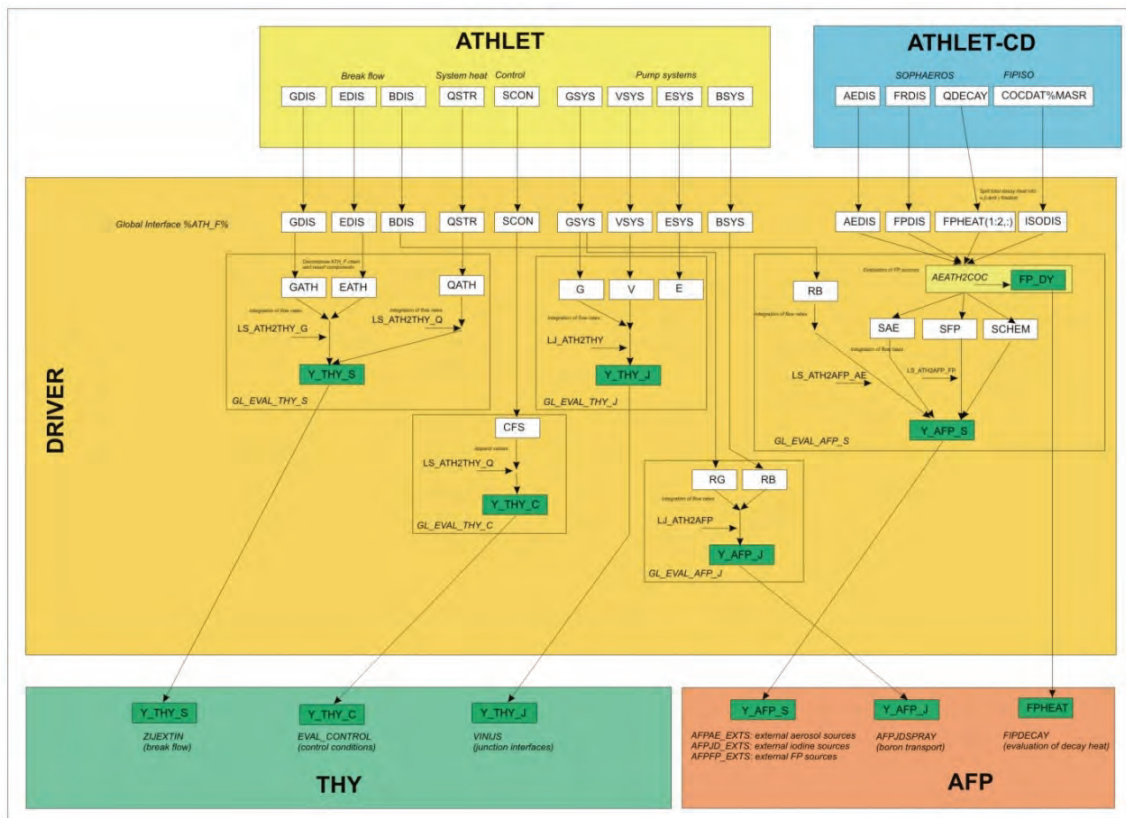


Abb. 2-32 Überblick über die Datenstrukturen für die COCOSYS/ATHLET-CD Kopplung

- **Verwendung von Nukliddaten**

Wenn in ATHLET-CD das Modul FIPISO verwendet wird, wird die berechnete komprimierte Nuklidbibliothek (mit reduzierter Anzahl der Nuklide) auch in COCOSYS verwendet. Wie auch in der 'stand alone'-Rechnung, wird die Elementliste auf die Isotopenliste erweitert. Allerdings ist es jetzt auch möglich, zusätzliche Elemente (z. B. Strukturmaterialien) zu verwenden. Die mögliche Nachzerfallsleistung (z. B. aktivierte Strukturmaterialien) dieser zusätzlichen Elemente wird auch nach COCOSYS übergeben. Der zeitliche Ablauf hinsichtlich FIPISO wurde in bei-

den Modulen abgestimmt. Die Isotopenspektren der einzelnen Elemente werden nach COCOSYS übergeben und dort entsprechend verwendet. Somit entfällt die Kerninventarberechnung in COCOSYS.

- **Übergabe von "externen" Daten nach ATHLET-CD**

Die Schnittstelle wurde dahingehend erweitert, dass Informationen zu Signalen und Massen- und Enthalpieströme an Ausgängen von Pumpsystemen nach ATHLET-CD übergeben werden können. Signale können z. B. für den Reaktorschutz verwendet werden. Der Transfer der Massen- und Energieströme ermöglicht es, Notkühlsysteme auf der COCOSYS-Seite zu simulieren und die Ergebnisse als so genannten "Fill" in ATHLET-CD zu verwenden.

Test anhand eines einfachen DWR-Beispiels

Die gekoppelte COCOSYS/ATHLET-Version wurde anhand eines einfachen DWR-Datensatzes getestet. Die Eingabedaten für ATHLET basieren auf einem entsprechenden Testbeispiel DWR01. Dieser wurde mit einem einfachen Containmentdatensatz (16 Zonen) von COCOSYS gekoppelt. Betrachtet wird ein 400 cm^2 kaltseitiges Leck. Die Hochdruckeinspeisung wird als ausgefallen angenommen. Die Niederdruck-Notkühlsysteme stehen zur Verfügung. Zur Überprüfung der Kopplung wurden einige Daten hinsichtlich ihrer Konsistenz überprüft. Die Ergebnisse von ATHLET werden in roten Kurven dargestellt, die von COCOSYS sind blau.

Abb. 2-33 zeigt den Verlauf des Drucks im Reaktordruckbehälter (RDB) und im Containment. Durch das Leck fällt der Druck rapide ab und pendelt sich aufgrund der Niederdruckeinspeisung bei ca. 7 bar ein. Ob die berechneten Druckschwingungen realistisch sind, ist fraglich, wird aber hier nicht weiter betrachtet. Bei ca. 350 s ist der Druck im Primärkreis niedriger als im Containment, so dass kurzzeitig eine Rückströmung auftritt. Der berechnete Wasserstand im Druckhalter ist in Abb. 2-34 dargestellt. Der minimale Wert wird etwa zum Zeitpunkt der Rückströmung berechnet. Ab ca. 330 s ist der Druck im RDB so niedrig, dass Wasser über die Niederdruck-Notkühlsysteme in den Primärkreis gepumpt werden kann. Auch hier werden starke Oszillationen berechnet.

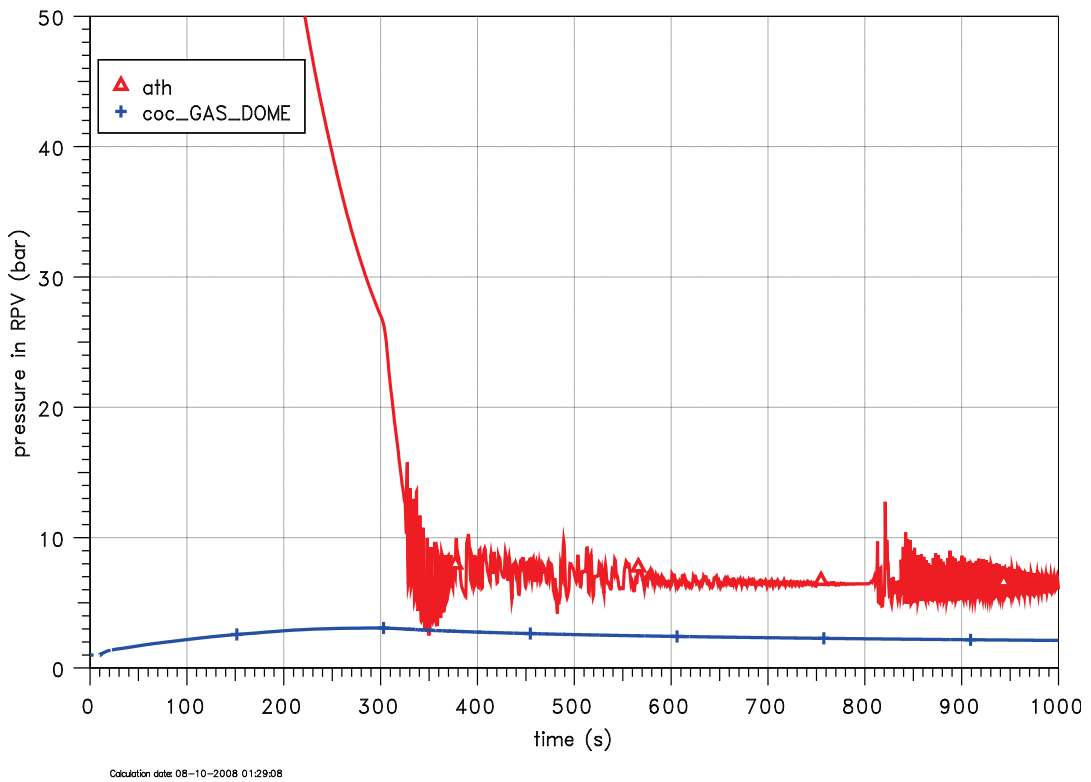


Abb. 2-33 Druck im Reaktordruckbehälter und Containment

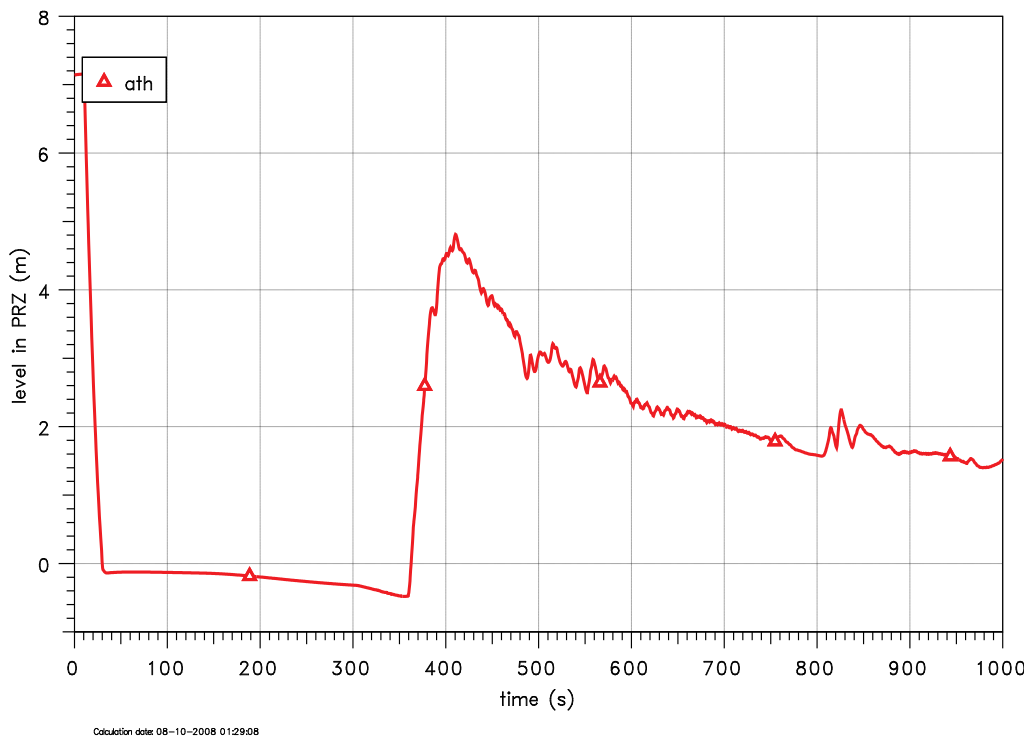


Abb. 2-34 Wasserstand im Druckhalter

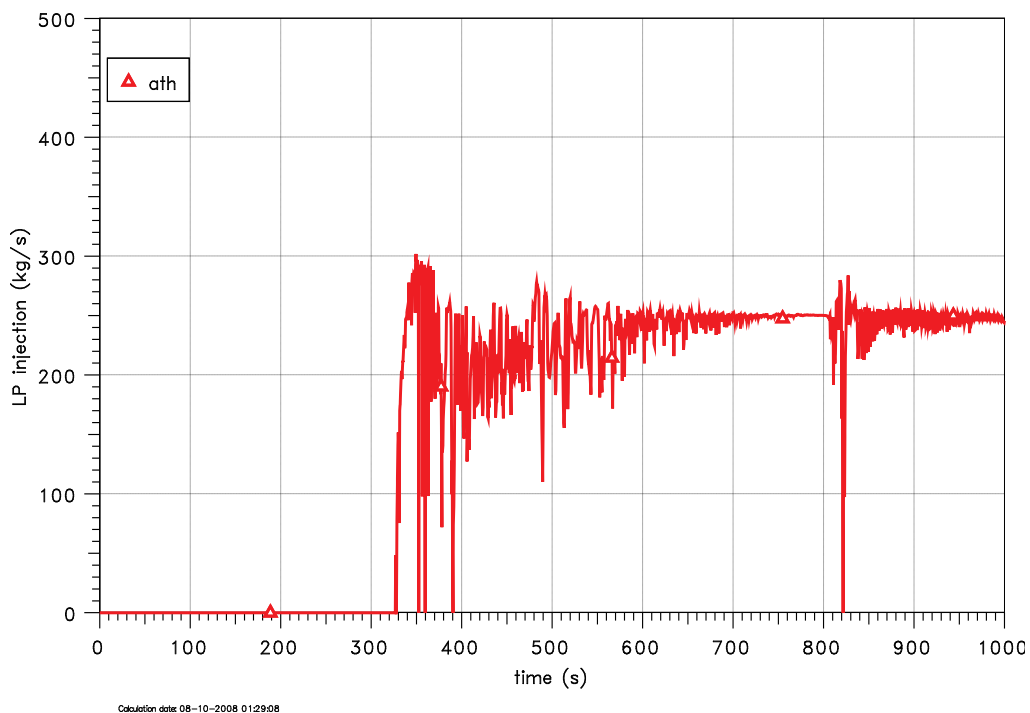


Abb. 2-35 Pumpmassenstrom der ND-Notkühlsysteme

Abb. 2-36 und Abb. 2-37 zeigen den Vergleich des Leckmassen- und Leckenergiestroms in ATHLET und COCOSYS. Zuerst strömt Wasser aus dem Leck, gefolgt von einer Freisetzung von Dampf. Mit dem Beginn der ND-Einspeisung tritt wieder Wasser aus dem Leck. Auch hier werden wieder starke Schwingungen berechnet. Die Ergebnisse von COCOSYS (blaue Kurven) zeigen zum Teil höhere Spitzenwerte. Ursache ist, dass in COCOSYS alle Rechenschritte gespeichert werden. In ATHLET wurde eine Plotzeitschrittweite von 0,5 s verwendet. Weiterhin sind die internen Zeitschritte von ATHLET und THY (Thermohydraulik-Hauptmodul) nicht gleich. Zur Gewährleistung der Massenbilanz werden die Leckmassenströme im COCOSYS-Treiber integriert und dann im THY-Hauptmodul wieder gemittelt über den THY-Zeitschritt differenziert. Die integrale Massenfreisetzung wird in Abb. 2-38 dargestellt. Die Werte in ATHLET und COCOSYS stimmen überein.

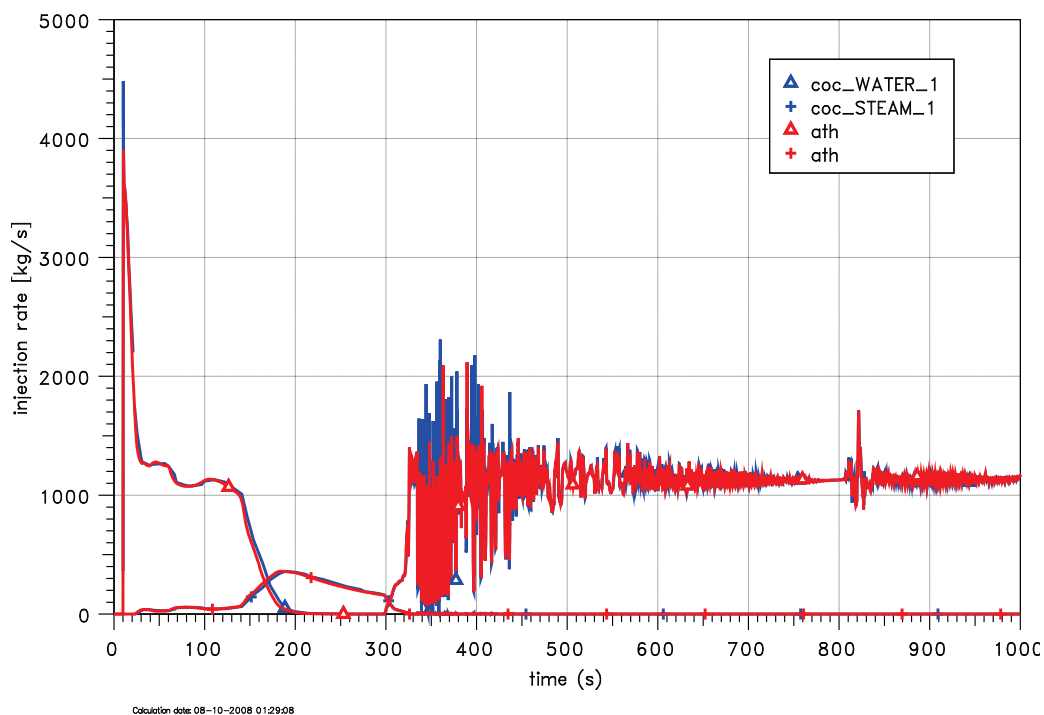


Abb. 2-36 Vergleich der Leckmassenströme in ATHLET und COCOSYS

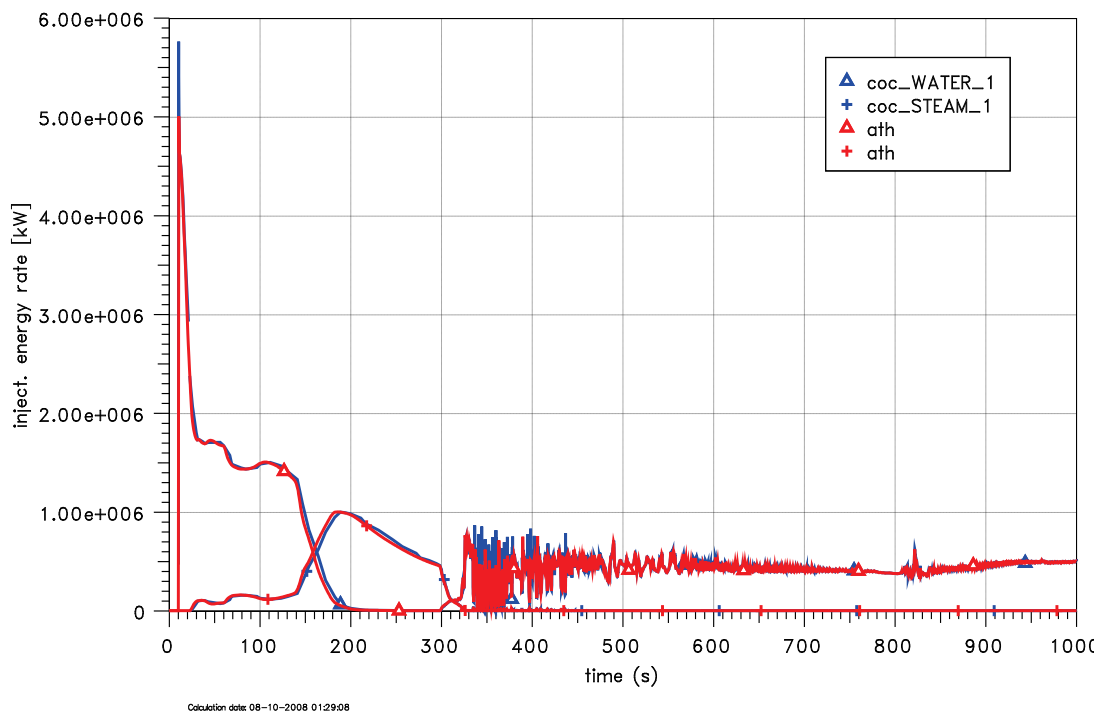


Abb. 2-37 Vergleich der Leckenergieströme in ATHLET und COCOSYS

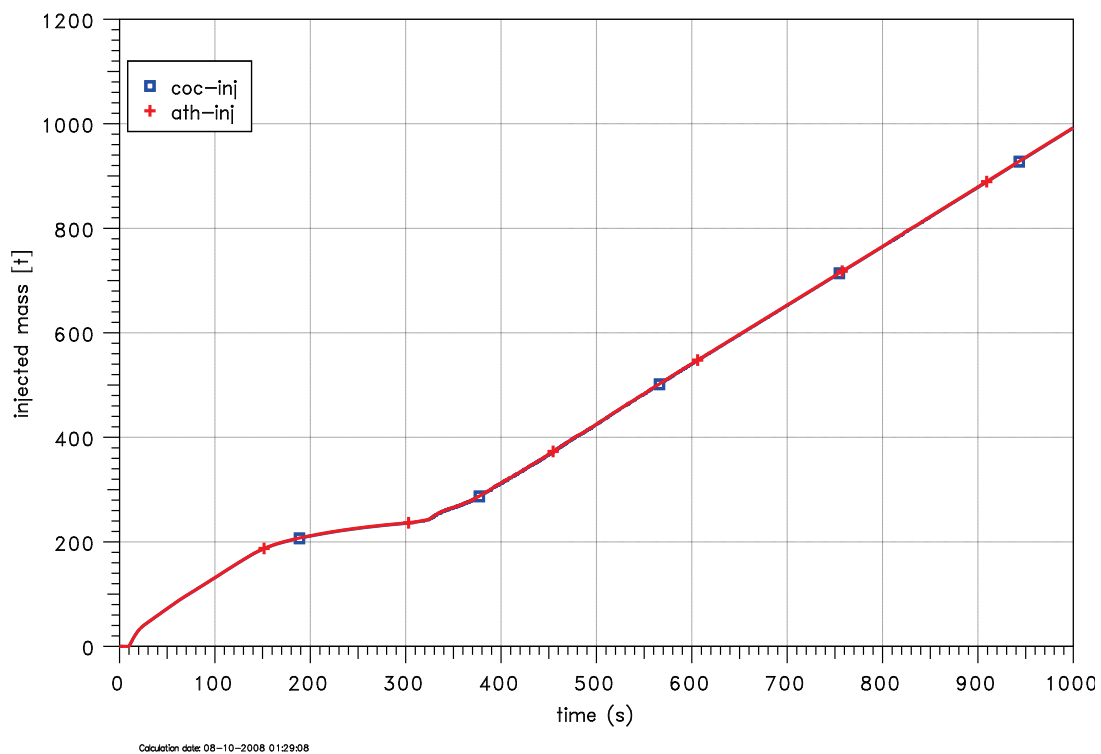


Abb. 2-38 Vergleich der integralen Massenfreisetzung

Der trockene Wärmeaustausch des Reaktorkühlkreislaufes mit dem Containment wird als Systemwärme bezeichnet. Als Randbedingungen werden die Außentemperaturen übertragen. Abb. 2-39 zeigt die Übereinstimmung der Zonentemperatur in der Zone RCAVITY und den Außentemperaturen des RDB in der ATHLET-Rechnung. Der Gesamtwärmestrom ist in Abb. 2-40 dargestellt und zeigt ein konsistentes gegenläufiges Verhalten zu den Außentemperaturen.

Das freigesetzte Bor aus dem Primärkreis in das Containment wird in Abb. 2-41 verglichen. Auch hier stimmen die Ergebnisse überein. Der Transport des Bors innerhalb des Containments wird im Iodchemiemodul innerhalb des AFP-Hauptmoduls berechnet.

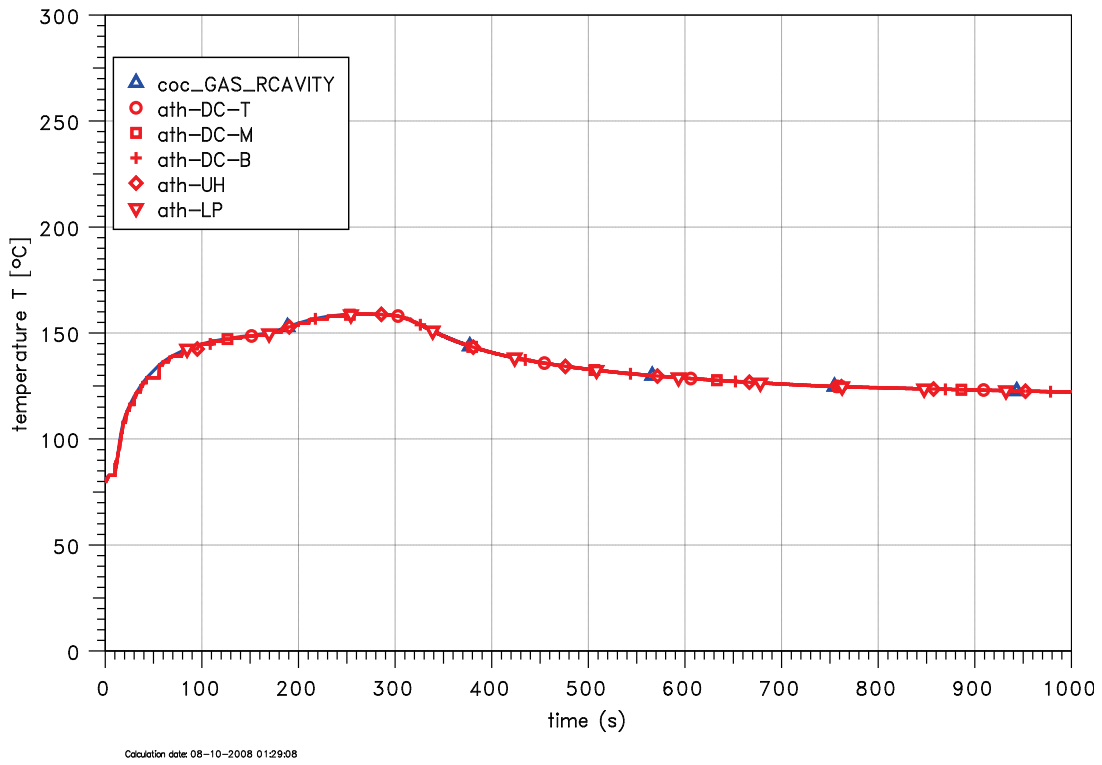


Abb. 2-39 Vergleich der "Außentemperaturen" des RDB

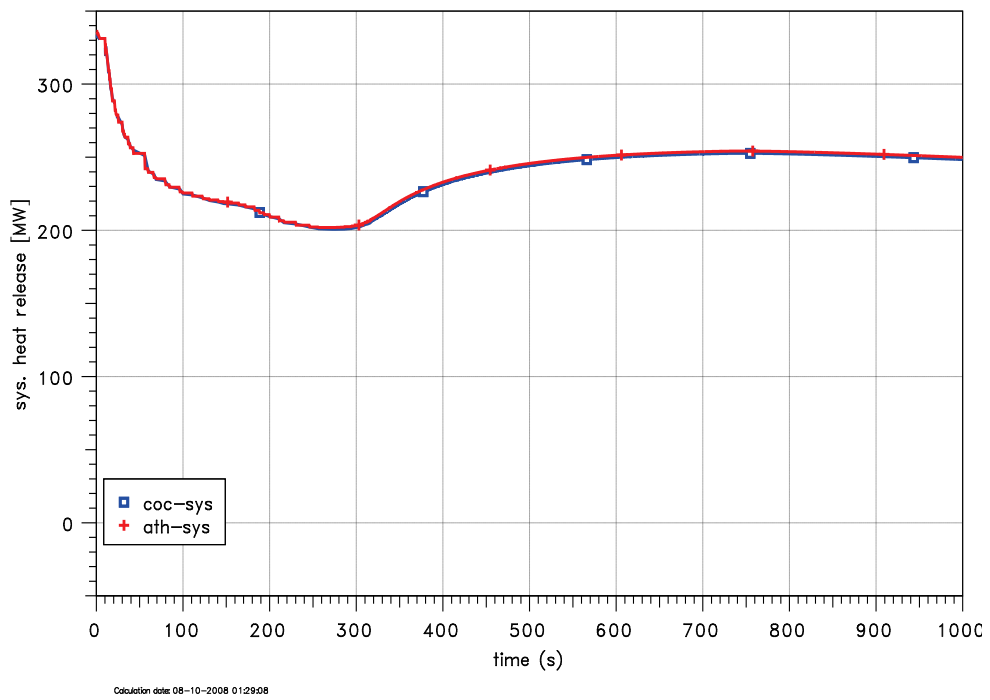


Abb. 2-40 Freisetzung der Systemwärme

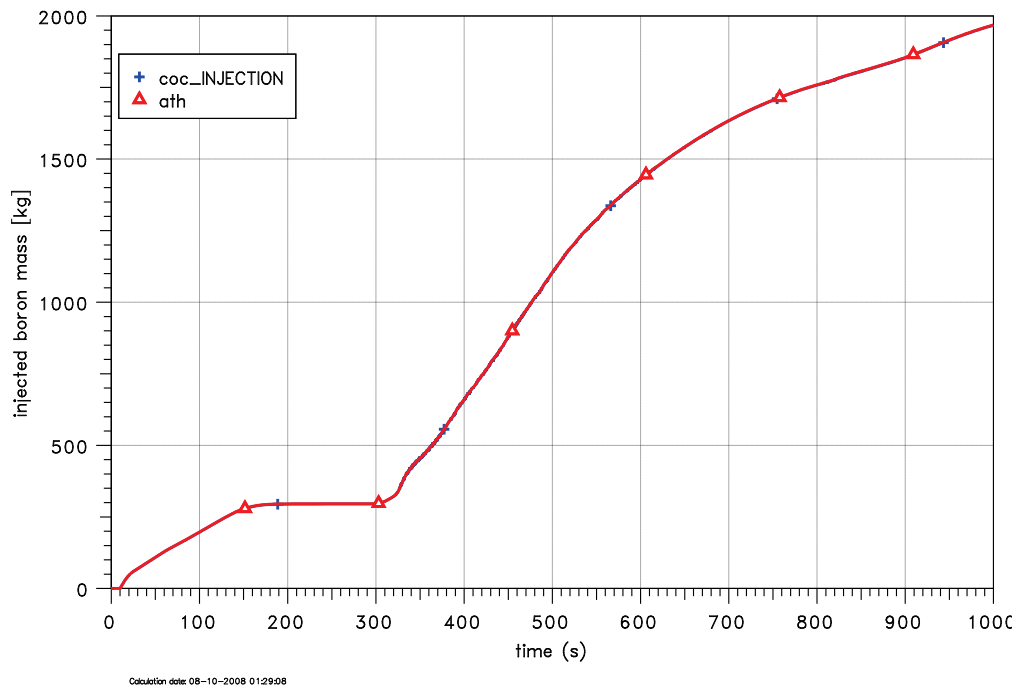


Abb. 2-41 Vergleich der Borfreisetzung

Versuchsaufbau PHÉBUS-FPT

Eine wichtige Versuchsreihe stellt die PHEBUS FP-Versuchsreihe in der gleichnamigen Versuchsanlage im Forschungszentrum Cadarache, Südfrankreich, dar. Von der OECD ist aus dieser Versuchsreihe das Experiment PHEBUS FPT-1, das im Juli 1996 durchgeführt wurde, zur Basis eines Internationalen Standardproblems (ISP-46) ausgewählt worden. Als Integralexperiment dient es dazu, Untersuchungen zur Kernzerstörung und Spaltproduktfreisetzung in einem "Quasi"-Containment durchzuführen, indem es einen Kühlmittelverlust im kalten Strang des Primärkreislaufs eines Leichtwasserreaktors simuliert.

In Abb. 2-42 sind die Hauptkomponenten der Versuchsanlage schematisch dargestellt. Diese besteht vor allem aus einem Brennstabbbündel innerhalb einer abgeschlossenen und separat gekühlten Teststrecke, die in der so genannten "In-pile"-Zelle im Zentrum des PHEBUS-Versuchsreaktors, der mit einer Maximalleistung von 40 MW die nukleare Beheizung des Bündels gewährleistet, angeordnet ist. Am unteren Ende der Teststrecke erfolgt die Einspeisung von Dampf zur Simulation des in einem Reaktorkern verdampfenden Kühlmittels. Zur Untersuchung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Kühlkreislauf sowie im Sicherheitsbehälter sind die Hauptkomponenten eines

Leistungsreaktors im Volumenmaßstab von ca. 1:5000 nachgebaut. Dazu gehören das zwischen dem Bündelaustritt und einem Behälter liegende "obere Plenum", der horizontale "heiße (700 °C)" bzw. "kalte (150 °C) Strang" mit einer Gesamtlänge von 26,6 m sowie ein dazwischen liegender Dampferzeugersimulator. Im Sicherheitsbehälter mit einem Volumen von 10 m³ befinden sich drei teilweise beschichtete Kondensationsstäbe und ein Sumpf mit 100 l Wasser.

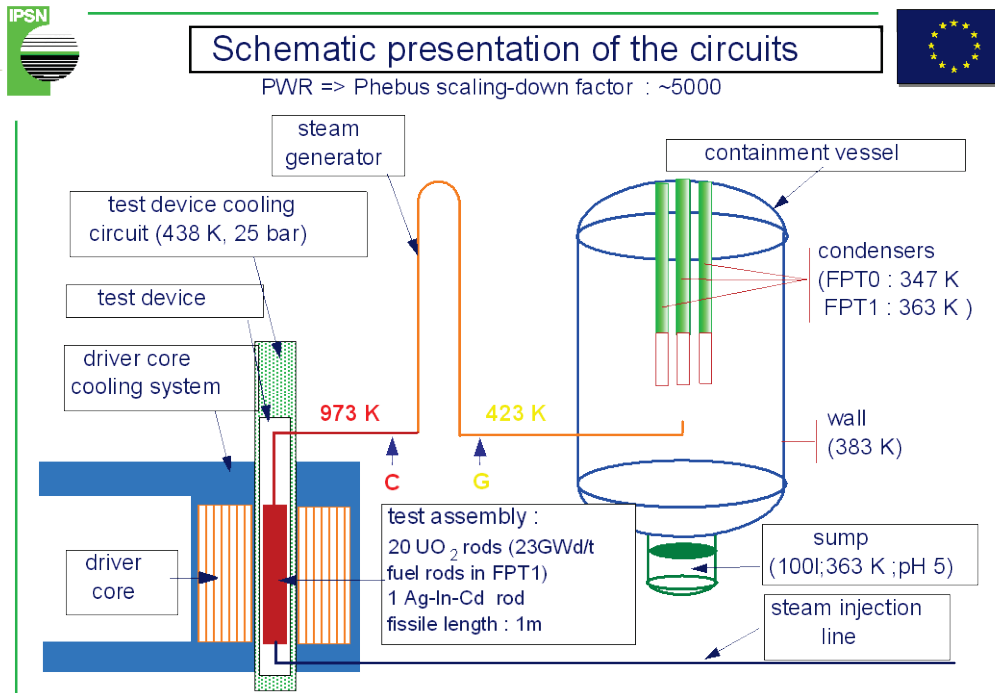


Abb. 2-42 PHEBUS-Versuchsanlage (schematisch)

Bei diesem Versuch lassen sich grundsätzlich vier Phasen anhand charakteristischer Vorgänge bzw. Phänomene unterscheiden. Die sog. Bündel-Phase im Zeitraum von 0 bis 18 660 s ist maßgeblich durch Vorgänge im Bündel, wie z. B. die Zerstörung von Brennstab- und Strukturmaterial, die Wasserstofffreisetzung sowie die Freisetzung von Spaltprodukten gekennzeichnet. Ebenfalls in diesem Zeitraum liegt die sog. Kühlkreislauf-Phase, in der der Spaltprodukt- und Aerosoltransport im angeschlossenen Kreislauf stattfindet. Die dritte Phase ist der Zeitraum von 0 bis 300 000 s für die Analyse der Thermohydraulik sowie des Aerosol- und Spaltprodukt-Verhaltens im Sicherheitsbehälter. Und schließlich ist die Untersuchung der Iodchemie im Sicherheitsbehälter (0 bis 341 400 s) aufgrund der Komplexität der zu berücksichtigenden Phänomene als eigene, vierte Phase anzusehen.

Die Kopplung beider Programme berücksichtigt die Freisetzung von Dampf, Wasserstoff sowie von Spaltprodukten in das PHEBUS-Containment. Dabei werden die Raten über mehrere Zeitschritte von ATHLET integriert und dann im THY- und AFP-Hauptmodul von COCOSYS ausgewertet. Aus der Spaltproduktfreisetzung werden dann im COCOSYS-Treiber die Aerosol-Freisetzungsraten sowie die Freisetzung von Iodspezies ermittelt. Dabei kann berücksichtigt werden, dass ein Teil der Spaltprodukte oxidiert und sich damit die Masse erhöht.

Test anhand eines modifizierten PHÉBUS-FPT-Datensatzes

Zum Testen des FIPISO-Moduls in ATHLET und dessen Kopplung mit COCOSYS wurde ein modifizierter FPT-Datensatz erstellt. Der ATHLET-Datensatz wurde dabei aus der Reihe der Testrechnungen für ATHLET entnommen und hinsichtlich der Kopplung mit COCOSYS ergänzt.

Im Folgenden werden einige exemplarische Ergebnisse gezeigt, um die Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS zu überprüfen. Die Ergebnisse von COCOSYS sind in blauen Kurven und die von ATHLET-CD in roten Kurven dargestellt.

Abb. 2-43 zeigt den Vergleich der freigesetzten Wasserstoffmasse. Insgesamt werden ca. 60 g Wasserstoff aus dem Kern aufgrund der Zirkonreaktion freigesetzt. Im Rohrleitungssystem werden im Modul SOPHAEROS weitere chemische Reaktionen berechnet, so dass hier ebenfalls Wasserstoff erzeugt wird. Die magentafarbene Kurve zeigt die Wasserstoffmasse, die aus dem Objekt PIPE ausströmt. Diese stimmt mit der im Behälter eingespeisten Wasserstoffmasse (blaue Kurve) überein.

Im Folgenden wird die Xenonfreisetzung untersucht. Die integral freigesetzte Xe-Masse ist in Abb. 2-44 dargestellt und zeigt konsistente Ergebnisse. Die ATHLET-CD Daten beziehen sich auf SOPHAEROS. Die COCOSYS-Ergebnisse wurden von FIPISO (Nuklidverhalten) entnommen. Somit stimmt die Gesamtmasse der Xe-Nuklide in COCOSYS mit der in SOPHAEROS berechneten Xe-Masse überein. Entsprechendes gilt für die Freisetzungsraten (Abb. 2-46). In ATHLET-CD gibt es bezüglich der Nuklide praktisch keine Ausgabedaten. Somit ist eine Überprüfung der Nuklidfreisetzung einzelner Nuklide nur schwer möglich. Mit der Ausgabeoption IOPFO == 3 wird in der Ausgabe die Nuklidzusammensetzung ausgedruckt. Der Anteil Xe-131 zur gesamten Xe-Masse ändert sich von 0,141 zu 0,108. Nimmt man konstante Massenanteile an,

zeigt Abb. 2-45, dass das COCOSYS-Ergebnis zwischen beiden "Extrem"-Werten liegt. Konsistente Ergebnisse werden auch für die Tellurfreisetzung erzielt (Abb. 2-47).

Iod spielt im Bereich der schweren Störfälle eine bedeutende Rolle. In der nun implementierten SOPHAEROS-Version wird eine sehr detaillierte Chemie betrachtet. So werden hier zahlreiche Iodverbindungen betrachtet, welche aber auf der Containmentseite nicht weiter betrachtet werden. Chemische Komponenten, welche in ATHLET-CD und COCOSYS betrachtet werden, werden direkt übertragen. Dies gilt sowohl für Iodspezies als auch für Aerosole (wie z. B. CsOH). Wichtig ist aber auch die konsistente Iodbilanz. Daher wird entsprechend der Solidus-Temperatur der einzelnen chemischen Iodkomponenten im Vergleich zu einer angenommenen Containmenttemperatur von 120 °C diese Komponente dem I₂ bzw. dem CsI zugeordnet. Abb. 2-48 und Abb. 2-49 zeigen den Vergleich der freigesetzten Molmasse beider Spezies. In diesem Testbeispiel wird I₂ und I₂Te als gasförmig betrachtet und dem I₂ zugeordnet. Alle anderen Iodverbindungen (I₂Sn, I₂Zr, I₃Zr, I₄Sn, I₄Te, I₄U, I₄Zr und ISn) werden dem CsI zugeordnet.

Das Aerosol CsOH wird in dieser Testrechnung sowohl in ATHLET-CD als auch in COCOSYS simuliert. Daher können die Raten direkt übertragen werden. Abb. 2-50 zeigt den Vergleich der in den Behälter eingespeisten CsOH-Masse. Die blaue Kurve ist das Integral der Einspeiserate und liegt etwas unterhalb des SOPHAEROS-Ergebnisses. Die Summe der CsOH-Masse im Behälter (grüne Kurve) stimmt dagegen sehr gut überein. Ursache ist eine starke Transiente, die aufgrund der Plotdichte nicht richtig aufgelöst wird (Abb. 2-51).

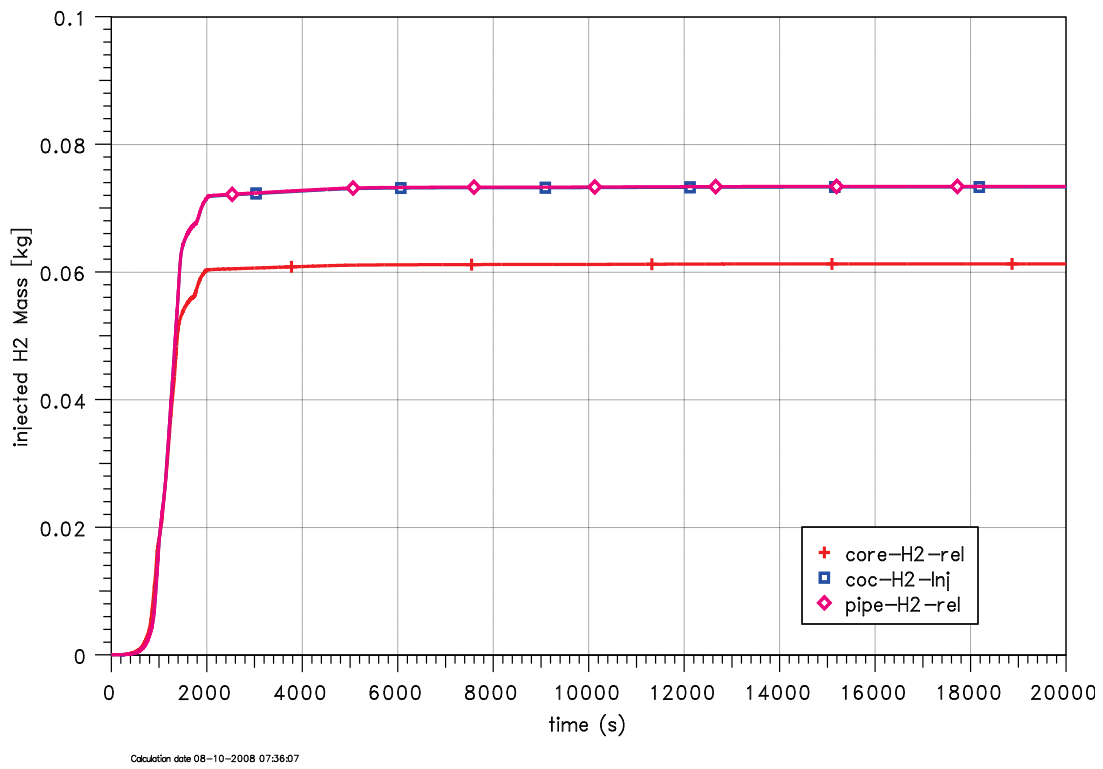


Abb. 2-43 Freigesetzte Wasserstoffmasse

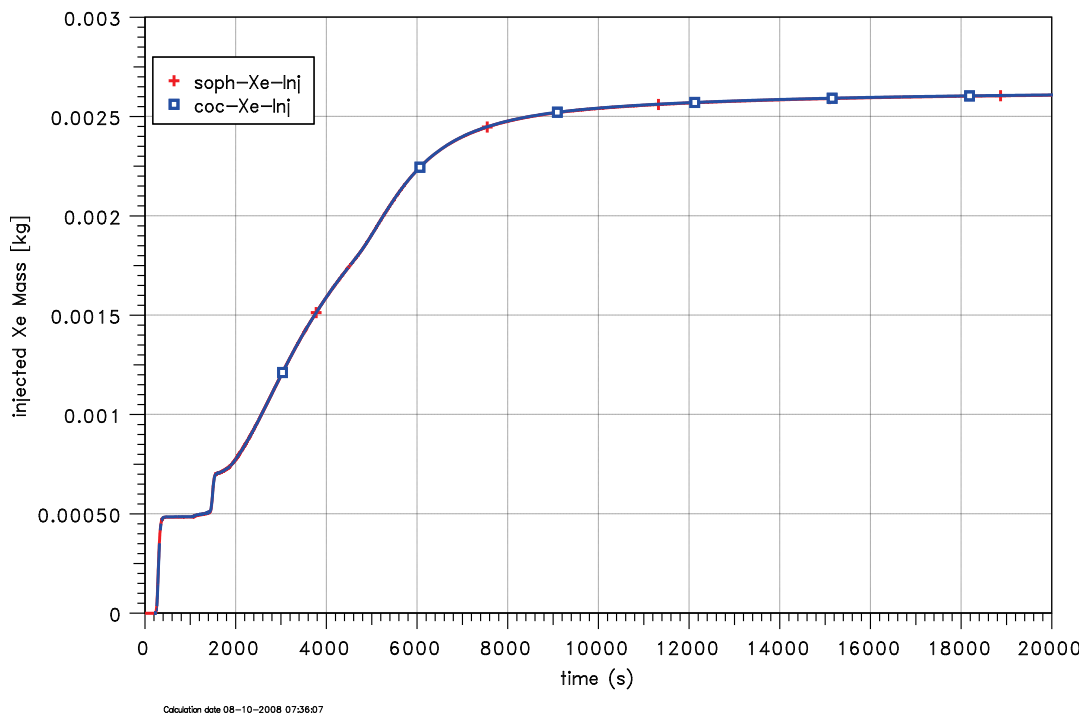


Abb. 2-44 Freigesetzte Xe-Masse

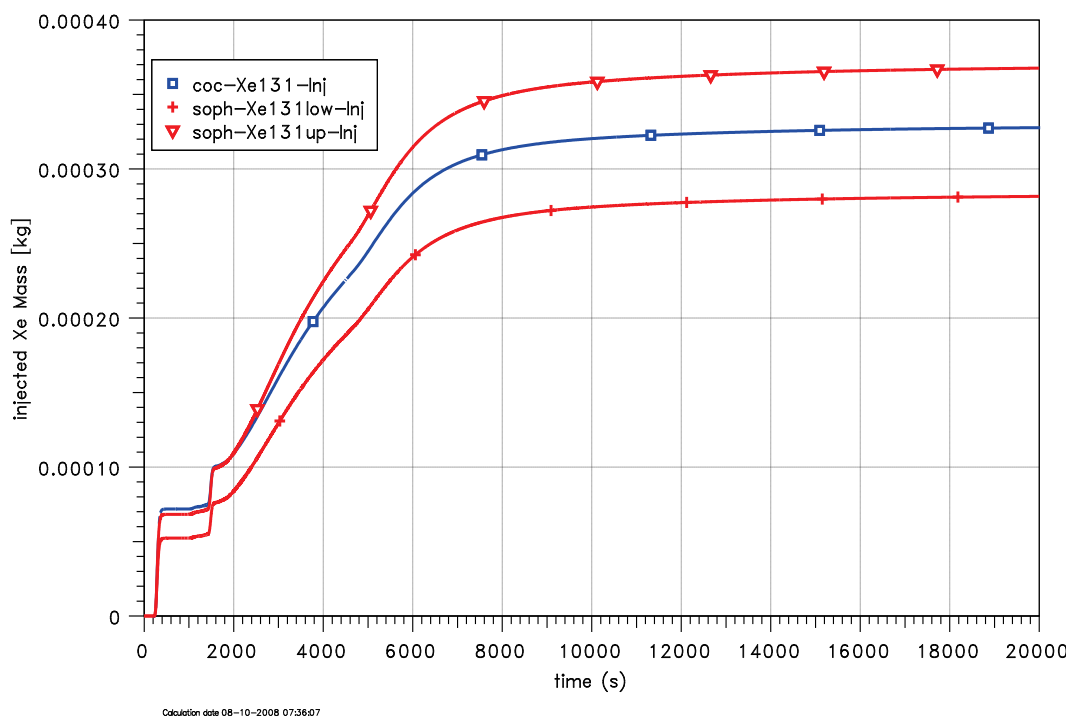


Abb. 2-45 Freigesetzte Xe-131 Masse

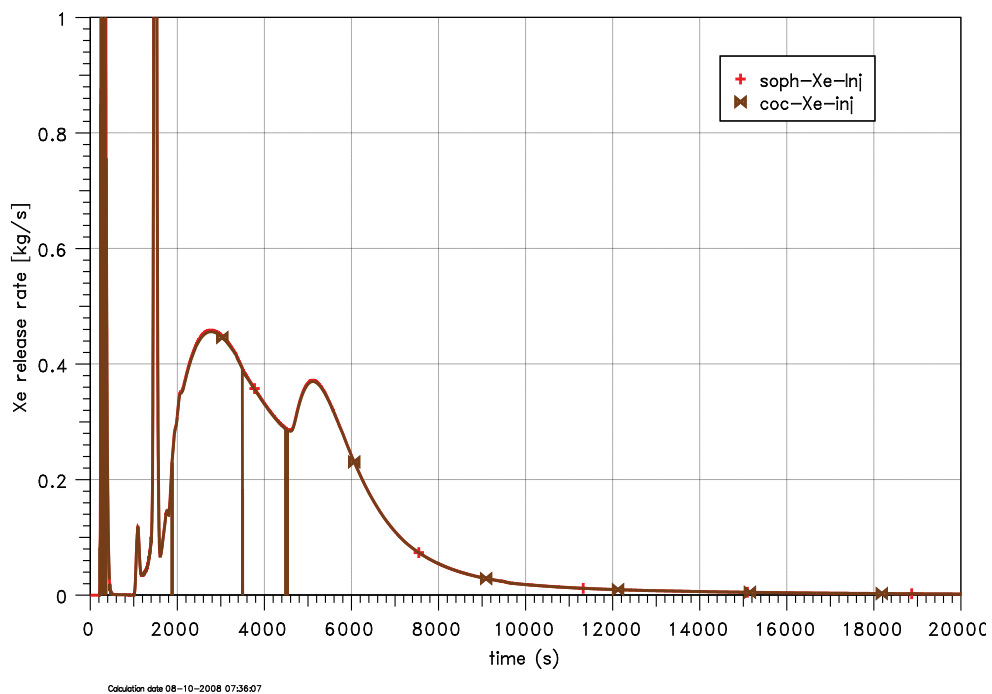


Abb. 2-46 Xe-Freisetzungsrage

FISO-TEST: Test of ATHLET-COCOSYS coupling

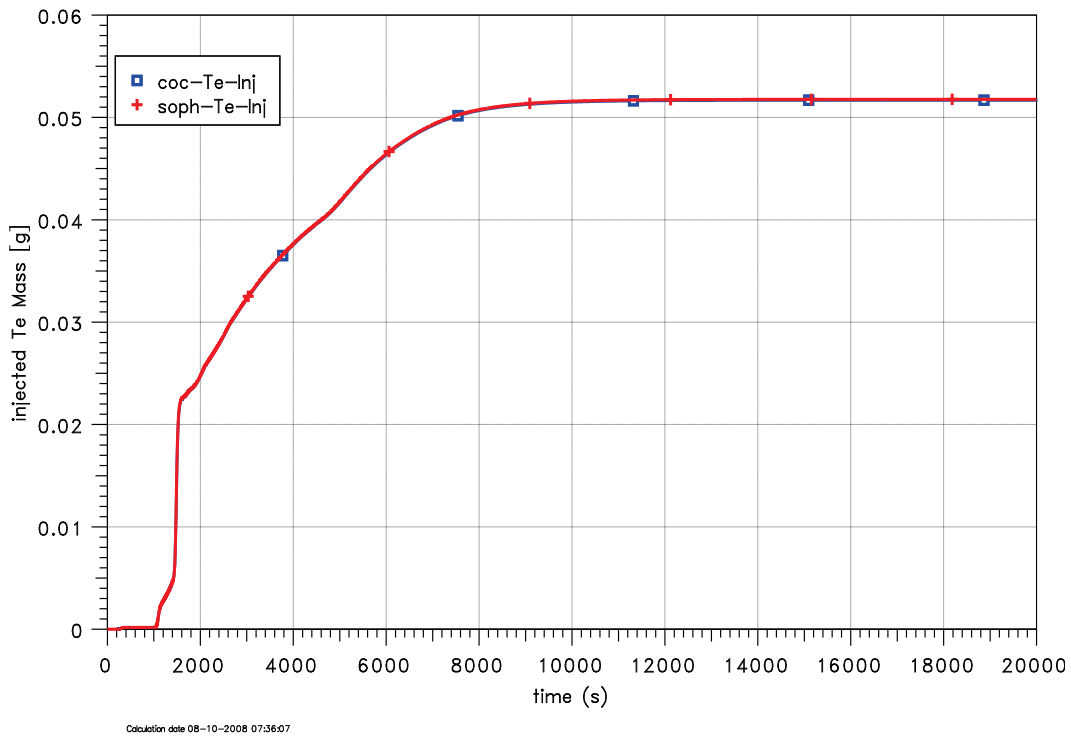


Abb. 2-47 Freigesetzte Te-Masse

FISO-TEST: Test of ATHLET-COCOSYS coupling

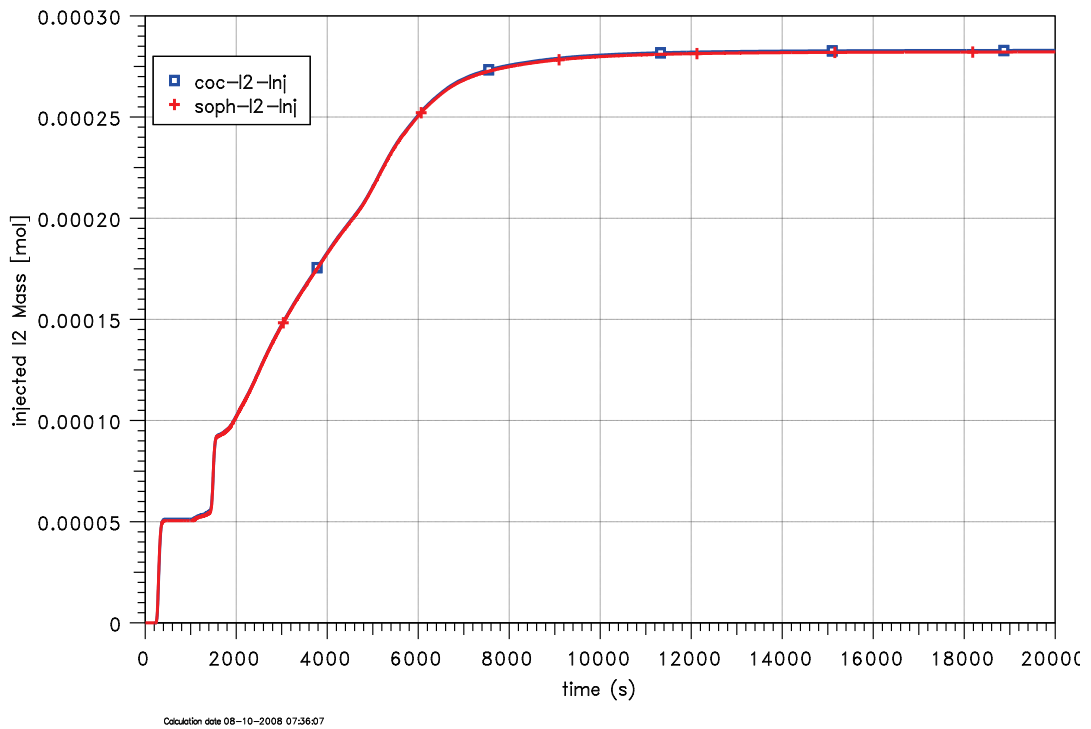


Abb. 2-48 Freigesetzte I₂-Masse

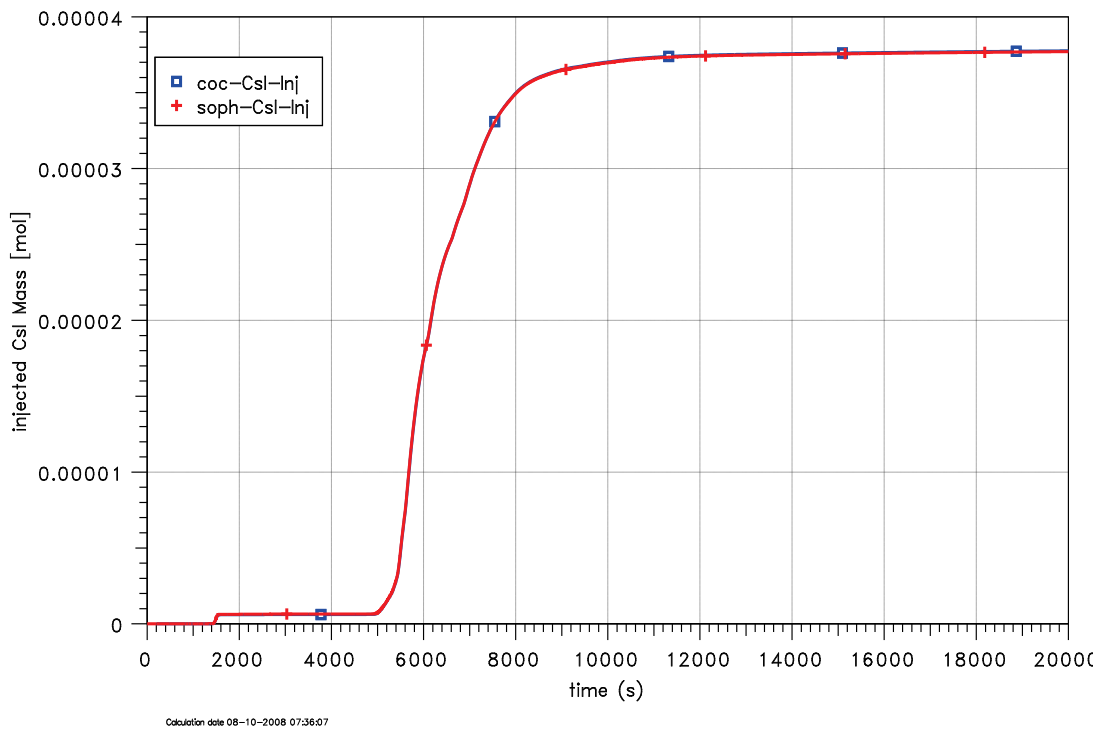


Abb. 2-49 Freigesetzte CsI-Masse

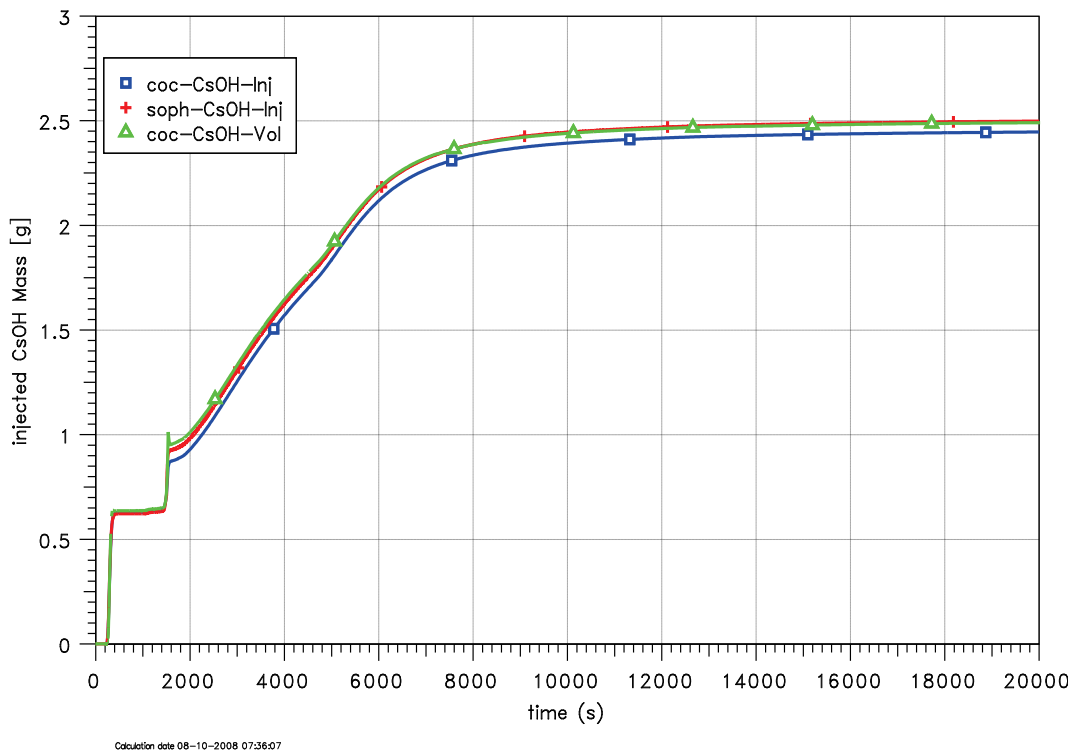


Abb. 2-50 Freigesetzte CsOH-Masse

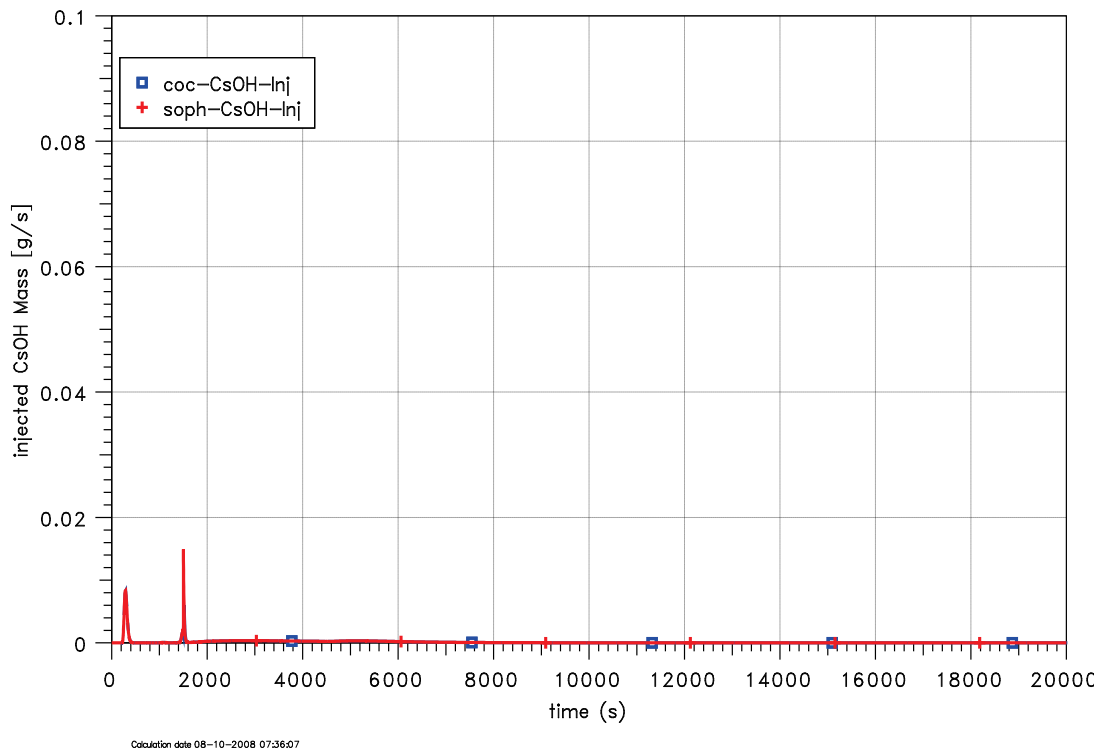


Abb. 2-51 Identifizierung der Unterschiede bzgl. CsI-Rate

Test anhand einer gekoppelten PHEBUS-FPT1 Rechnung

Im Folgenden werden die relevanten Ergebnisse hinsichtlich der Kopplung mit Schwerpunkt auf das Containmentverhalten dargestellt. Während des Tests konnte das Abschmelzen des inneren Brennstabringes sowie des Zentralstabes im mittleren Bündelteil detektiert werden. Auf Höhe des unteren Abstandhalters bildete sich dann ein Pool aus flüssigen keramischen Materialien.

Bei der Nachrechnung konnte die Bündelaufheizung, das Einsetzen der Temperaturskalation aufgrund der exothermen Wasserdampf-Zirkon-Reaktion und die damit einhergehende Wasserstofffreisetzung in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten berechnet werden. So lag beispielsweise die errechnete Wasserstofffreisetzung mit 101 g innerhalb der Bandbreite des experimentell ermittelten Wertes von 96 ± 13 g (Abb. 2-52).

Für die Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD werden hinsichtlich der Spaltproduktfreisetzung die elementweise ermittelten Raten und die Raten der ver-

schiedenen chemischen Verbindungen verwendet. Die in SOPHAEROS betrachteten chemischen Verbindungen sind in Abb. 2-53 dargestellt.

Abb. 2-54 zeigt den Vergleich für den Eintrag von Spaltprodukten (Xe, I, Ag, Cd, Ba und Te) in den Vessel und den Vergleich der Konzentration in der Behälteratmosphäre. Die Freisetzung von Spaltprodukten beginnt mit dem Versagen der Hüllrohre im inneren Ring bei ca. 6500 s mit der Freisetzung der leicht flüchtigen Materialien (Xe, Kr, I, Cs). Die Menge der freigesetzten Spaltprodukte steigt stark während der ersten Oxidationsphase bei ca. 11060 s an. Die Ergebnisse für Xe stimmen gut mit dem Experiment überein. Die Freisetzung von Iod wird ca. um den Faktor 2 unterschätzt mit den entsprechenden Auswirkungen auf die Iodchemie. Die Modellierung der Freisetzung der Steuerstabmaterialien Ag und Cd wurde verbessert. Allerdings wird in dieser Rechnung die Freisetzung von Cd überschätzt.

Die Rechenergebnisse für das thermohydraulische Verhalten innerhalb des Sicherheitsbehälters stimmen in guter Näherung mit den experimentellen Daten überein. Dabei zeigt sich, dass beispielsweise der korrekten Simulation der Vorgänge an den Kondensationsstäben erhöhte Bedeutung zukommt, um die experimentell ermittelten Verläufe für Druck und Temperatur korrekt wiedergeben zu können (Abb. 2-55). Nach der Separierung des Sicherheitsbehälters nach ca. 18 660 s wird die relative Feuchte der Atmosphäre zwar ca. 10 % zu gering errechnet.

Abb. 2-56 zeigt den Vergleich der eingespeisten Aerosolmassen. Es ist zu beachten, dass die experimentellen Daten auf 160 g normiert wurden. Die Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment ist sehr gut. Die grüne Kurve zeigt den Eintrag von Spaltprodukten (ohne Re). Auch hier ist die Übereinstimmung mit dem Experiment sehr gut.

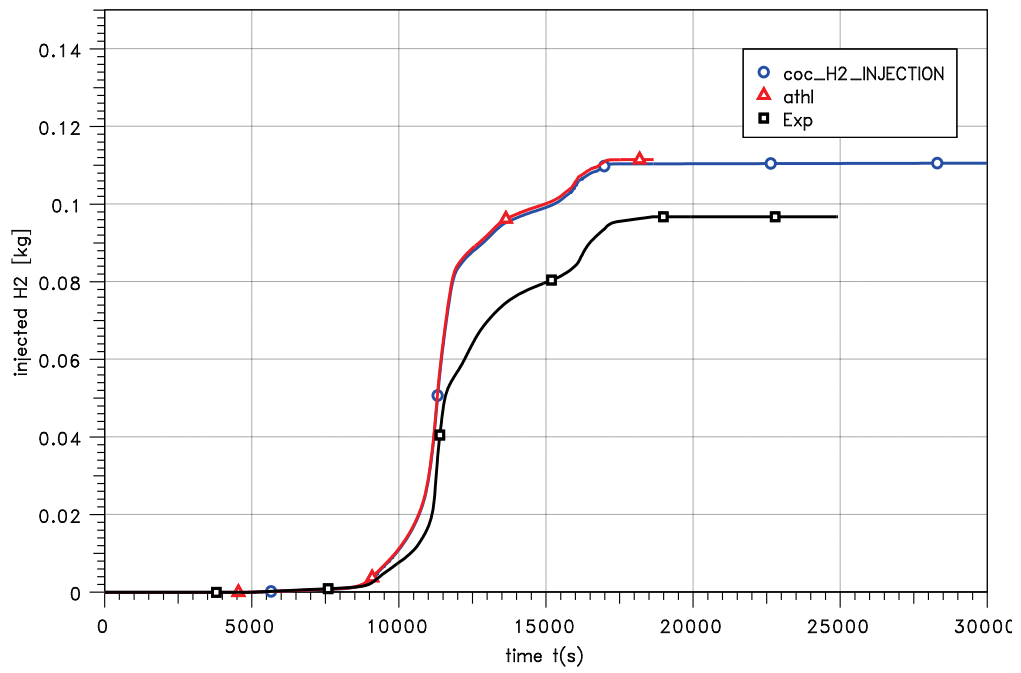


Abb. 2-52 PHEBUS-FPT1: Wasserstoffeinspeisung in den Sicherheitsbehälter

TRANSFER ATHLET SOURCES TO AFP TYPE SOURCES

```

-----
ASSIGN COMPONENT AGI          TO CORRESPONDING AEROSOL
ASSIGN COMPONENT CSHO        TO CORRESPONDING AEROSOL
ASSIGN COMPONENT CSI          TO CORRESPONDING AEROSOL
KR          IS IDENTIFIED AS A GASEOUS FP
XE          IS IDENTIFIED AS A GASEOUS FP
H           IS IDENTIFIED AS A GASEOUS FP
N           IS IDENTIFIED AS A GASEOUS FP
O           IS IDENTIFIED AS A GASEOUS FP
ASSIGN COMPONENT AG3I3        TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT BAHIO        TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT BAI          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT BAI2         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT CDI          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT CDI2         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT CS2I2        TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT FEI2         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT HI           TO I2 SPECIES
ASSIGN COMPONENT HIO          TO I2 SPECIES
ASSIGN COMPONENT HIOSR        TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2           DIRECTLY TO AIM SPECIES I2
ASSIGN COMPONENT I2IN         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2MO         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2MOO2       TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2RB2        TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2SN         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2SR         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I2TE         TO I2 SPECIES
ASSIGN COMPONENT I2ZR         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I3IN         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I3SB         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I3ZR         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I4SN         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I4TE         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I4U          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT I4ZR         TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT IIN          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT IO           TO I2 SPECIES
ASSIGN COMPONENT IRB          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT ISN          TO AEROSOL CSI
ASSIGN COMPONENT ISR          TO AEROSOL CSI

```

Abb. 2-53 Zuordnung der SOPHAEROS-Daten nach AFP

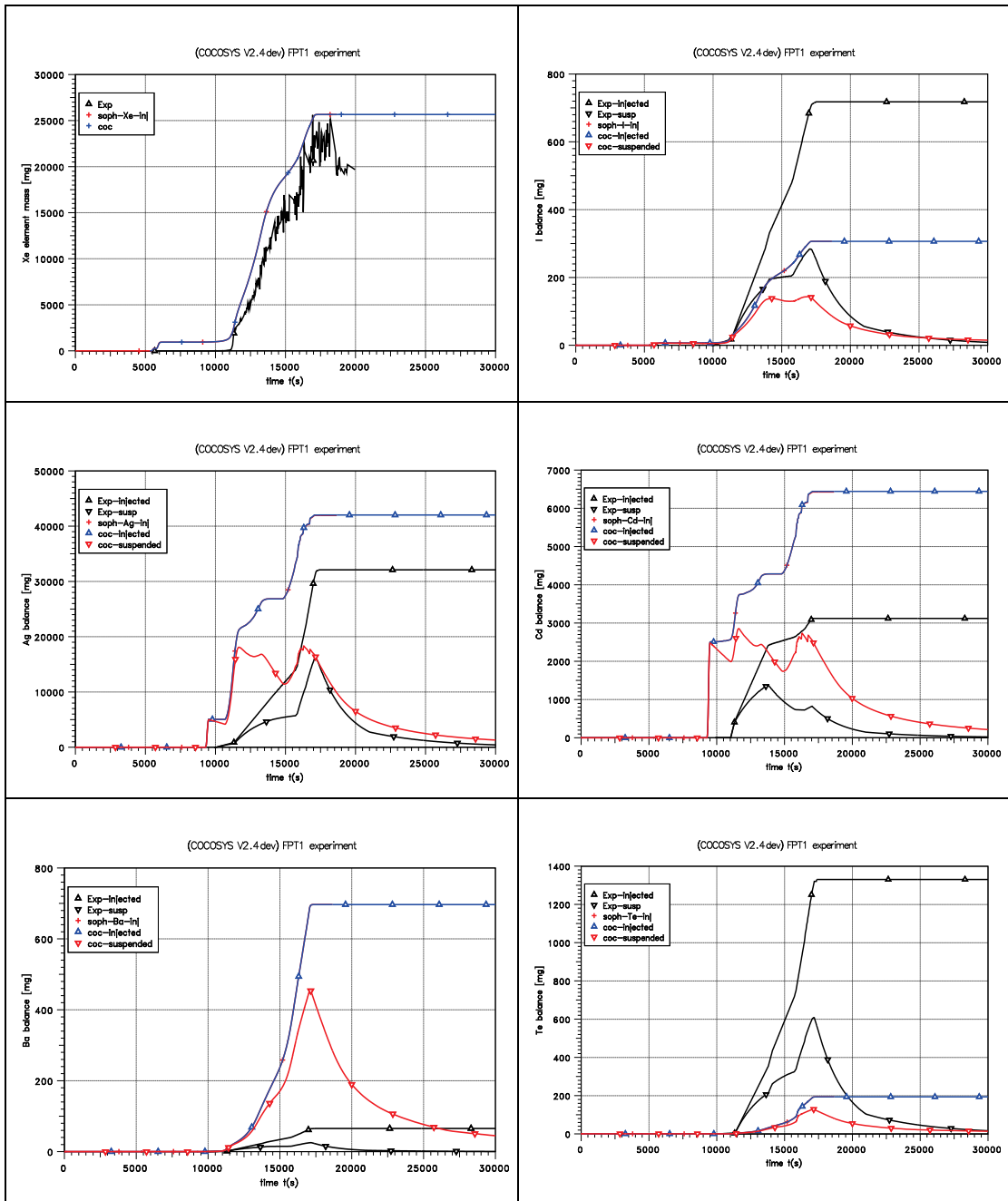


Abb. 2-54 Freisetzung in den Vessel und Konzentration

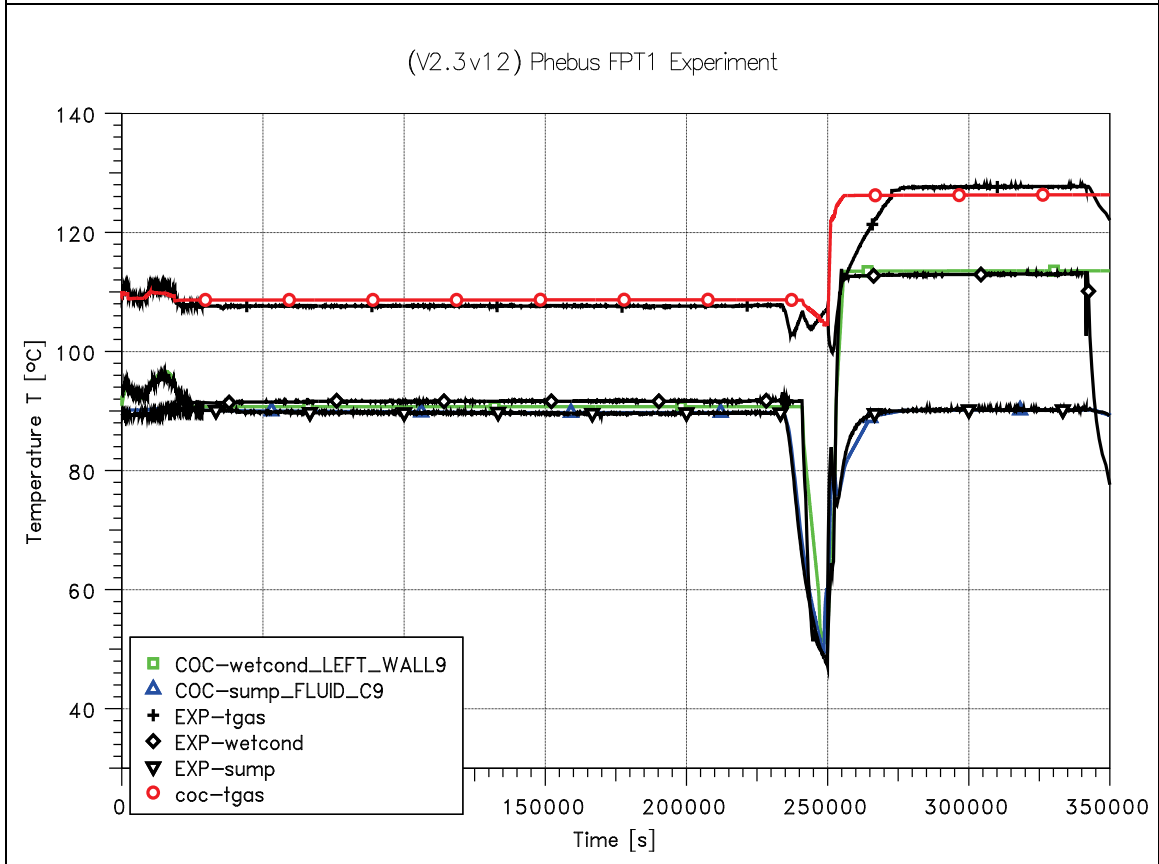
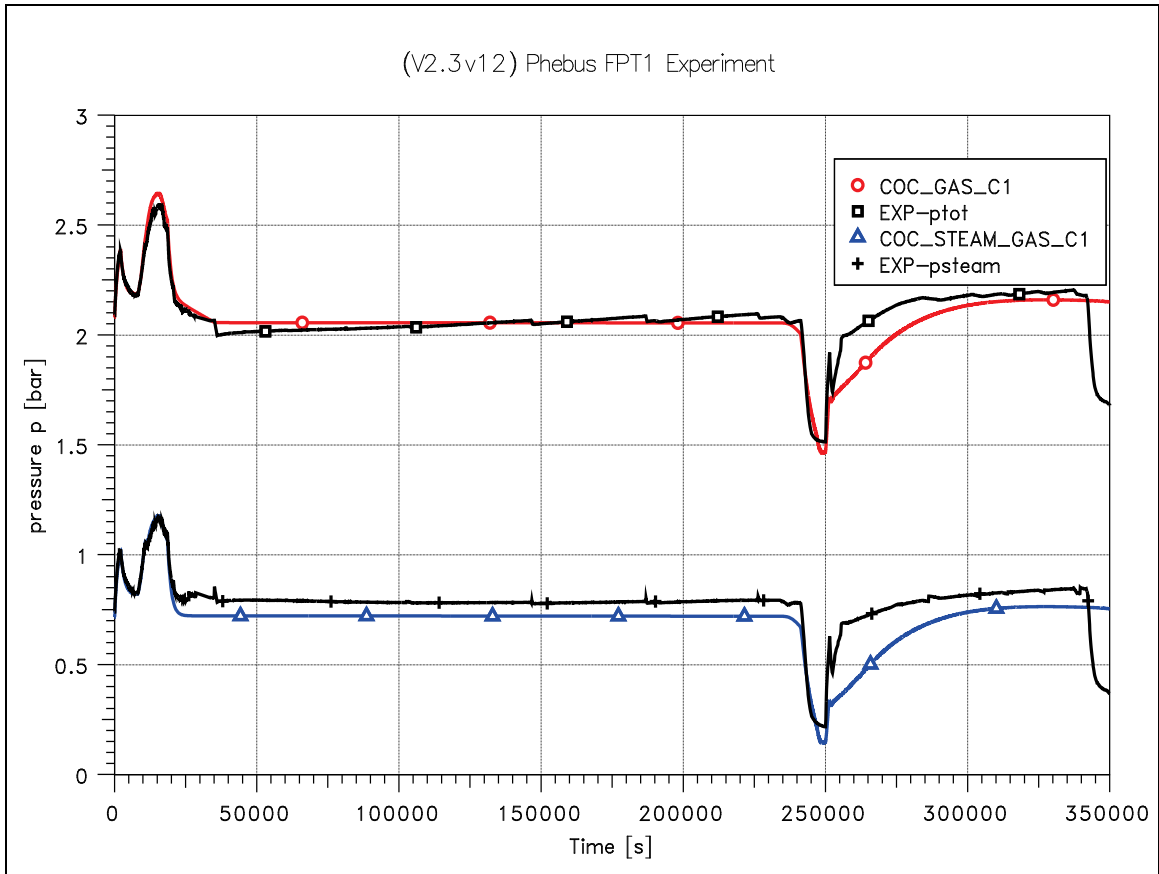


Abb. 2-55 Druck und Temperatur im PHEBUS-Containment

(COCOSYS V2.4 dev) FPT1 experiment

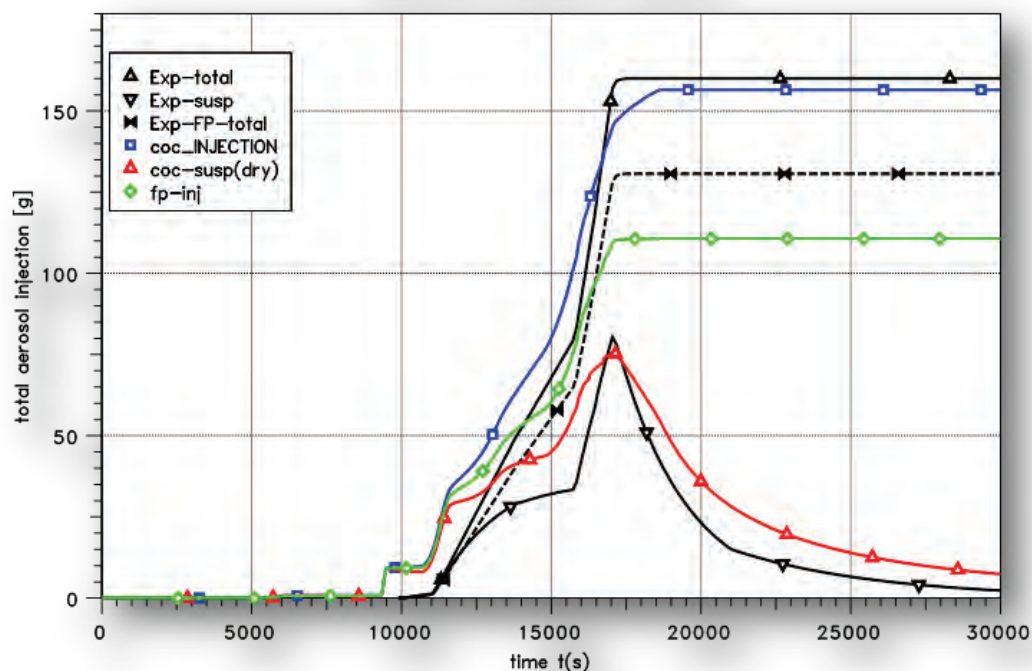


Abb. 2-56 Bilanzierung der Aerosole und Spaltprodukte

Schlussfolgerungen

Die Funktionsfähigkeit der Kopplung zwischen COCOSYS V2.4 und ATHLET-CD 2.1b wurde anhand dreier Beispiele aufgezeigt. Die Schwerpunkte der drei Beispiele liegen auf dem Bereich Thermohydraulik, Nuklidfreisetzung und Aerosol- und Spaltproduktfreisetzung (elementweise, ohne Verwendung von FIPISO).

Insbesondere die Auswertung der Berechnungsergebnisse zeigt, dass Integralexperimente wie PHEBUS FPT1 eine einzigartige Gelegenheit bieten, einen komplexen Unfallablauf, bei dem verschiedene untereinander in Wechselwirkung stehende Phänomene auftreten, zu berechnen, dabei in den Modellen vorhandene Schwachstellen zu erkennen und ATHLET-CD wie COCOSYS integral und nicht nur partiell an Einzeleffekt-Experimenten zu testen.

3 Verbesserung des Verständnisses sowie Erhöhung der Zuverlässigkeit der Simulation des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens

Innerhalb des Projektzeitraumes ist das Arbeitsprogramm zu diesem Punkt in größerem Umfang geändert worden. Ursprünglich waren im Arbeitsprogramm zu diesem Punkt zwei Schritte vorgesehen:

- In einem ersten Schritt sollte das im Vorgängervorhaben eingeführte Modell CORINNA für die Verfolgung der Erosionskontur in 3D zu einem 'stand alone'-fähigen MCCI-Modul weiterentwickelt werden. Kern des Modells CORINNA ist die Verfolgung der Erosion der Kaverne mit einer 3D-Darstellung der Schnittstelle Schmelze/Beton, wobei der Schmelzepool mit vereinfachten Bulk-Annahmen dargestellt wird.
- In einem zweiten Schritt sollten die Vorgänge innerhalb des Schmelzepools mit CFD-Methoden detaillierter aufgelöst werden.

Bei der Formulierung dieses ursprünglichen Arbeitsprogramms lagen starke Hinweise aus experimentellen Programmen (z. B. BALI) zum Wärmeübergang in beheizten und begasten Schmelzepools zugrunde. Dort wurde den Vorgängen innerhalb des Schmelzepools (Konvektion in Gegenwart von Blasen an Grenzflächen) große Bedeutung beigemessen. Für die Modellierung erhoffte man sich im Arbeitsprogramm durch den Einsatz eines CFD-Codes einen Zuwachs an Detaillierungsgrad, der für die Wiedergabe dieser Phänomene (z. B. die Abhängigkeit der Wärmeströme von der Neigung der Grenzfläche) notwendig schien.

Die neuen Erkenntnisse aus den zwischenzeitlich durchgeführten Experimenten im OECD-MCCI-Projekt (vgl. Abschnitt 8.2.1) deuten aber darauf hin, dass weniger die Vorgänge in der Schmelze als vielmehr Phänomene an der Kontaktstelle zwischen Schmelze und Struktur (Stabilität von Krusten) bzw. Phänomene im Bereich der Betonstrukturen (Vorgänge bei dessen Zersetzung) Einfluss auf die Richtungspräferenz der Wärmeströme nehmen können. Es konnte daher nicht mehr erwartet werden, dass mit der ursprünglich geplanten zweistufigen Modellstrategie (3D-Konturmodell + CFD-Modelle für Vorgänge innerhalb des Schmelzepools) eine entscheidende Verbesserung der Prognose von Experimenten erreicht wird.

Deshalb wurde eine Änderung des Arbeitsprogramms mit dem Auftraggeber wie folgt abgestimmt: Anstelle der Weiterentwicklung des 3D-Konturmodells CORINNA und der Einarbeitung der wichtigen phänomenologischen Modelle wurde in diesem Arbeitspunkt der gemeinsam von IRSN und GRS für ASTEC entwickelte MCCI-Code MEDICIS in COCOSYS integriert. Hierbei sind alle nötigen Schritte für die Übertragung von MEDICIS aus der ASTEC-Umgebung bis zur funktionsfähigen Einbindung in COCOSYS durchgeführt worden. Der zweite ursprüngliche Arbeitsschritt (detaillierte Darstellung des Schmelzpool mit CFD-Methoden) wurde zurückgestellt.

Die in den zu diesem Vorhaben parallel laufenden Validierungsvorhaben RS 1147 und RS1170 durchgeführten Rechnungen zu WEX, dem alten MCCI-Modell in COCOSYS/ASTEC, und MEDICIS, dem neuen MCCI-Modell in ASTEC und nun auch in COCOSYS, haben gezeigt, dass nach Einbringung einer neuen Beschreibung des Wärmeübergangs an der Grenze Schmelze/Beton (siehe Abschnitt 3.1) das Modell MEDICIS ausreichend belastbar für die Anwendung auf viele vorliegende Experimente und – dank seiner fortschrittlichen Codestruktur – flexibel und leicht um zusätzliche Modelle erweiterbar ist.

Durch die Verwendung von MEDICIS sowohl in COCOSYS als auch in ASTEC können zukünftig Synergien bei der Weiterentwicklung der Modelle entstehen. Die erforderlichen phänomenologischen Modelle sind in MEDICIS weitgehend vorhanden und mussten nicht neu programmiert werden.

3.1 Integration von MEDICIS in COCOSYS - Erweiterung um ein Wärmeübergangsmodell

In den parallel durchgeführten Validierungsvorhaben wurden mit den verfügbaren MCCI-Modellen in COCOSYS und ASTEC die Versuche innerhalb des OECD-MCCI-Projektes begleitet. Darunter wurde auch an einem blinden Benchmark zu dem Versuch CCI-2 aus dem OECD-Projekt teilgenommen. Die GRS hat hier Rechnungen sowohl mit MEDICIS als auch mit WEX abgegeben. Es hat sich dabei zunächst gezeigt, dass mit beiden Rechenprogrammen keine untereinander konsistenten Ergebnisse produziert werden konnten, trotz möglichst gleicher Hypothesen für die Wahl der freien Modellparameter. Während beide Rechenprogramme ähnlich gute Ergebnisse in der Erosion produzierten (Abb. 3-1), wurde der Temperaturverlauf über die Zeit sehr unterschiedlich prognostiziert (Abb. 3-2).

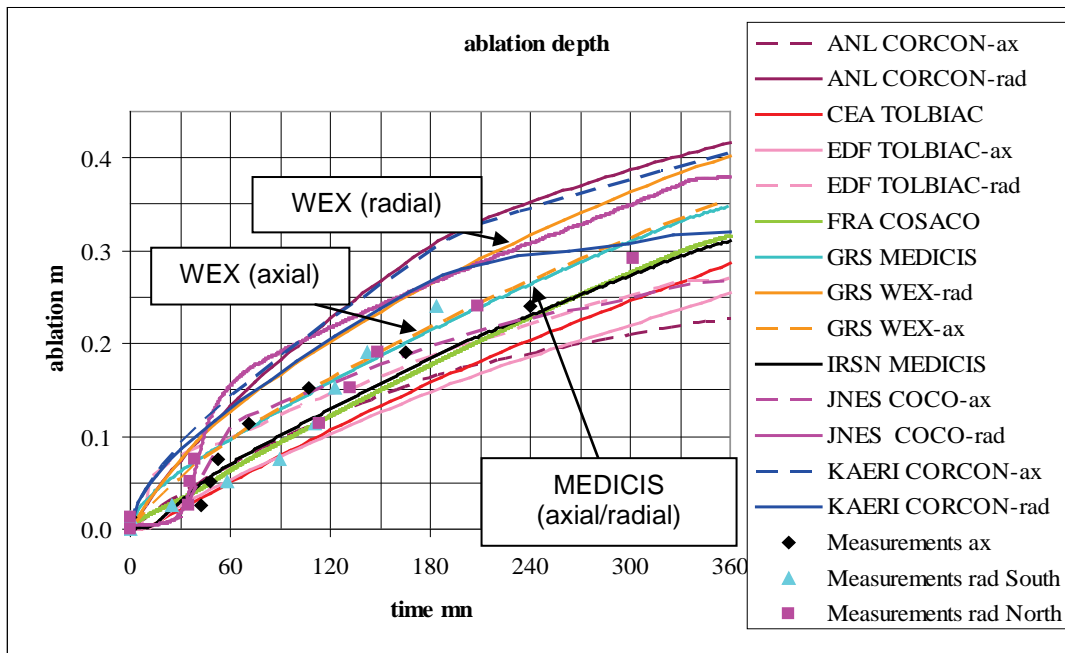


Abb. 3-1 Ergebnisse für die axialen radialen Erosionstiefen in der blinden Nachrechnung (Benchmark) zu CCI-2

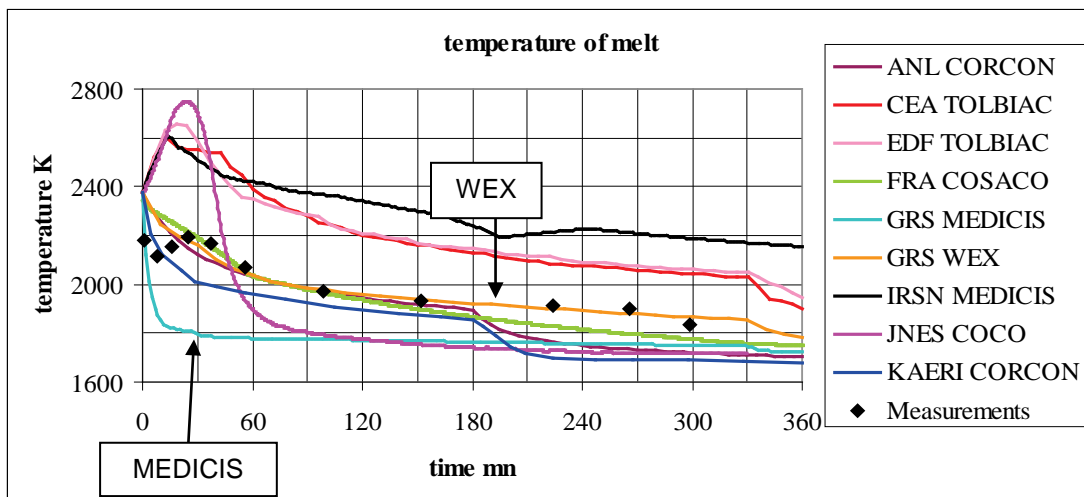


Abb. 3-2 Ergebnisse für die Schmelzetemperaturen in der blinden Nachrechnung (Benchmark) zu CCI-2

Diese Differenzen konnten letztlich auf unterschiedliche Modelle für die Berechnung des effektiven Wärmeübergangs zwischen Schmelze und Beton zurückgeführt werden. Da im Falle von CCI-2 die Rechnung mit WEX hinsichtlich der Schmelzetemperatur größere Übereinstimmungen erzielt hatte als die Rechnung mit MEDICIS, lag die Zielsetzung nahe, MEDICIS um ein adäquates Wärmeübergangsmodell zwischen Schmelze und Beton zu erweitern, um mit beiden Programmen konsistente Ergebnisse für

dieses Experiment zu bekommen. Von einer direkten Portierung der Modelle von WEX nach MEDICIS wurde aber abgesehen, da diese einerseits aufgrund der wenig durchsichtigen Codestruktur von WEX und der nicht modularen Anlage des Codes nicht gut zu isolieren waren und andererseits in Nachrechnungen anderer Versuche (Beispiel BETA mit geschichteten Schmelzen) WEX auch Defizite zeigte (z. B. der in Experimenten nicht beobachtete Überschlag zwischen verschiedenen Wärmeübergangsregimes). Die entscheidende Eigenschaft für den Erfolg der WEX-Rechnung im Falle von CCI-2 konnte vielmehr auf den über den Zeitbereich der Rechnung nahezu konstant niedrigen, effektiven Wärmeübergangskoeffizienten von ca. $300 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ zurückgeführt werden.

Aufgrund dieser Erkenntnisse aus der Validierung wurde MEDICIS um Modelloptionen erweitert, mit denen ein mit dem Experiment vergleichbares Rechenverhalten von MEDICIS erzielt werden kann.

Dazu wurden in einem ersten Schritt die wichtigsten verfügbaren Experimente zu MCCI unter einem integralen Zusammenhang hinsichtlich des Wärmestroms an der Schmelze-Beton-Schnittstelle ausgewertet. Hierbei wurde zwischen Experimenten, bei denen die Erosion hauptsächlich durch die Stahlschmelze vorangetrieben wurde, und Experimenten mit oxidischer Schmelze unterschieden. Diesen beiden grundsätzlichen Schmelzetypen wurden dabei Referenzstoffwerte der Tab. 3-1 zugeordnet. Eine weitere Unterscheidung bezieht sich auf die verwendeten Betone. Hier wurden einerseits silikatischer Beton und andererseits kalkreicher bzw. der unter der amerikanischen Bezeichnung "limestone common sand (LCS) concrete" bekannte Beton unterschieden (Tab. 3-2).

Tab. 3-3 zeigt die einbezogenen Experimente und ordnet diesen eine Identifikationsnummer (erste Spalte) zu. Die letzten beiden Spalten enthalten für einen stationären Abschnitt in den jeweiligen Experimenten ermittelte experimentelle Ergebnisse, die in der Folge als Grundlage für die Ermittlung eines mittleren Wärmestroms zwischen Schmelze und Beton in den Experimenten dienen.

Tab. 3-1 Generische Stoffdaten der Schmelzetypen

Stoffeigenschaft	Stahl	Oxid
Dichte ρ_m	6890 kg/m ³	6250 kg/m ³
dynamische Viskosität η	5,88 E-3 Pa s	0,1 Pa s
Wärmeleitfähigkeit λ_m	18,5 W/m K	3 W/m K
Spezifische Wärme $c_{p,m}$	795 J/(kg K)	605 J/kg K
Oberflächenspannung σ	1,74 N/m	0,4 N/m
Wärmeausdehnungskoeffizient β	5,0 E-4	5,0 E-4

Tab. 3-2 Generische Stoffdaten der Betone

Stoffeigenschaft	silikatisch (SIL)	kalkreich (limestone common sand = LCS)
Dichte ρ_c	2250 kg/m ³	2337 kg/m ³
Solidus T_{sol}	1373 K	1373 K
Liquidus T_{liq}	1664 K	1773 K
Zerstörungstemperatur $T_{dec} = (T_{sol} + T_{liq})/2$	1519 K	1573 K
Zerstörungsenthalpie H_{dec}	2,10 E6 J/kg	2,58 E6 J/kg
Wärmeleitfähigkeit λ_c	1,59 W/m K	1,17 W/m K
Spezifische Wärme $c_{p,c}$	913 J/kg K	903 J/kg K
Massenanteil von H ₂ O	0,089	0,073 N/m
Massenanteil von CO ₂	0,029	0,212

Tab. 3-3 MCCI-Experimente für die Ermittlung der Wärmeströme

No.	Experiment	Schmelzetyptyp	Betontyp	Bulk-Temperatur (K)	Erosionsgeschwindigkeit (m/s)
0	SWISS	Stahl	LCS	1800	7,7 E-5
1	SURC-4	Stahl	SIL	1800	6,6E-5
2	BETA V1.8	Stahl	SIL	1800	9,7 E-4
3	BETA V5.1	Stahl	SIL	1800	2,5 E-4
4	BETA V2.3	Stahl	SIL	1800	9,7 E-5
5	BETA V3.3	Stahl	LCS	1800	1,3 E-4
6	BETA V5.2	Stahl	SIL	1800	1.2 E-4
7	BETA V2.1	Stahl	SIL	1800	6,0 E-5
8	COMET-H2	Stahl	SIL	1800	2,44 E-4
9	CCI-1 (south)	Oxid	SIL	2173	1,22 E-5
10	CCI-1 (north)	Oxid	SIL	2173	2,15 E-4
11	CCI-1 (axial)	Oxid	SIL	2173	6,06 E-5
12	MACE M4	Oxid	SIL	2150	2,44 E-5

No.	Experiment	Schmelzety	Betontyp	Bulk-Temperatur (K)	Erosionsgeschwindigkeit (m/s)
13	MACE M3b	Oxid	LCS	2050	1,50 E-5
14	ACE L1	Oxid	LCS	2600	1,30 E-4
15	ACE L2	Oxid	SIL	2350	5,00 E-5
16	ACE L5	Oxid	LCS	1950	1,60 E-5
17	ACE L6	Oxid	SIL	2325	5,50 E-5
18	ACE L7	Oxid	LCS	2500	1,7 E-5
19	CCI-2	Oxid	LCS	1973	9,63 E-6
20	CCI-3 (axial)	Oxid	SIL	1923	6,14 E-6
21	CCI-3 (radial)	Oxid	SIL	1923	2,76 E-5
22	COMET L1	Stahl	SIL	1800	7,13 E-5
23	COMET L2 (axial)	Stahl	SIL	1800	1,28 E-4
24	COMET L2 (radial)	Stahl	SIL	1800	5,00 E-5

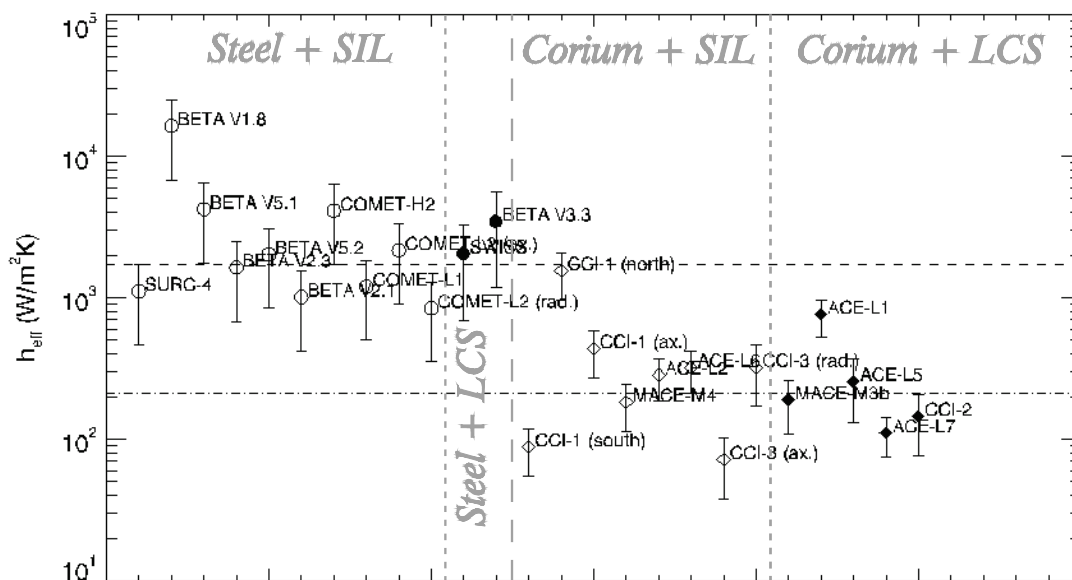


Abb. 3-3 Gemittelte Auswertung des effektiven Wärmeübergangs h_{eff} aus den Experimenten

Das Ergebnis dieser Untersuchung zeigt Abb. 3-3. Für die Experimente mit oxidischer Schmelze wurde ein viel kleinerer mittlerer Wärmeübergangskoeffizient (~ 210 $W/(m^2 K)$) ermittelt als für die Experimente mit Stahlschmelze ($\sim 1,7$ $kW/(m^2 K)$). Ein Unterschied im Hinblick auf die Betonsorte kann auf den ersten Blick nicht festgestellt werden. Auf den zweiten Blick erkennt man aber, dass die Extremwerte bei den Wärmeübergängen für die Schmelze-Experimente im Bereich der Experimente mit oxidischem silikatischem Beton ("Corium + SIL") liegen. Maximum: CCI-1 in lateraler Richtung; Minimum: CCI-3 in axialer Richtung. Die Auswertung zeigt darüberhinaus ei-

ne gute Übereinstimmung zu dem mit den Modellen in WEX für CCI-2 berechneten Wert von etwa 300 W/(m²K). Die Fehlerbereiche sind allerdings – speziell im Falle der Experimente mit Stahlschmelzen – nicht unbeträchtlich.

Zielsetzung der Modellerweiterung für MEDICIS war es, einen Modellansatz zur Verfügung zu stellen, der imstande ist, die in Abb. 3-3 ermittelten, effektiven Wärmeübergangskoeffizienten für die verschiedenen Experimente ausreichend genau (d. h. unter Einbezug der Fehlerbänder) zu prognostizieren. Hierzu wurden zunächst in der Literatur vorhandene Modelle und Korrelationen überprüft. Die Wärmeleitung als alleiniger Mechanismus wäre nicht imstande, die ermittelten Wärmeübergangszahlen zu ermöglichen. Der Wärmetransport muss daher auch auf konvektiven Mechanismen beruhen. Hier wurden Korrelationen für die freie Konvektion einer heißen Flüssigkeit in Kontakt mit kalten (horizontalen) Strukturen /BAE 96/

$$\text{Nu} = 0,27 (\text{Gr Pr})^{1/4} = 0,27 \text{Ra}^{1/4}$$

und für die freie Konvektion einer Schmelze bei innerer Beheizung (Jahn et al. /JAH 75/)

$$\text{Nu}_{\text{down}} = 1,389 \text{Ra}^{0.095}$$

$$\text{Nu}_{\text{side}} = 0,6 \text{Ra}^{0.19}$$

untersucht. Die erzielten Ergebnisse mit diesen Korrelationen für freie Konvektion lagen in derselben Größenordnung wie die Daten aus Abb. 3-3 und zeigten bereits ein gewisses Potential für die Annäherung der experimentell ermittelten Wärmeströme, wie Abb. 3-4 am Beispiel der genannten Korrelation von Jahn et al. zeigt.

Ferner wurde auch die BALI-Korrelation /BON 00/ zur Konvektion in einer gasdurchströmten Schmelze untersucht, die allerdings um Größenordnungen zu hohe Wärmeübergangskoeffizienten lieferte.

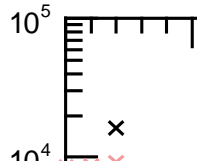


Abb. 3-4 Annäherung der experimentellen Daten (schwarze Kreuze) mit der Nusselt-Korrelation für natürliche Konvektion in volumetrisch beheizten Flüssigkeiten (farbige Kreuze /JAH 75/) für das Ensemble von 25 Experimenten aus Tab. 3-3 unter Anwendung generischer Stoffdaten

Das größte Potential wurde letztlich einem Ansatz beigemessen, der auf der Hypothese einer sich periodisch erneuernden Grenzflächenbildung ("Surface Renewal") zwischen Schmelze und Beton beruht. Die Annahme ist hierbei, dass Schmelze und Beton periodisch einen idealen Kontakt herstellen und der Wärmeübergang aus der Schmelze in den Beton durch transiente Wärmeleitung in der kurzzeitig als ruhend angenommenen Schmelze erfolgt. Der transiente Wärmestrom sinkt dabei mit der Zeit ab. Nach einer charakteristischen Zeitspanne τ wird die Schmelze neu durchmischt und der ideale Kontakt mit neuer einheitlicher Temperatur der Schmelze erneut wiederhergestellt. Die charakteristische Zeitspanne τ wird vorerst empirisch aus den Experimenten bestimmt. Je kürzer diese Zeitspanne ist, desto mehr Vermischung gibt es in der Schmelze und desto größer ist der Beitrag des Spitzen-Wärmestroms direkt nach Herstellung des idealen Kontaktes zwischen Schmelze und Beton. Je länger diese Zeitspanne ist, desto weniger Vermischung gibt es und desto größer ist der Beitrag des flachen Abschnittes des transientem Wärmestroms zum effektiven Wärmeübergang.

Wenn dem Ansatz entsprechend der analytische Ausdruck für den Wärmestrom bei Aufprägung der konstanten Betonzerstörungstemperatur auf einen wärmeleitenden Körper (= kurzzeitig ruhende Schmelze) benutzt und innerhalb der Zeitspanne τ inte-

griert wird, folgt der effektive Wärmestrom q an der Grenzfläche aus der Mittelung dieses Integrals über den Zeitraum τ :

$$q = \frac{2 \lambda (T_p - T_{dec})}{\sqrt{\pi \kappa \tau}} = \frac{2 \sqrt{\lambda c_p \rho_m} (T_p - T_{dec})}{\sqrt{\pi \tau}}$$

Durch Vergleich mit den Wärmeübergangszahlen aus Abb. 3-3 wurden folgende charakteristische Erneuerungszeiten τ für die Experimente mit Stahlschmelze und für die Experimente mit oxidischer Schmelze ermittelt:

$$\tau_{\text{Stahl}} = 25,73 \text{ s}$$

$$\tau_{\text{Oxid}} = 233,76 \text{ s}.$$

Für die so ermittelten Erneuerungszeiten zeigt die Abb. 3-5 die Annäherung der Wärmeübergangszahlen für die betrachteten Experimente.

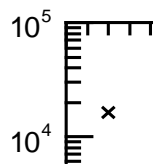


Abb. 3-5 Annäherung der experimentellen Daten (schwarze Kreuze) mit dem Surface-Renewal-Modell (blaue Kreuze) für das Ensemble von 25 Experimenten aus Tab. 3-3 unter Anwendung generischer Stoffdaten

Das um diese Modelloption für den Wärmeübergang erweiterte MEDICIS wurde in die ASTEC-Entwicklungsversion in das CVS-System eingespeist und anhand mehrerer Versuche validiert sowie mit WEX verglichen (siehe Validierungsvorhaben). Das Simulationsverhalten von MEDICIS ist nun im Vergleich zu WEX ausreichend belastbar, um WEX in ASTEC und COCOSYS ablösen zu können. Nach derzeitigem Stand wird

empfohlen, in COCOSYS bzw. ASTEC die empirisch ermittelten Erneuerungszeiten wie oben angegeben in Verbindung mit der neuen Wärmeübergangsoption "Surface Renewal" in MEDICIS zu verwenden. Für die Zukunft besteht die Möglichkeit, die Erneuerungszeiten durch geeignete Modelle anzunähern, die z. B. die Gasgeschwindigkeit und die Viskosität bzw. den Erstarrungsgrad der Schmelze an der Grenzfläche einbeziehen.

3.2 Integration von MEDICIS in COCOSYS - Vergleich der Ankopplung mit WECHSL anhand eines Anlagenszenarios

Für das Übertragen von MEDICIS aus der ASTEC Umgebung nach COCOSYS war ein viel höherer Aufwand nötig als ursprünglich vorgesehen war. Aus diesem Grunde konnten die vorbereitenden Schritte für eine Erweiterung des Kavernenalgorithmus nach 3D nicht wie geplant durchgeführt werden, sondern müssen auf das Anschlussvorhaben RS1185 verschoben werden.

Die Probleme waren in diesem Umfang nicht vorhersehbar und hauptsächlich technischer Natur, bedingt durch den Übergang vom COMPAQ- auf den INTEL-FORTRAN-Compiler für die Integration von ASTEC-MEDICIS nach COCOSYS. Der Wechsel der Plattform hinsichtlich des verwendeten Compilers erfolgte aus folgenden Gründen:

- Der Vertrieb von COMPAQ-VISUAL-FORTRAN (ehemals Microsoft- bzw. DIGITAL-FORTRAN), das bislang für die Übersetzung von COCOSYS für MS-Windows verwendet wurde, wurde eingestellt. Die Einbindung in die graphische Entwicklungsoberfläche unter MS-Windows ("Visual Studio") wird ab sofort von dem INTEL-FORTRAN-Compiler unterstützt. Der Übergang zwischen COMPAQ und INTEL hätte über kurz oder lang aus diesem Grund ohnehin erfolgen müssen.
- Die Installation von ASTEC wird von Seiten des französischen Maintenance-Teams für bestimmte IT-Plattformen unterstützt. Unter Plattform wird hier eine Kombination aus Hardware, Betriebssystem und Compiler verstanden. Die Installation erfolgt generell mittels so genannter Skripte, das sind vorbestimmte bzw. teilweise während der Installation automatisch generierte Befehlsabfolgen, die von Plattform zu Plattform unterschiedliche Befehle und Parameter (z. B. für unterschiedliche Compiler) beinhalten. Die von den französischen Partnern gepflegten Installations-Skripte für ASTEC sehen bereits die Verwendung des INTEL-FORTRAN-Compilers vor, - allerdings unter LINUX. Es besteht daher die Möglich-

keit, dass für Aktualisierungen von MEDICIS in COCOSYS bzw. von den dafür benötigten ASTEC-Datenbankbibliotheken SIGAL und MDB diese Skripte zukünftig genutzt werden können. Wenn die Option "INTEL-FORTRAN für MS-Windows" in die Installationskripte für ASTEC eingepflegt werden, ist zukünftig auch die Neu-Installation von ASTEC für MS-Windows mittels dieser Skripte möglich.

- Für die angestrebte Online-Kopplung zwischen ASTEC und der Visualisierung mittels ATLAS unter MS-Windows wird zukünftig ebenso der Einsatz des INTEL-FORTRAN Compilers unter MS-Windows erforderlich sein.

Nachteilig auf den tatsächlichen Arbeitsaufwand in diesem Vorhaben wirkte sich allerdings aus, dass beide Compiler (COMPAQ und INTEL) unterschiedliche Standards bei den sogenannten "Aufrufkonventionen" verwenden. Für den Programmierer bedeutet dies, dass die beiden Compiler Prozedurnamen, Argumentlisten und die Zwischenspeicherung von Argumenten bei Prozeduraufrufen unterschiedlich handhaben. Problematisch wird es wie im vorliegenden Fall dann, wenn die Programme gemischt-sprachlich angelegt sind. Sowohl COCOSYS (hinsichtlich der Kommunikation mit dem Treibermodul PVM) als auch ASTEC (im Modul CESAR) beinhalten Quellcode in der Programmiersprache "C". Um die Einbettungen von C-Quelltext einheitlich für COCOSYS und ASTEC unter dem INTEL-Compiler handhaben zu können, waren sehr spezielle Anpassungen am Quelltext von COCOSYS nötig, was einen relativ großen Zeitaufwand zur Folge hatte. Diese Erfahrungen kommen aber den zukünftigen Arbeiten bei der COCOSYS/ASTEC-Entwicklung im Hinblick auf die Umstellung von dem COMPAQ-Compiler auf den INTEL-Compiler zugute.

Die gewählte Strategie bei der Einbindung von ASTEC-MEDICIS in COCOSYS sieht vor, dass die Zeitschrittsteuerung von ASTEC mit der Festlegung von so genannten Makro-Zeitschritten in dem Unterprogramm ASTEC (Quelltextdatei "ASTEC.F") erhalten bleibt. Innerhalb dieses Unterprogramms erfolgt daher die Übermittlung der benötigten Synchronisationsdaten mit COCOSYS. Von COCOSYS wird hier an ASTEC zu Beginn eines jeden Zeitschrittes also die aktuelle Problemzeit und die Zeitschrittweite sowie benötigte Daten für die Berechnung der Wärmeabfuhr an der Oberfläche zwischen Schmelze und Atmosphäre (z. B. die Gegentemperatur der Atmosphäre) übermittelt. Das Unterprogramm MEDICIS wird dann für den von COCOSYS übermittelten Synchronisationszeitschritt [TBEG = aktuelle Problemzeit, TEND = aktuelle Problemzeit + Zeitschrittweite] ausgeführt. Im Gegenzug übermittelt ASTEC an COCOSYS nach Berechnung des Zeitschrittes die Temperatur an der freien Oberfläche der

Schmelze (für die COCOSYS-seitige Berechnung des Wärmeeintrags in die Atmosphäre durch Strahlung/Konvektion an der freien Oberfläche der Schmelze) sowie die im jeweiligen Zeitschritt frei gesetzten Gasmassenströme an die Atmosphäre.

Diese Synchronisation wurde weitgehend analog zu der thermohydraulischen Anbindung des WECHSL-Codes an COCOSYS (in RS 979 und RS 1099 /ALL 99, ALL 03/) ausgeführt. Allerdings ist die Ankopplung hinsichtlich des Wärmeübergangs zwischen Schmelze und Atmosphäre bislang etwas vereinfacht worden. Dies hat folgenden Hintergrund: in MEDICIS wird formal die Atmosphäre in der Reaktorgrube im MCCI-Modul mitbilanziert. Die Schnittstelle zwischen MEDICIS und dem Thermohydraulikmodul in ASTEC liegt in den Zu- bzw. Abströmungsöffnungen der Reaktorgrube. Beim Wärmeübertrag zwischen Schmelze und Atmosphäre wird hier allerdings standardmäßig nur die Strahlung berechnet. Die thermohydraulische Anbindung von MEDICIS an COCOSYS legt dagegen die Schnittstelle zwischen Thermohydraulikmodul und MEDICIS auf die Schmelzeoberfläche. In COCOSYS wird zusätzlich zur Strahlung auch ein konvektiver Wärmetransport von der Schmelzeoberfläche an die Atmosphäre gerechnet. Dies müsste prinzipiell in MEDICIS berücksichtigt werden, würde aber eine weitere Modifikation im Quelltext von MEDICIS selbst bedeuten, so dass die Versionen in ASTEC und in COCOSYS nicht mehr identisch wären. Daher wurde zunächst darauf verzichtet, die zusätzliche Abkühlung der Schmelze durch konvektiven Wärmetransport in der Atmosphäre über der Schmelze in MEDICIS zu berücksichtigen. Eine Überschlagsrechnung zur relativen Größenordnung von Strahlung und Konvektion für die in der Beispielanwendung für einen Anlagenfall ermittelten Temperaturniveaus (Abb. 3-7) zeigt, dass die freie Konvektion nur ca. 2 % der gesamten Wärmeabfuhr ausmacht. Die Vernachlässigung der freien Konvektion ist daher gerechtfertigt.

Wesentliche notwendige Änderungen an ASTEC-MEDICIS beschränken sich mit der gewählten Strategie dann hauptsächlich auf die Quelltextdateien "ASTEC.F" und "MEDICIS.F90". Diese Änderungen beeinflussen nicht die physikalische Modellierung, sondern sind aus datentechnischen Gründen erforderlich: In "MEDICIS.F90" müssen einige Daten öffentlich im Modul abgelegt werden, auf die im Rahmen der COCOSYS-Synchronisation innerhalb des übergeordneten Unterprogramms "ASTEC" zugegriffen wird. In allen ASTEC-Quelltexten allerdings musste darüber hinaus das in ASTEC vorgesehene Schreiben an die Standardausgabe (mittels des Befehls WRITE(*,*) o.ä.) wegen der Anbindung an den COCOSYS-Treiber unterdrückt bzw. auf definierte Ausgabedateien umgelenkt werden.

Die Einbindung von ASTEC-MEDICIS in COCOSYS wurde wie im Vorhaben RS 1099 /ALL 03/ an einem Anlagendatensatz überprüft. Es handelt sich hierbei um ein Szenario für einen deutschen DWR mit 1300 MW (KONVOI), bei dem der unterstellte Unfallablauf durch ein kleines Leck in der Hauptkühlmitteleitung ausgelöst wurde. Mit COCOSYS werden alle Phänomene im Containment von Unfallbeginn an simuliert. Das RDB-Versagen wird bei $t = 12280$ s angenommen (aus einer MELCOR-Rechnung). Der mit /ALL 03/ identische COCOSYS-Datensatz ist speziell vereinfacht, um die wesentlichen Phänomene in der Anbindung des MCCI-Moduls an das Thermohydraulik-Modul in COCOSYS wiederzugeben. Die Ergebnisse mit MEDICIS sind in den Abb. 3-6 bis Abb. 3-8 dargestellt und werden dort verglichen mit der gekoppelten Rechnung mit WECHSL sowie mit einer Rechnung, in der die Quellen von Energie und Gasen aus dem Prozess der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in COCOSYS durch Einspeisetabellen basierend auf der MELCOR-Rechnung vorgegeben wurden. Beide Referenzrechnungen (mit WECHSL sowie mit den Einspeisetabellen aus MELCOR) waren im Vorhaben RS 1099 erstellt worden /ALL 03/. Es wurde eine homogene Mischung der Schmelze (anfänglich: ca. $135 \cdot 10^3$ kg Oxid und $46 \cdot 10^3$ kg Metall) angenommen. In WECHSL wurde das Eindringen von Wasser auf die Schmelze bei Überschreiten einer absoluten seitlichen Erosionstiefe von 4,17 m berücksichtigt (Penetration der Schmelze durch den biologischen Schild, so dass dort die Wasservorlage aus dem Sumpf erreicht wird). Zu den Modellen in MEDICIS für die Flutung der Schmelze stehen Arbeiten im Nachfolgevorhaben RS1185 an. Daher wurde für die Testrechnung mit MEDICIS ausschließlich mit "trockenen" Bedingungen gerechnet.

(COCOSYS) MCCI Module

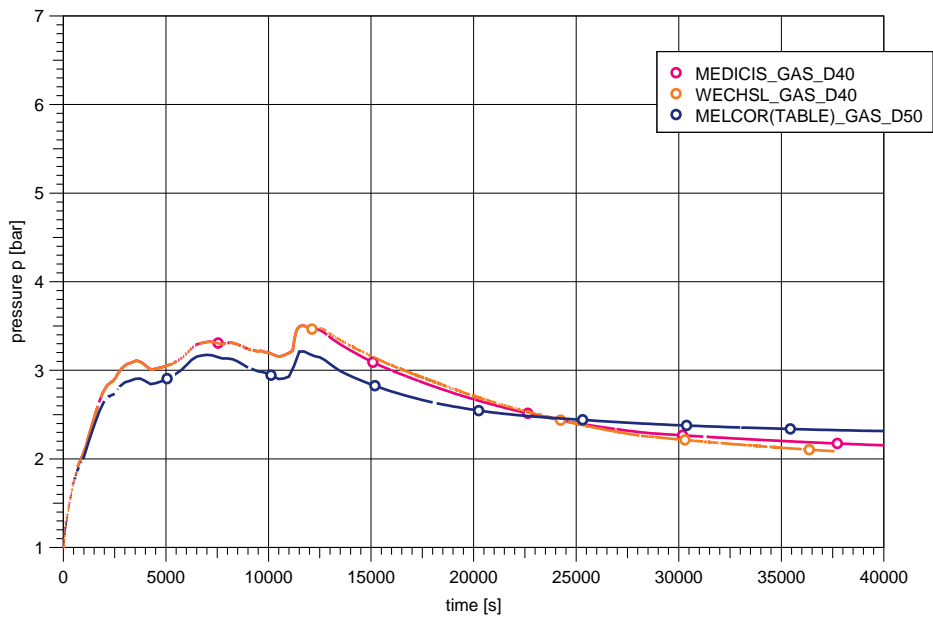


Abb. 3-6 Vergleich der berechneten Drücke im Dome-Bereich für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS-WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR

(COCOSYS) MCCI Module

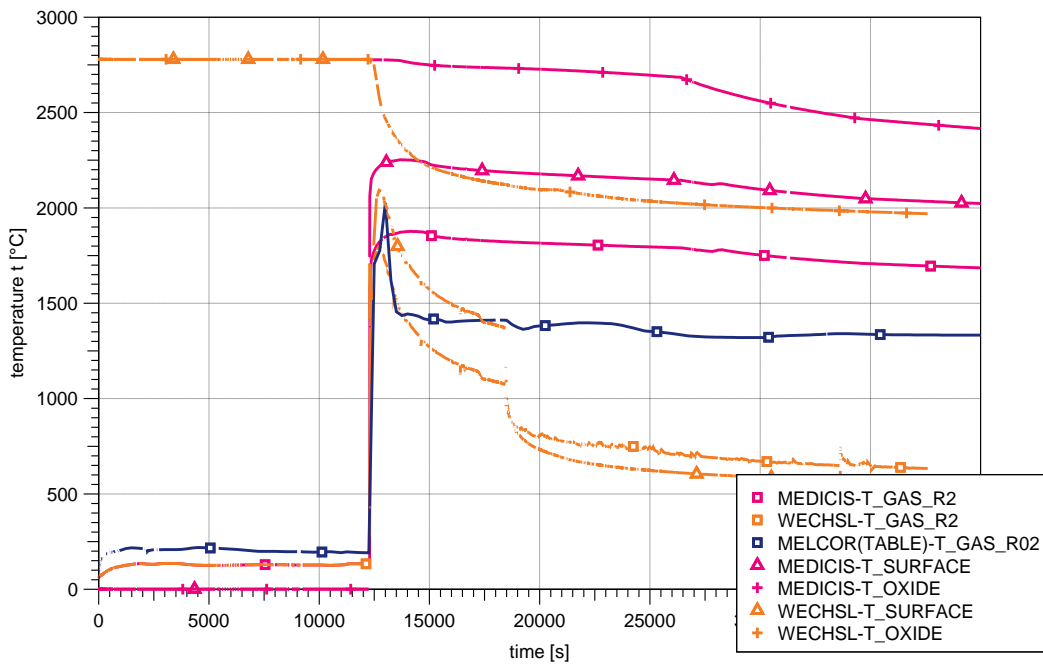


Abb. 3-7 Vergleich der berechneten Temperaturen in der Reaktorgrube für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS-WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR

(COCOSYS) MCCI Module

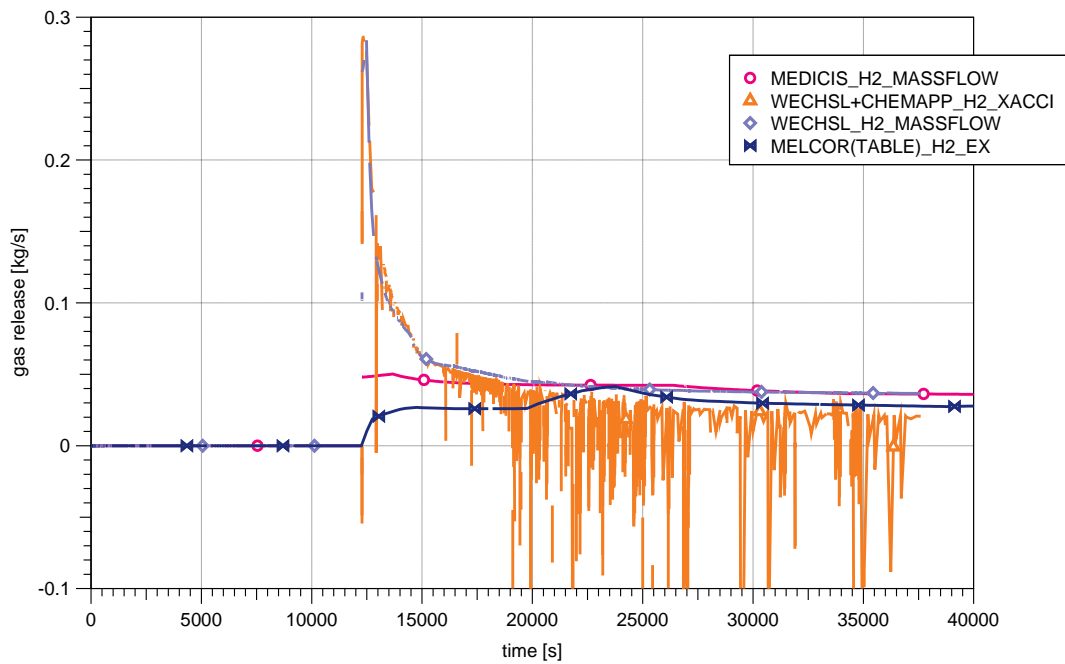


Abb. 3-8 Vergleich der berechneten Gasfreisetzungen (H_2) für die Kopplungen zwischen COCOSYS-MEDICIS (neu), COCOSYS-WECHSL (alt) und COCOSYS mit Einspeisetabellen aus MELCOR

Die Ergebnisse zeigen im Hinblick auf den resultierenden Containmentdruck eine weitgehende Äquivalenz der Ergebnisse zwischen der alten Anbindung von WECHSL und der neuen Anbindung von MEDICIS (Abb. 3-6). MEDICIS zeigt allerdings eine vergleichsweise höhere Temperatur der Schmelze (+ 500 K) sowie eine sehr viel höhere Temperatur der Schmelzeoberfläche (+ 1500 K, Abb. 3-7). Dies führt mit MEDICIS langfristig zu einem deutlich höheren Niveau der Atmosphärentemperatur in der Reaktorgrube im Vergleich zur Anbindung mit WECHSL (+ 1000 K). Der Unterschied zu der mit den MELCOR-Daten gerechneten Atmosphärentemperatur ist nicht so groß (< 500 K), wie im Vergleich mit WECHSL. In der Rechnung mit WECHSL wurde aufgrund der seitlichen Penetration der Schmelze durch den biologischen Schild ab ca. $t = 18450$ s unter gefluteten Bedingungen weitergerechnet. Die mit WECHSL berechneten Temperaturen von Schmelzeoberfläche und die der Reaktorgrube sinken daraufhin beträchtlich (um ca. 300...500 K). Die Temperatur der Schmelze ändert sich hierbei allerdings kaum. Das Absinken der Temperaturen von Schmelzeoberfläche und Atmosphäre trägt zu den großen Temperaturunterschieden zwischen WECHSL und MEDICIS in Abb. 3-7 bei, da in MEDICIS für den gesamten Unfall mit trockenen Bedingungen gerechnet wurde.

Abb. 3-8 zeigt den Vergleich für die berechneten H₂-Freisetzungsraten. MEDICIS berechnet eine nahezu konstante H₂-Freisetzungsrates von ca. 0,04 kg/s. Aus der MELCOR-Rechnung gehen geringfügig niedrigere Freisetzungsrates für H₂, vor allem bei Beginn der Schmelze-Beton-Wechselwirkung, hervor. Die von WECHSL gerechnete Freisetzungsrates setzt mit einer deutlichen Spitze von ca. 0,3 kg/s ein und flacht dann rasch zu einem ähnlichen Niveau wie mit MEDICIS berechnet ab. Da WECHSL in der thermohydraulischen Anbindung mit CHEMAPP gekoppelt war, wird nicht die von WECHSL berechnete Gasfreisetzung direkt in die Atmosphäre des Containments eingespeist (und an COCOSYS übergeben), sondern es werden zuvor erst mögliche chemische Reaktionen, z. B. die Verbrennung von H₂, verrechnet. Im Ergebnis sendet CHEMAPP dann eine etwas niedrigere Freisetzungsrates von H₂ an COCOSYS als wie ursprünglich mit WECHSL berechnet (Abb. 3-8). In der früheren Anbindung von WECHSL und CHEMAPP an COCOSYS wurden allerdings numerische Instabilitäten beobachtet, die sich in der Kurve durch verschiedene abrupte Ausschläge der Freisetzungsrates niederschlugen und die sich ungünstig auf die Stabilität der gesamten COCOSYS-Rechnung auswirken.

Ausgehend von dem hier erreichten Stand der neuen Anbindung von MEDICIS an COCOSYS sind noch folgende offene Punkte zu nennen:

- Anbindung/Überprüfung der Modelle für Wasserüberdeckung in MEDICIS an die hier durchgeführte Erweiterung der GRS zum Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton
- Erweiterung der Schnittstelle von MEDICIS zu COCOSYS für den Fall der Wasserüberdeckung
- Überprüfung weiterer spezieller Funktionalitäten von MEDICIS in der Anbindung an COCOSYS (z. B. das in WECHSL nicht vorhandene Modell für die dynamische Ausbildung von Schichtungszuständen)
- Anbindung eines Modells für die Freisetzung von Aerosol- und Spaltprodukten aus der Schmelze
- Erweiterung der Schnittstellen in den Modulen für das Ex-Vessel-Schmelzeverhalten (DCH - Ausbreitung - MCCI) für die Berücksichtigung wichtiger Ablaufszenarien

- Erweiterung der Kavernendarstellung auf 3D zur korrekten Behandlung geometrischer Effekte, speziell von Singularitäten in der Reaktorgeometrie

Es ist geplant, diese offenen Punkte im Nachfolgevorhaben RS1185 zu bearbeiten.

4 Vervollständigung der Störfallsimulation

4.1 Thermohydraulik

4.1.1 Wärmeübergangsmodelle

4.1.1.1 Überprüfung der verbesserten Wärmeübergangsmodelle

Die Wärmeübergangsmodelle in COCOSYS wurden anhand von THAI-Versuchen im Rahmen des Vorhabens mit dem FKZ 150 1234 von der RU Bochum /BRA 04/ untersucht. In diesen Arbeiten wurden Verbesserungen für die Berechnung der freien und erzwungenen Konvektion vorgeschlagen. Anhand eigener Analysen zu den Versuchen im Battelle-Modell-Containment (BMC) VANAM-M3 und BMC-VANAM-M2* wurde die Problematik der charakteristischen Länge bei der Berechnung der freien Konvektion /ALL 03b/ untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass zur optimalen Berechnung thermohydraulischer Zustandsgrößen generell eine charakteristische Länge von 5 cm verwendet werden sollte. Allerdings werden dabei für den Versuch BMC-VANAM-M2* wesentlich schlechtere Ergebnisse für die Aerosolkonzentration in den innenliegenden Räumen erzielt, als mit anderen Werten.

Im Rahmen eines weiteren Vorhabens wurden Wärmeübergangsmodelle aus WAVCO /KLI 00/ in COCOSYS implementiert. Ziel war es, weitgehend gleiche Ergebnisse für WAVCO und COCOSYS zu erzielen. Bei der Implementierung und der darauf durchgeführten Vergleichsrechnungen wurden einige grundsätzliche Unterschiede zwischen den Modellen und der Implementierung in WAVCO und COCOSYS festgestellt.

Basierend auf den obigen Arbeiten wurden folgende Probleme bei den COCOSYS-Wärmeübergangsmodellen identifiziert:

- In die Berechnung der Graßhof-Zahl geht in der WAVCO-Version der in der Grenzschicht möglicherweise gebildete Nebel bei der Dichteberechnung mit ein. Durch die erhöhte Dichtedifferenz vergrößern sich insbesondere unter kondensierenden Bedingungen die Graßhof-Zahl und der konvektive Wärmeübergang, welcher dann linear in den nassen Wärmeübergang eingeht.
- In COCOSYS werden zuerst die Nusselt-Zahlen für freie und erzwungene Konvektion berechnet. In beiden Korrelationen gehen unterschiedliche charakteristische

Längen ein (Länge der Platte bei freier Konvektion, Durchmesser der Zone bei erzwungener Konvektion). Bei der Zusammenfassung muss daher die erzwungene Konvektion skaliert werden. Hier bietet sich die Möglichkeit, ebenfalls eine Plattengleichung für die erzwungene Konvektion zu verwenden oder – wie in WAVCO – zuerst die getrennten Alpha-Zahlen zu berechnen. Die Verwendung anderer Gleichungen für die erzwungene Konvektion hat wie in /BRA 04/ gezeigt wird, zu keinen wesentlichen Verbesserungen geführt. Daher werden die bisher verwendeten Korrelationen beibehalten.

- In COCOSYS wird für die Anwendung der Reynolds-Analogie davon ausgegangen, dass $Nu \sim Ra^m \cdot Pr^n$ ist. Da aber insbesondere die Korrelation für die erzwungene Konvektion eine andere Form in Bezug auf Pr hat, wird der Exponent n durch eine Ableitung von $\log(Nu)$ nach Pr berechnet. Erfahrungen haben gezeigt, dass so für den berechneten Exponenten n teilweise sehr unrealistische Werte errechnet werden. In WAVCO wird dagegen der Stoffübergangskoeffizient β für jede einzelne Korrelation separat berechnet und entsprechend wie der Wärmeübergangswert α zusammengefasst.

Entsprechend der oben gewonnenen Erkenntnisse wurden die Wärmeübergangsmodelle von der GRS folgenderweise überarbeitet: Parallel zu den bestehenden Modellen für freie (FRC) und erzwungene (FOC) Konvektion sowie Kondensation (COD) wurde die Option CO1 eingeführt, welche die Effekte zusammenfassend behandelt. Im Folgenden werden die wesentlichen Änderungen kurz beschrieben. Details finden sich im COCOSYS Referenzmanual.

Zur Berücksichtigung des Nebels bei der Berechnung der mittleren Dichte werden die Zustände für Dampf (Index „D“) und Luft (Summe der nicht-kondensierenden Gase, Index „L“) in Form der idealen Gasgleichung mit einer variablen spezifischen Gaskonstante geschrieben:

$$p_{H_2O} = m_{H_2O} R_D T_w \quad \text{und} \quad p_L = m_L R_L T_w ,$$

(mit m_{H_2O} : Gesamtwassermasse, m_L : Luftmasse, T_w : Wandtemperatur) woraus

$$\Rightarrow \frac{p_{H_2O}}{m_{H_2O} R_D} = \frac{p_L}{m_L R_L} = \frac{p - p_{H_2O}}{m_L R_L}$$

folgt. Der Dampfanteil $m_{D,W}$ an der Wand wird dann über

$$m_{D,W} = \frac{m_L p_{\text{sat}}(T_W) R_L}{(p - p_{\text{sat}}) R_{D,W}}$$

berechnet. Ist dieser Anteil bekannt, kann die mittlere Dichte berechnet werden:

$$\bar{\rho}_W = \frac{1}{\frac{m_L + m_{D,W}}{\rho_G} + \frac{m_{H_2O} - m_{D,W}}{\rho_{H_2O}}} . \quad \rho_G : \text{Gemischdichte aus Luft und Dampf.}$$

$\bar{\rho}_W$ wird dann mit der Dichte in der Zone ρ_Z und der mittleren Dichte zwischen Wand und Zone $\bar{\rho}_{av}$ zur Berechnung der Graßhof-Zahl verwendet:

$$Gr = \frac{g l^3 (\bar{\rho}_W - \rho_Z) \bar{\rho}_{av}}{\eta^2} .$$

Die Korrelationen selbst wurden nicht verändert. Allerdings werden nun die Wärmeübergangskoeffizienten α und Stoffübergangskoeffizienten β separat berechnet:

$$\alpha_{\text{frc}} = \frac{\lambda Nu_{\text{frc}}}{l_{\text{frc}}}, \quad \alpha_{\text{foc}} = \frac{\lambda Nu_{\text{foc}}}{l_{\text{foc}}} \quad \text{sowie} \quad \beta_{\text{frc}} = \frac{D Nu_{D_{\text{frc}}}}{l_{\text{frc}}}, \quad \beta_{\text{foc}} = \frac{D Nu_{D_{\text{foc}}}}{l_{\text{foc}}}$$

$$\alpha = \sqrt[3]{\alpha_{\text{frc}}^3 + \alpha_{\text{foc}}^3} \quad \text{und} \quad \beta = \sqrt[3]{\beta_{\text{frc}}^3 + \beta_{\text{foc}}^3}$$

Für die Option CO1 wurde die Berechnung der Kondensationsrate im Vergleich zur bisherigen COD- und CDW-Option ebenfalls nicht modifiziert.

Das neue Modell wurde anhand mehrerer Versuche getestet. Dabei wurde insbesondere das Verhalten in Bezug auf die charakteristische Länge untersucht. Die erzielten Ergebnisse werden im Folgenden zusammenfassend dargestellt. Dabei werden für experimentelle Daten (EXP) schwarze, für die ursprünglichen Optionen mit kurzen Längen blaue (Rechnung: ORG) und mit langen Längen grüne (Rechnung: LNG) sowie rote Kurven für die neue CO1-Option verwendet.

Test anhand HDR E11.4

Der Versuch wurde bereits in /ALL 99b/ beschrieben. Diese Versuchsanlage ist im Hinblick auf die realen Verhältnisse in Kernkraftwerken am besten für den Vergleich geeignet. Der Einfachheit halber wurden bei Verwendung der Option CO1 und der „langen Längen“ alle charakteristischen Längen von 0,05 m auf 2,5 m erhöht. Die Ergebnisse (Abb. 4-1, Abb. 4-2) mit dem ursprünglichen Modell und kurzen Längen (blaue Kurven) und bei Verwendung der Option CO1 und langen Längen (rote Kurven) sind sehr ähnlich. Würde man mit dem ursprünglichen Modell die langen Längen verwenden, wären der Druck sowie die Temperaturen deutlich erhöht, wie unten gezeigt wird (grüne Kurve).

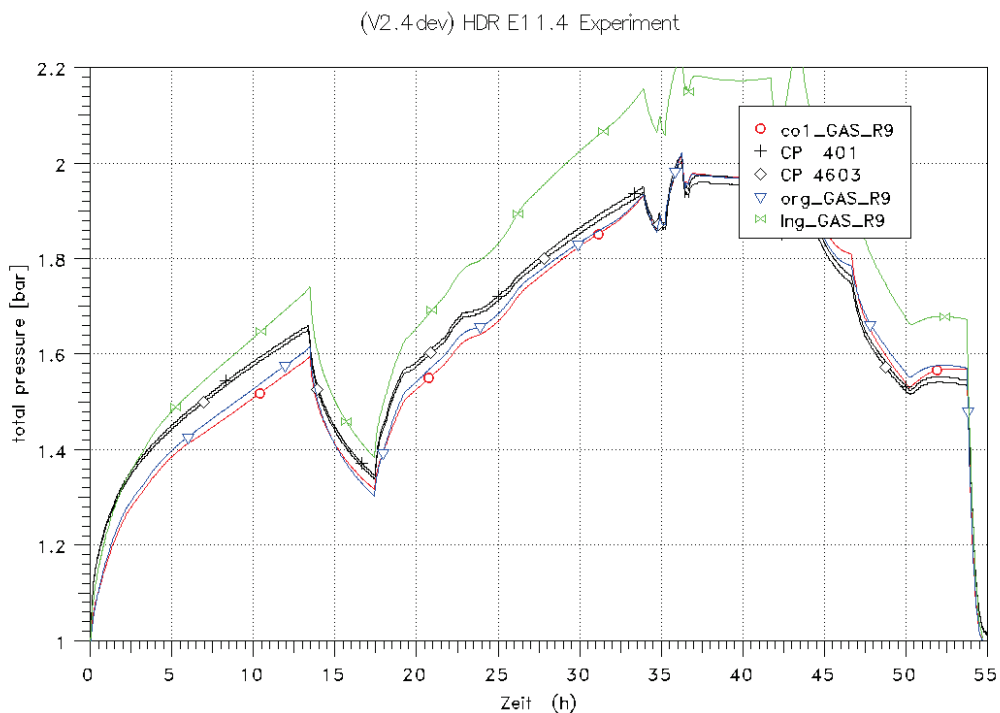


Abb. 4-1 HDR E11.4: Vergleich des Gesamtdrucks

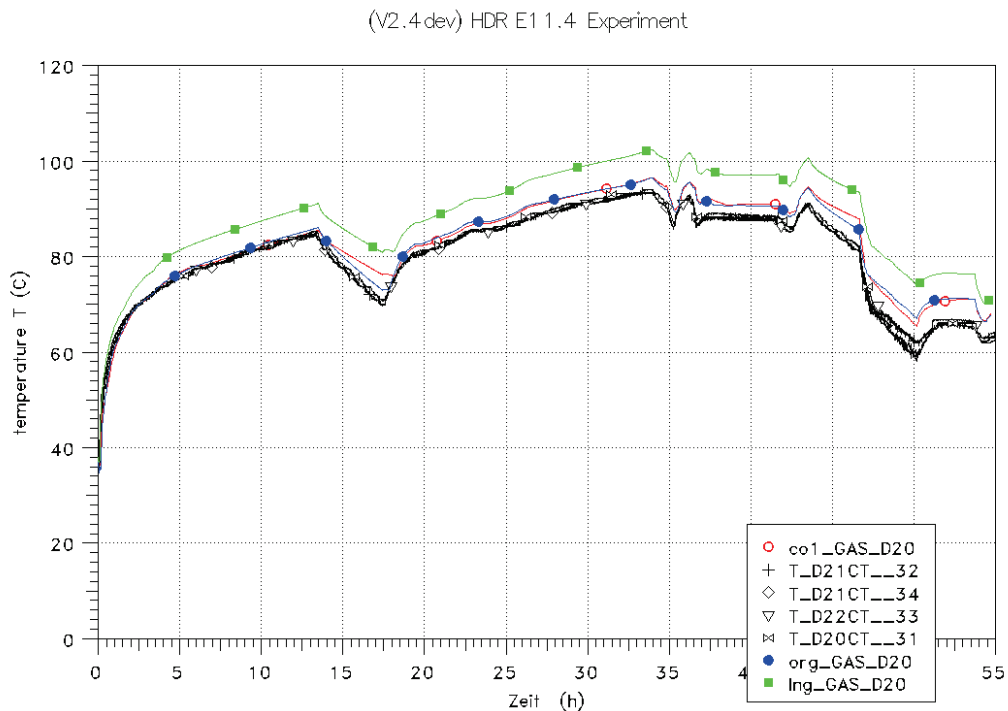


Abb. 4-2 HDR E11.4: Vergleich der Temperaturen im Dom

Test anhand THAI-TH13

Da der Wärmeübergang auch einen erheblichen Einfluss auf die Nebelbildung hat, wurde das neue CO1-Modell auch anhand des THAI-Versuchs TH13 getestet, da hier sowohl die Nebelkonzentration direkt gemessen wurde, als auch die thermohydraulischen Randbedingungen im Vergleich zu den Versuchen im Battelle-Modell-Containment genau bekannt sind. Es wurde der im ISP-47 verwendete Datensatz benutzt /ALL 07/.

Auch für TH13 sind die Ergebnisse mit dem ursprünglichen Modell (ORG) und kurzen Längen und dem neuen CO1-Modell mit langen Längen sehr ähnlich (Abb. 4-3, Abb. 4-4). Dagegen werden bei Verwendung der langen Längen und den ursprünglichen Modellen (LNG) wie für E11.4 höhere Drücke und Temperaturen berechnet. Mit dem neuen Modell werden etwas höhere Nebelkonzentrationen berechnet, wie in Abb. 4-5 gezeigt wird. Diese maximal berechnete Nebelkonzentration ist sogar höher als im Vergleich zu der LNG-Rechnung. Daraus ist schon zu erkennen, dass der Wärmeübergang und hier insbesondere das Verhältnis zwischen konvektivem und nassem Wärmeübergang einen erheblichen Einfluss auf das Aerosolverhalten haben.

ThAI TH13

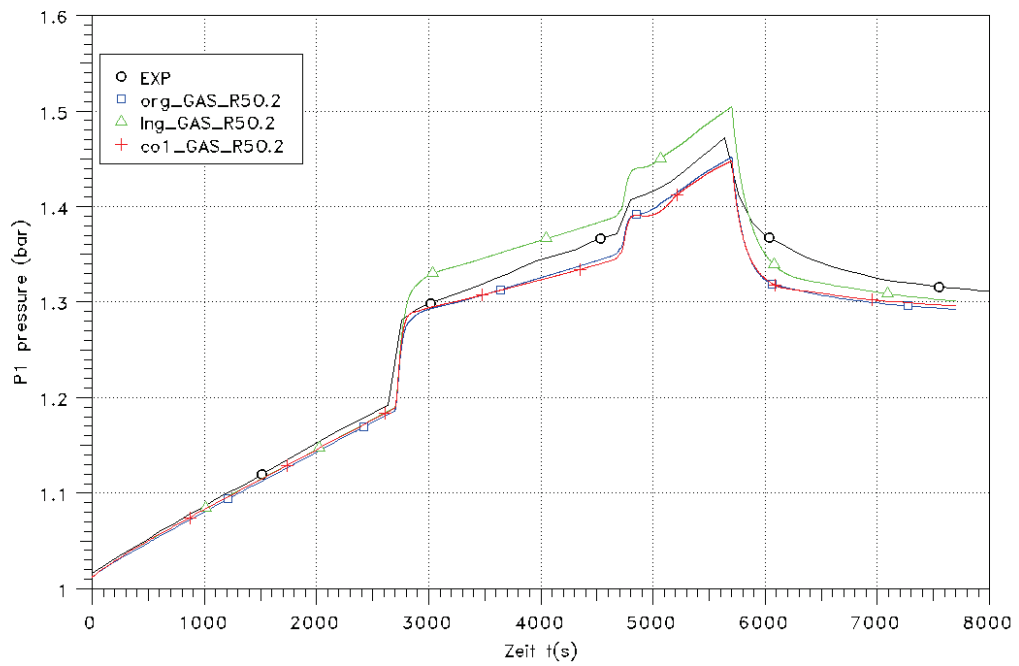


Abb. 4-3 THAI-TH13: Vergleich des Gesamtdrucks

ThAI TH13

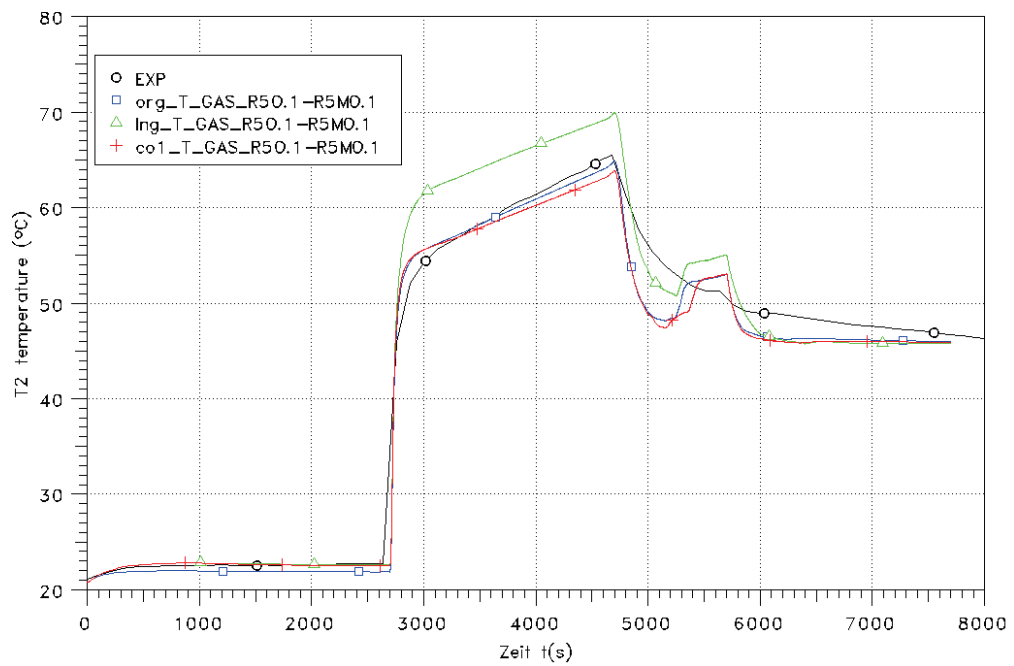


Abb. 4-4 THAI-TH13: Vergleich der Temperaturen im Dombereich

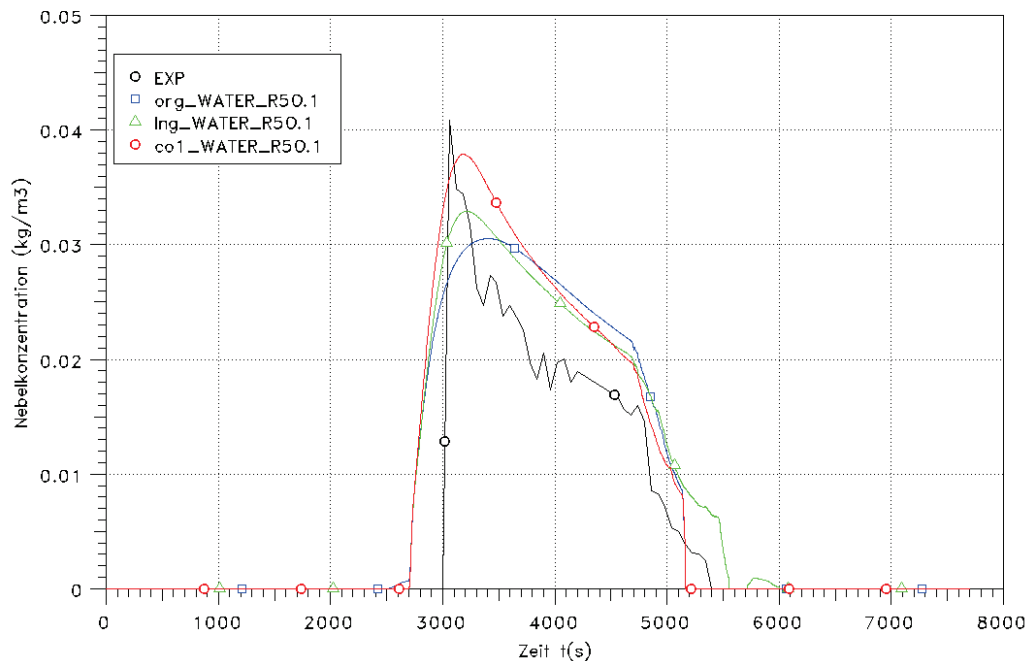


Abb. 4-5 THAI-TH13: Vergleich der Nebelkonzentrationen

Test anhand BMC-VANAM-M2*

Der Battelle-Modell-Containment-Versuch VANAM-M2* wurde bereits im Hinblick auf die Wechselwirkung zwischen Aerosolverhalten und Wärmeübergang untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass mit dem ursprünglichen Modell bessere Aerosolergebnisse bei der Verwendung von langen Längen mit COCOSYS erzielt werden. Somit gab es unterschiedliche Empfehlungen für die charakteristischen Längen, je nachdem, ob der Schwerpunkt auf den Thermohydraulik- oder den Aerosolergebnissen liegt.

Insgesamt wurden für die Überprüfung der neuen Option 5 Rechnungen durchgeführt:

Rechnung	Bemerkung	Darstellung
LNG	Rechnung mit ursprünglichen Modell (FRC+FOC+COD) und langen realen Längen	blau
1CM	wie LNG mit Länge = 1 cm	rot
5CM	wie LNG mit Länge = 5 cm	grün
CO1	Rechnung mit neuem Modell CO1 und langen realen Längen	magenta
PG	wie CO1 mit „erhöhtem Corradini-Faktor“	orange

Durch die geringe Wärmeleitfähigkeit des Betoncontainments ist im Hinblick auf die Thermohydraulik der Einfluss der charakteristischen Länge erheblich geringer. Daher sind der Gesamtdruck im Containment (Abb. 4-6) und die Temperaturen (z. B. im Dom, Abb. 4-7) in allen Rechnungen praktisch gleich. Dagegen werden die Feuchte und die Volumen Kondensation durch das Verhältnis zwischen trockenem und nassem Wärmeübergang bestimmt. Daher ist der Unterschied hierfür in den verschiedenen Rechnungen etwas größer (Abb. 4-8 und Abb. 4-11). Bei Verwendung der ursprünglichen Modelle (FRC+FOC+COD) für den Wärmeübergang werden die höchsten Feuchten und Volumen Kondensationsraten bei Verwendung von realistischen charakteristischen Längen berechnet. Insbesondere die Volumen Kondensationsrate hat einen erheblichen Einfluss auf die Aerosolablagerung und führt daher in der LNG-Rechnung zu den besten Ergebnissen (Abb. 4-12). In der CO1-Rechnung ist dagegen die Volumen Kondensationsrate sogar noch geringer als in der 5CM-Rechnung, so dass höhere Aerosolkonzentrationen berechnet werden. Das Verhältnis der Übergangskoeffizienten α/β (Abb. 4-9) und der Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{\text{kond}}/\alpha_{\text{konv}}$ ist zwar in der 5CM und CO1-Rechnung praktisch immer gleich, hat aber ab 24h während der nassen Ablagerung etwas höhere Werte in der CO1-Rechnung.

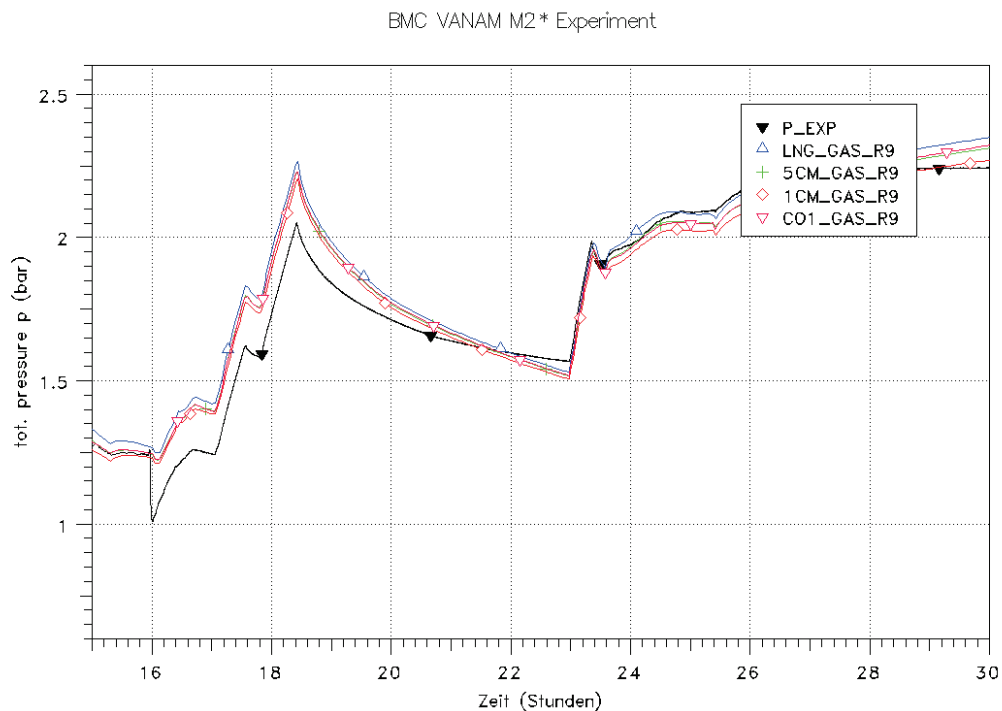


Abb. 4-6 BMC-VANAM-M2*: Vergleich des Drucks

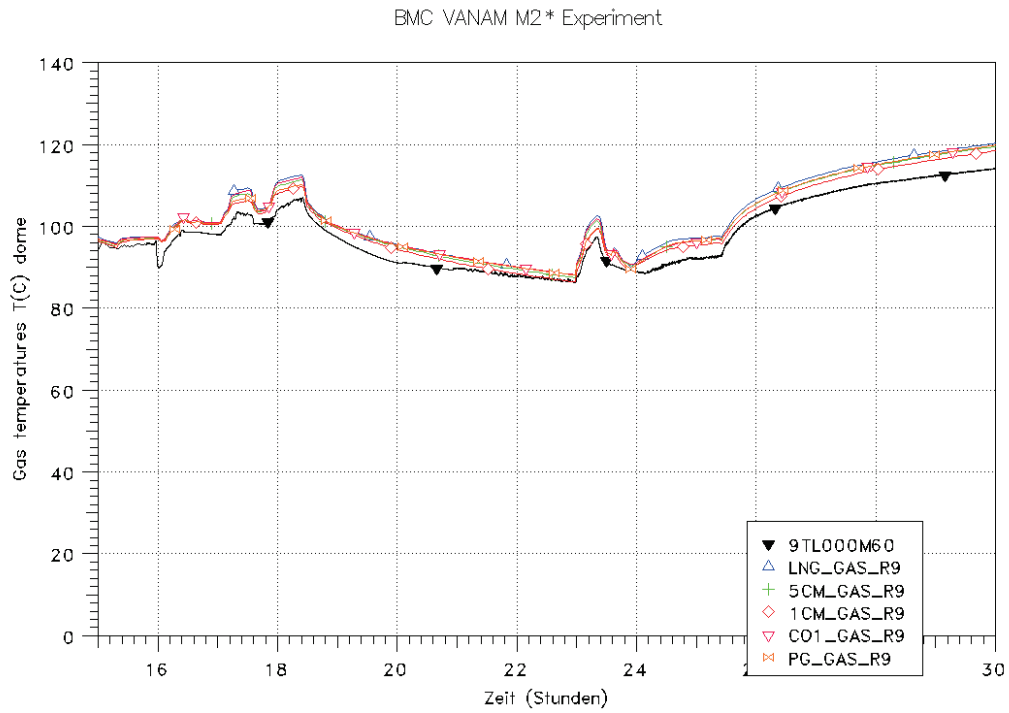


Abb. 4-7 BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Temperatur im Dom

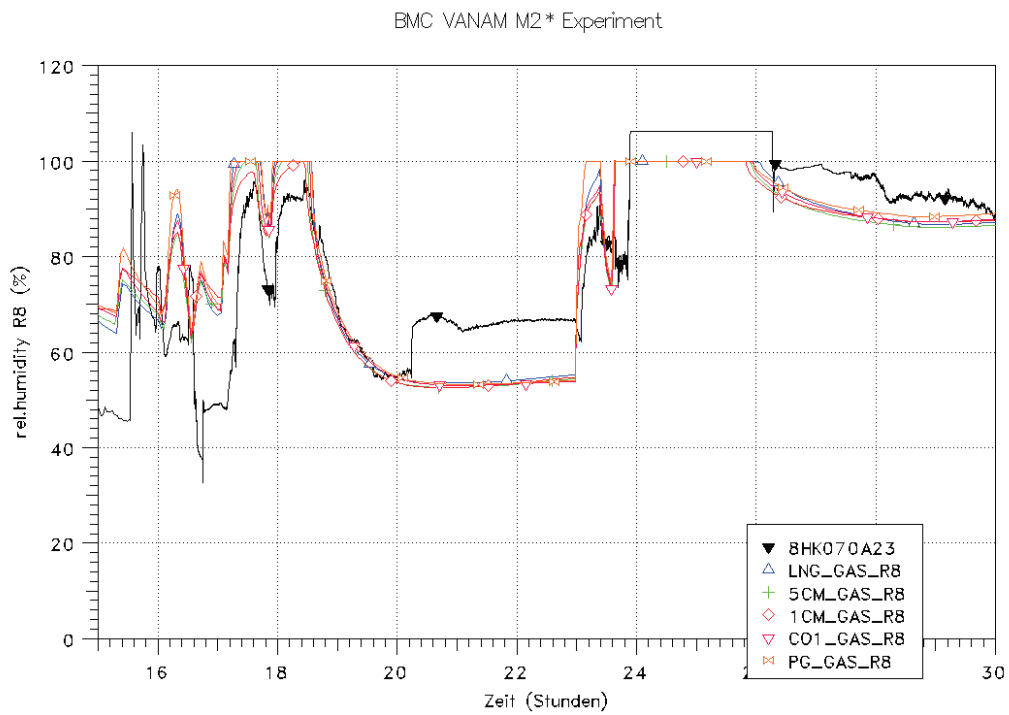


Abb. 4-8 BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Feuchte in R8

BMC VANAM M2* Experiment

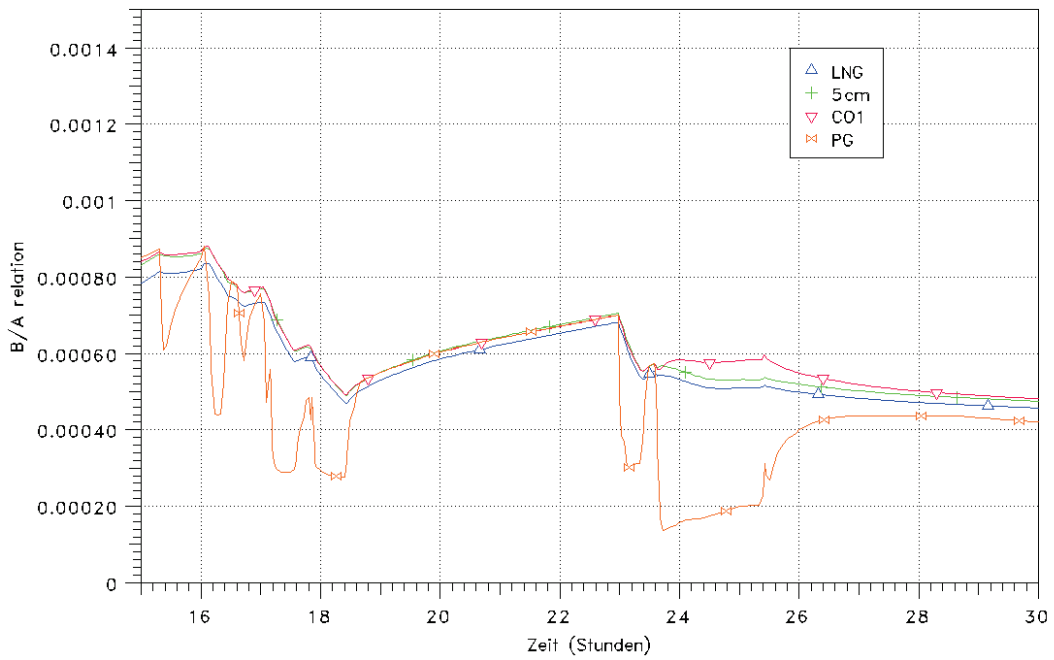


Abb. 4-9 BMC-VANAM-M2*: Verhältnis der Koeffizienten β/α

BMC VANAM M2* Experiment

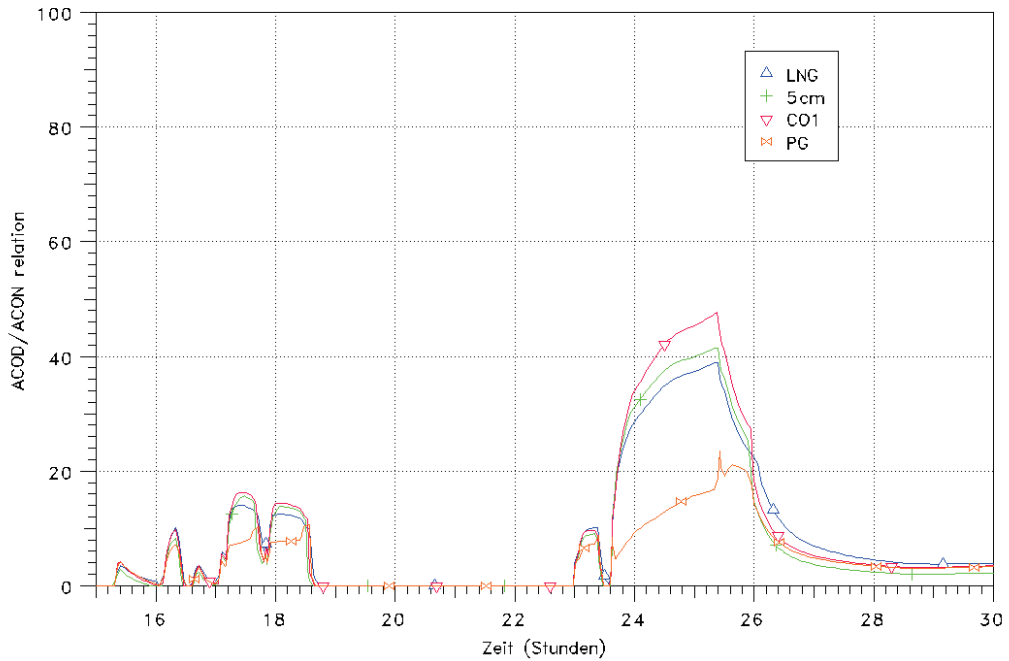


Abb. 4-10 BMC-VANAM-M2*: Verhältnis der Wärmeübergangskoeffizienten $\alpha_{\text{COND}}/\alpha_{\text{CONV}}$

BMC VANAM M2* Experiment

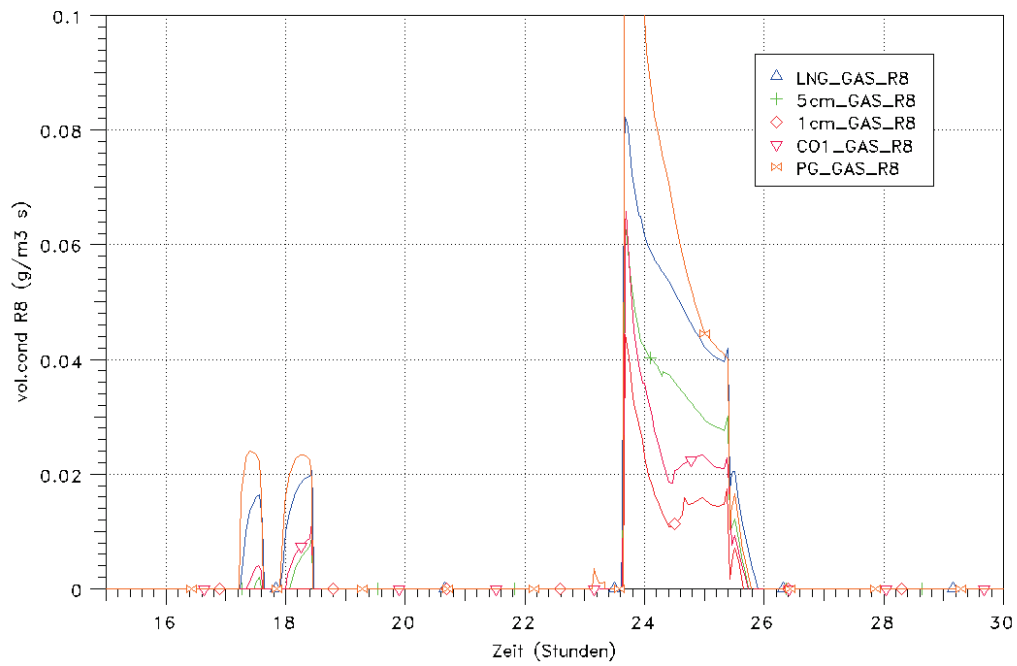


Abb. 4-11 BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Volumenkondensationsrate in R8

BMC VANAM M2* Experiment

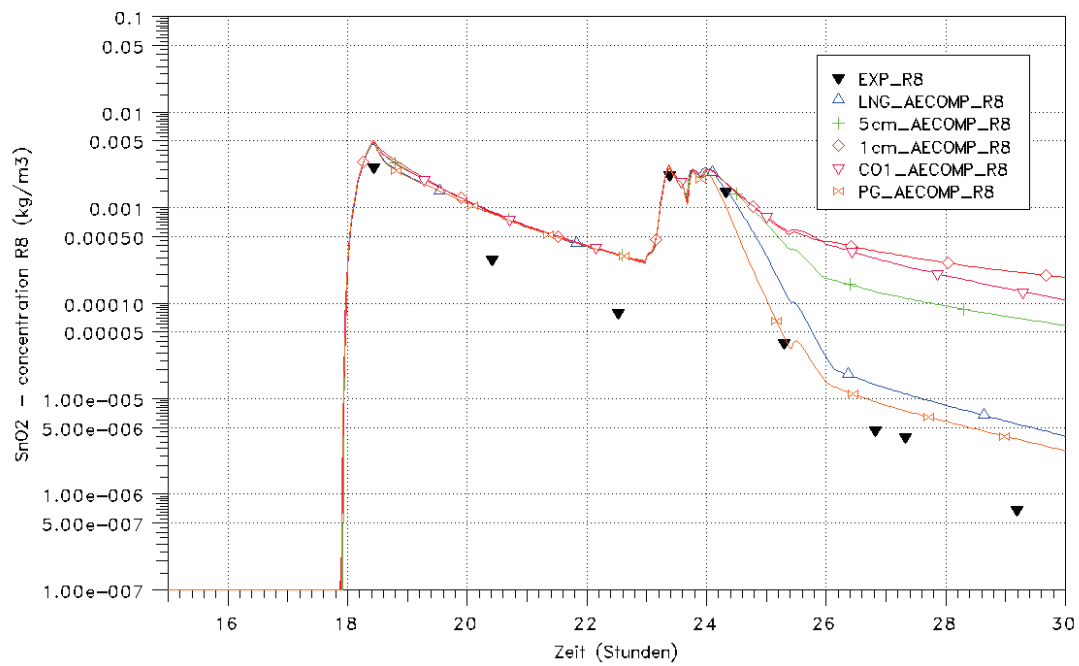


Abb. 4-12 BMC-VANAM-M2*: Vergleich der Aerosolkonzentrationen in R8

Um das Verhalten zu verbessern, wurde die sogenannte Corradini&Bird-Korrektur für hohe Kondensationsraten mit dem Faktor $f = 40$ verstärkt.

$$\alpha_{\text{corr}} = \frac{\gamma}{1 - e^{-\gamma}} \alpha \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{f G c_p}{A}$$

G: Wandkondensationsrate, c_p : spezifische Wärmekapazität, A: Fläche. Dadurch erhöhen sich entsprechend die Volumenkondensationsrate und der Aerosolabbau, ohne das sich nennenswert der Gesamtwärmestrom ändert.

4.1.1.2 Fazit

Mit dem von der GRS überarbeiteten CO1-Wärmeübergangsmodell ist es nun möglich, charakteristische Längen entsprechend der Regelungen in den Handbüchern zu verwenden. Hinsichtlich der Thermohydraulik wurden die Ergebnisse anhand HDR E11.4, THAI-TH13 erfolgreich getestet. In Bezug auf das Aerosolverhalten wurden zunächst keine verbesserten Ergebnisse erzielt. Erst nachdem der sogenannte Corradini&Bird-Faktor erhöht wurde, wurden für den Fall BMC-VANAM-M2* entsprechende Aerosolabbauraten errechnet. Da die Nebelkonzentration in THAI-TH13 gut berechnet wurde, ist zu hinterfragen, ob es andere mögliche Ursachen für den starken Aerosolabbau gibt. So ist zu bedenken, dass die thermohydraulischen Randbedingungen aufgrund der vorhandenen Leckage im Battelle-Modell-Containment nur relativ ungenau zu berechnen sind.

Da der Wärmeübergang eine wesentliche Bedeutung hat, sind daher noch weitere Validierungsrechnungen notwendig. Sollte sich die Anwendbarkeit des neuen Wärmeübergangsmodells CO1 in COCOSYS auch für andere Versuche bestätigen, so können dann charakteristische Längen entsprechend der Vorgaben für die Korrelation verwendet werden.

4.1.2 THAI-Validierung

4.1.2.1 Erweiterung COCOSYS-Manual basierend auf THAI-Validierung

Eine Atmosphärensichtungung kann durch Einspeisung von leichtem Gas, Dampf oder Wärme in obere Bereiche eines Containments bzw. einer Versuchsanlage aufgebaut werden. Dabei bildet sich oben ein leichtes Atmosphären-Gas-Gemisch, während in den unteren Bereichen die Atmosphäre in ihrer ursprünglichen schweren Zusammen-

setzung verbleibt. Dazwischen gibt es einen Übergangsbereich. Durch Einspeisung von leichtem Gas, Dampf oder Wärme in untere Anlagenbereiche kann eine Schichtung wieder aufgelöst werden.

Diese Vorgänge wurden in den THAI-Versuchen TH2, TH7, TH10 und TH13 und HM-2 untersucht und blind mit COCOSYS gerechnet /ALL 07, ALL 03b/. Weitere Schichtungsversuche wurden im Battelle Modell Containment durchgeführt (F2, VANAM, HYJET), im HDR-Containment (E11.2), sowie bei Panda-SETH /ALL 03b/.

Aus den Ergebnissen der Rechnungen mit COCOSYS wurden Nodalisierungsempfehlungen abgeleitet und im COCOSYS-Manual dokumentiert /KLE 08/. Im Folgenden wird eine Zusammenfassung der im Manual enthaltenen Ausführungen gegeben.

Die Simulation einer Schichtung mit dem Rechenprogramm erfordert

- eine genügend feine Unterteilung der Nodalisierung in vertikale Ebenen,
- sowie eine adäquate Simulation der Einspeisung.

Empfehlungen für die Simulation von Gas- und Dampfeinspeisungen

Sowohl der Aufbau als in noch stärkerem Maße die Auflösung einer Atmosphärenschichtung wird von der Stärke sowie der Form der Gas- bzw. Dampfeinspeisung bestimmt. Deshalb ist eine adäquate Simulation der Einspeisung erforderlich.

Für Einspeisungen, die im Experiment gegen eine Wand bzw. Prallplatte gerichtet sind, hat sich in den Simulationsrechnungen die Einspeisung in die entsprechende Zone des Datensatzes bewährt.

Aufwärtsgerichtete Einspeisungen sollten mit Hilfe von Plumezonen dargestellt werden. Dies wird anhand der COCOSYS-Nodalisierung zum Versuch THAI HM-2 verdeutlicht (Abb. 4-13).

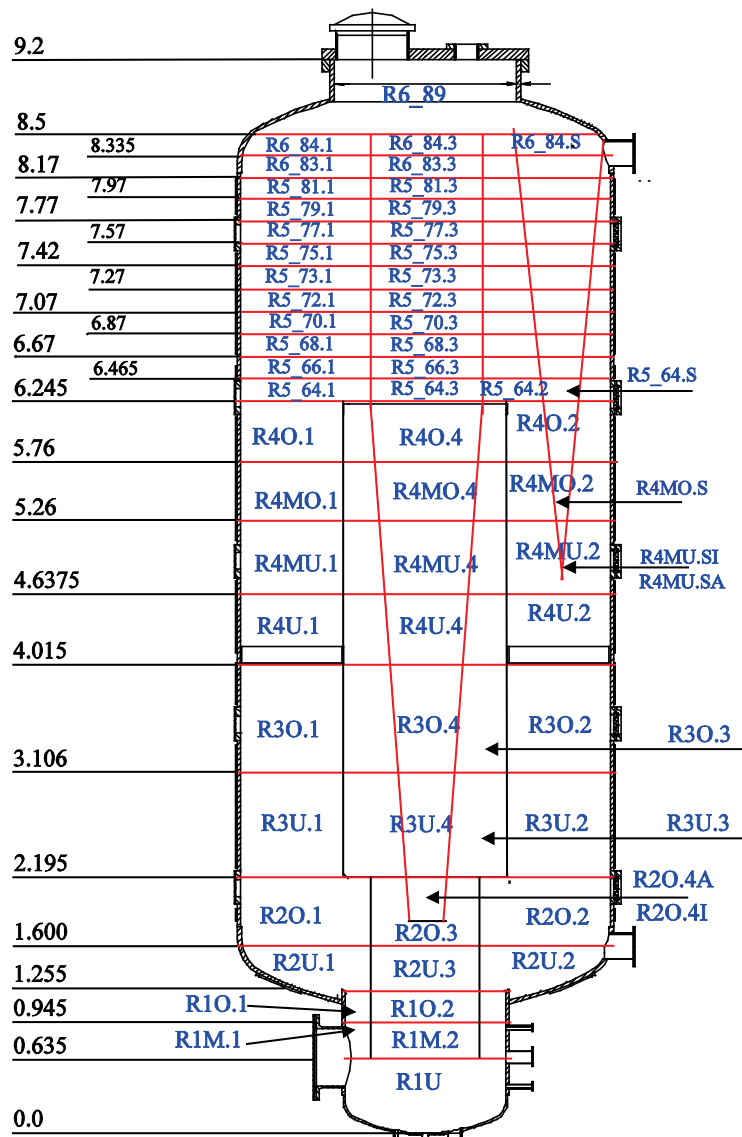


Abb. 4-13 COCOSYS Nodalisierung zum Versuch THAI HM-2

Die Zonen R4MU.SI, R4MU.SA bis R6_84S simulieren den auftriebsbehafteten Plume, der sich als Folge einer aufwärtsgerichteten Wasserstoffeinspeisung ausbildet. Desgleichen bilden die Zonen R20.4I, R20.4A bis R40.4 den von einer aufwärtsgerichteten Dampfeinspeisung erzeugten auftriebsbehafteten Plume ab. Dabei formen die "Wasserstoff-Plumezonen" einen Kegel mit einem Winkel von 20° und die "Dampf-Plumezonen" einen Kegel mit einem Winkel von 12°. Die Einspeisebereiche sind detailliert in Abb. 4-14 dargestellt. 50 % der Wasserstoff- bzw. der Dampfeinspeisung wird jeweils in die Zonen R4MU.SI bzw. R20.4I geleitet.

Die Nodalisierung mit Hilfe von Plumezonen simuliert die in Experimenten beobachtete Aufwärtsströmung und den Atmosphärenmitriss. Eine direkte Einspeisung in die Zonen R4MU.2 bzw. R2O.3 hingegen hätte eine zu starke Durchmischung in untere Anlagenbereiche zur Folge.

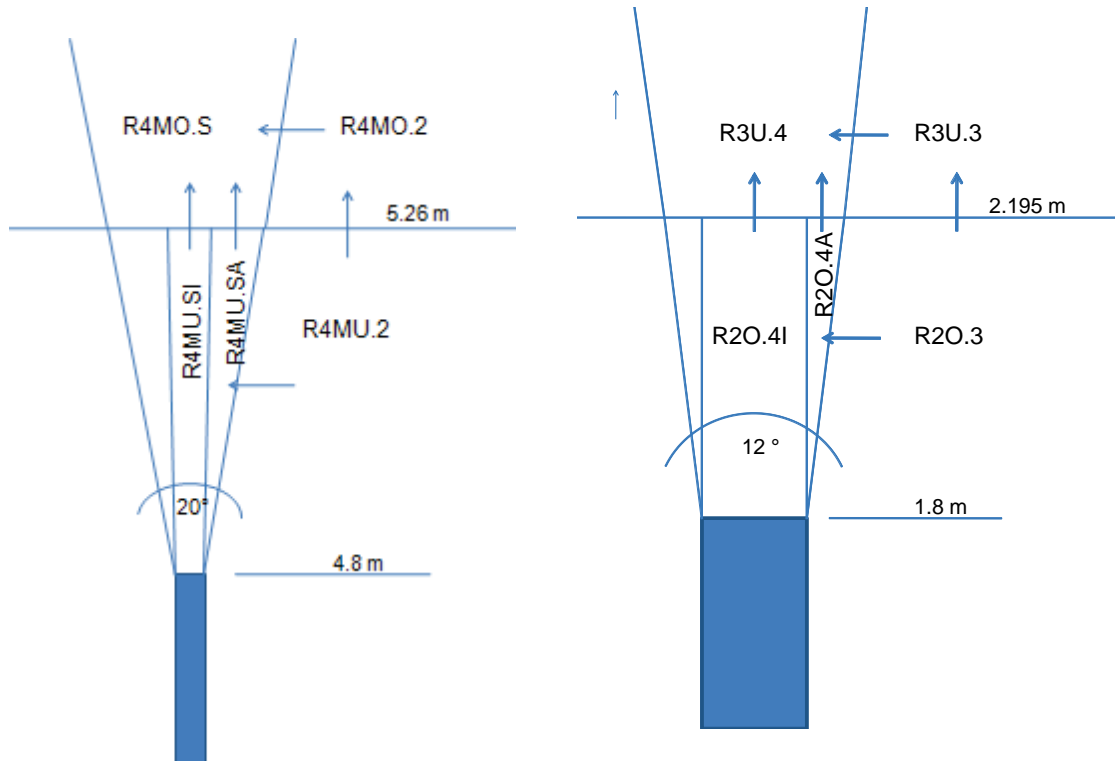


Abb. 4-14 COCOSYS Nodalisierung zum Versuch THAI HM-2, detaillierte Darstellung der Einspeisebereiche

Mit Hilfe von Plumezonen berechnet COCOSYS eine rein auftriebsbehaftete Strömung. Weitere Untersuchungen haben ergeben, dass die Abbildung impulsbehafteter Freistrahlen durch Plumezonen bezüglich der Atmosphärenströmung und der daraus resultierenden Gasverteilung in der Regel auch gute Ergebnisse liefert. Voraussetzung ist jedoch, dass die Dichte des eingespeisten Mediums kleiner als die des Bereichs ist, in den die Einspeisung erfolgt. Zusätzlich muss der Programmanwender überprüfen, ob das Strömungsmuster dem in der Natur zu erwartenden entspricht.

Ansonsten wird die Simulation von impulsbehafteten Freistrahlen mit Hilfe der im COCOSYS-Manual beschriebenen analytischen Methode empfohlen. Sie wurde erfolgreich in blinden Rechnungen zu den THAI-Versuchen TH7, TH10 und TH13 angewandt, in denen der Strahl senkrecht nach oben gerichtet war. Mit dieser Methode können aber auch nach unten oder horizontal gerichtete Strahlen berechnet werden.

Empfehlungen für die Simulation des Aufbaus einer Schichtung

Oberhalb der Einspeiseposition von Dampf oder Leichtgas ist die Atmosphäre meist homogen durchmischt. Somit kann die Nodalisierung hier einfach sein. Dies trifft aber nicht auf kurzzeitige Einspeisungen, wie in den HYJET-Versuchen, zu.

Die Übergangsschicht zwischen leichter und schwerer Atmosphäre sollte durch zwei (mindestens) bis vier Ebenen abgebildet sein. Dies gilt für die horizontale Unterteilung einer Ebene in zwei Zonen. Mehr als zwei Zonen pro Ebene, die nicht durch Wände getrennt sind, können eine zu starke Vermischung zwischen der leichten und schweren Atmosphärenschicht zur Folge haben. Dem wäre mit einer feineren vertikalen Aufteilung entgegenzuwirken. Allerdings geben komplexe Aufteilungen in einer Ebene oft keine zusätzlichen Erkenntnisse über die thermohydraulischen Vorgänge, da sich die Zustandsgrößen auf einer Höhe meist schnell ausgleichen und die Unterschiede in horizontaler Richtung - im Vergleich zu denen in vertikaler Richtung - oft vernachlässigbar sind.

Die vertikale Ausdehnung der Übergangsschicht betrug in der THAI-Anlage, die einen Innendurchmesser von 3,2 m hat, in der Regel etwa 1 m. Bei dem HDR-Versuch E11.2 lag die Übergangsschicht im Dom (Innendurchmesser 20 m) zwischen zwei Messebenen, deren vertikaler Abstand 12 m betrug. Die Ausdehnung der Schicht war aber deutlich geringer.

Bei der Erstellung einer Nodalisierung sollte berücksichtigt werden, dass mit genügender Menge von eingespeistem Leichtgas die leichte Atmosphärenschicht sich auch unter die Einspeisehöhe ausdehnen kann.

Empfehlungen für die Simulation der Auflösung einer Schichtung

Eine Atmosphärenschichtung kann von einem impulsbehafteten Freistrahle aufgelöst werden, der die (obere) Leichtgasschicht durchdringt, unter Umständen selbst, wenn seine Dichte größer ist als die Dichte der Leichtgasschicht. Letzteres kann nur mit der analytischen Methode berechnet werden.

In den THAI-Versuchen wurden die Leichtgasschichtungen, die sich in den oberen Bereichen befanden, durch Einspeisung leichter Medien in die unteren mit Schwergas ge-

füllten Anlagenbereiche aufgelöst. Die für die Auflösung erforderliche Zeitspanne hängt ab von

- der Stärke der Schichtung, also dem Dichteunterschied zwischen der (oberen) Leichtgas- und der unteren Schwergasschicht,
- dem Massenstrom und der Dichte des eingespeisten leichten Mediums,
- der Form (Freistrahler, Plume oder gegen Prallplatte) und Richtung der Einspeisung.

Die "schwache" Schichtung des Versuchs TH7 löste sich z. B. sehr schnell auf. Somit waren die Ergebnisse der blinden COCOSYS-Rechnung auch mit einer weitaus gröberen Nodalisierung als der für HM-2 verwendeten (Abb. 4-13) erfolgreich.

Im Versuch HM-2 bestand die Leichtgasschicht im oberen Anlagenbereich aus einem Wasserstoff - Stickstoffgemisch. Die Schicht wurde von einer im Innenzylinder aufsteigenden Plume aufgelöst. Dieser bestand anfangs aus Dampf und Stickstoff; sein Wasserstoffgehalt erhöhte sich im Laufe des Experiments. Da die Dichte des Plumes höher als die der Leichtgasschicht war, konnte die Plume nur in den Übergangsbereich zwischen der Leicht- und "Schwergasschicht" eindringen und auf diese Weise die Schicht von unten her abgetragen, was ca. 1500 s dauerte. Dies konnte mit der in Abb. 4-13 dargestellten Nodalisierung blind nachgerechnet werden, wobei die Rechnung 2200 s für die Auflösung benötigte (Abb. 4-15). Wichtig für die Nodalisierung sind (1) die feine vertikale Aufteilung der Anlage in 20 Ebenen ab der Dampfeinspeisestelle mit einer besonderen Detaillierung im oberen Plenum (oberhalb 6,245 m) sowie (2) die Modellierung des Plumes im Innenzylinder und dessen Fortführung im oberen Plenum.

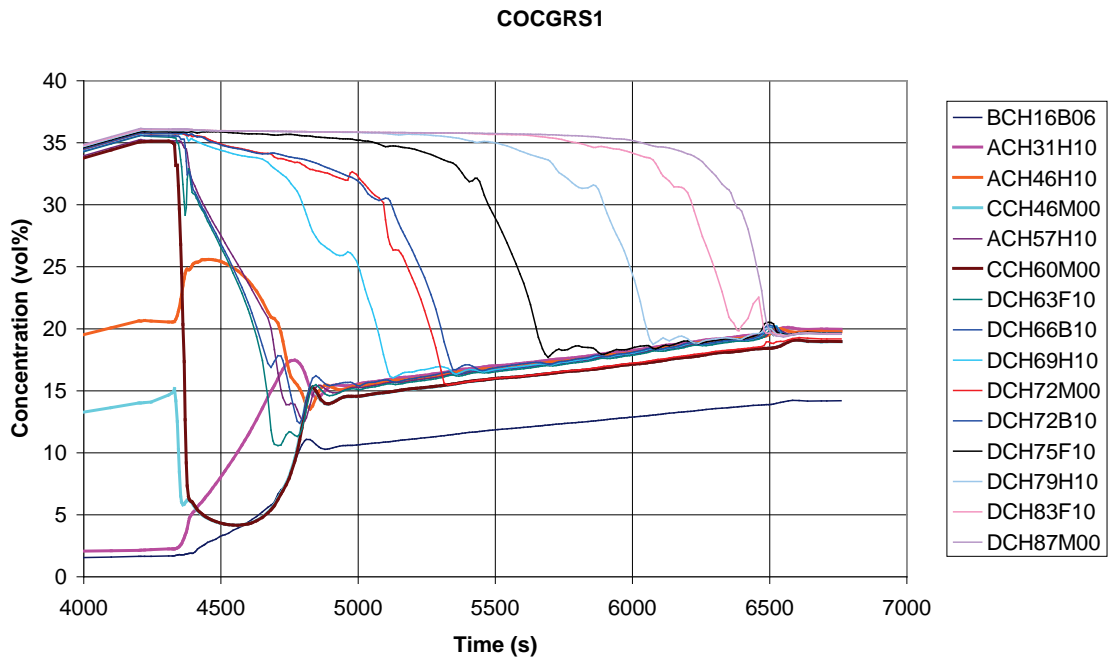


Abb. 4-15 Ergebnisse der blinden COCOSYS-Rechnung zu THAI HM-2, Auflösung der Leichtgasschichtung, ersichtlich am Verlauf der Wasserstoffkonzentrationen

Im THAI-Versuch TH2 wurde eine Leichtgasschicht bestehend aus Luft und Dampf innerhalb von etwa neun Stunden aufgelöst. Dabei wurde zunächst Dampf durch Beheizen des Sumpfes erzeugt. Dann wurde zusätzlich Dampf in den Sumpfraum gespeist, wobei die Einspeiserate stufenweise erhöht wurde. Der Versuch wurde mit COCOSYS ein Jahr vor Inbetriebnahme der THAI-Anlage gut vorausgerechnet. Die Nodalisierung umfasste 10 vertikale Ebenen. Es wurden keine speziellen Plumezonen verwendet, da die Dampfeinspeisung gegen eine Prallplatte erfolgte.

Die Empfehlungen für die Simulation der Auflösung einer Schichtung durch eine Leichtgaseinspeisung lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Erforderlich ist eine feine vertikale Aufteilung der Anlage in 10 (mindestens) bis 20 Ebenen oberhalb der Einspeiseposition des Leichtgases.
- Die Anzahl der Zonen pro Ebene sollte möglichst klein sein, siehe "Empfehlungen für die Simulation des Aufbaus einer Schichtung".
- Einspeisungen sollten entsprechend den "Empfehlungen für die Simulation von Gas- und Dampfeinspeisungen" modelliert werden.

4.1.2.2 Optimierung des Diffusionsansatzes in den Verbindungsgleichungen

Bei Rechnungen mit COCOSYS zum Versuch THAI-TH10 mit einer Helium-Schichtung wurde festgestellt, dass die in COCOSYS-THY implementierte Gleichung zur Simulation der Diffusion zu zusätzlichen Ausgleichsströmungen führte und damit die im Experiment beobachtete Schichtung nicht simuliert wurde. Durch das Ausschalten des Diffusionsstroms konnte die Schichtung dagegen simuliert werden. Auf der anderen Seite hat sich gezeigt, dass Rechnungen mit Berücksichtigung der Diffusion für den PANDA-Test 9 zu besseren Ergebnissen führte. Daraus ergab sich die Notwendigkeit, den in COCOSYS implementierten Ansatz zu optimieren.

Beschreibung des neuen Modells

In COCOSYS werden die Massenströme aufgrund der Impulsgleichung und aufgrund der Diffusion unabhängig berechnet. Somit können beide Beiträge in entgegen gesetzter Richtung auftreten. In Wirklichkeit ist aber die Diffusionsströmung mit der Strömung des Hintergrundfluids gekoppelt. Daher wird in dem modifizierten Ansatz nun die Diffusion nur noch dann berücksichtigt, wenn die Strömung des Hintergrundfluids entsprechend klein ist.

Die Diffusionsströmung G_i der Gaskomponente i durch eine Verbindung berechnet sich durch

$$G_i = \frac{D_i A}{R_i T} \cdot \frac{(p_{i_{\text{beg}}} - p_{i_{\text{end}}})}{l} \quad (4-1)$$

mit

D_i	Diffusionskonstante D [m^2/s] (durch Anwender vorgegeben)
A	Strömungsfläche A [m^2] der Verbindung
R_i	Gaskonstante der Komponente i
T	Temperatur T [K] der Quellzone
$p_{i_{\text{beg}}} - p_{i_{\text{end}}}$	Partialdruckdifferenz [Pa] über der Verbindung
l	Länge l [m] der Verbindung

Die Gleichung (4-1) wurde bereits in den bisherigen COCOSYS-Versionen verwendet.

Für die Kopplung beider Strömungen wird nun die Diffusionsgeschwindigkeit betrachtet. Ausgehend vom Fickschen Gesetz für die Teilchenstromdichte $J \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^2 \text{s}} \right]$:

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4-2)$$

mit der Diffusionskonstanten D und der Teilchenkonzentration c [kmol/m^3], erhält man die Diffusionsgeschwindigkeit, indem man die Gleichung (4-2) durch c dividiert. Weiterhin wird der Konzentrationsgradient durch $\Delta c/l$ approximiert.

$$v_{\text{diff}} = -\frac{D}{c} \cdot \frac{\Delta c}{l} \quad (4-3)$$

Mit Hilfe des idealen Gasgesetzes lässt sich c durch p/RT ausdrücken und es ergibt sich die resultierende Gleichung

$$v_{\text{diff}} = -\frac{D}{l} \cdot \frac{\Delta p}{p} \quad (4-4)$$

Die Diffusion wird nur dann berücksichtigt, wenn die Diffusionsgeschwindigkeit kleiner ist als die Strömungsgeschwindigkeit v_{mom} des Hintergrundfluids aufgrund der Impulsbilanz. Daraus ergibt sich ein Faktor f

$$f = \max\left(0, \frac{v_{\text{diff}} - |v_{\text{mom}}|}{v_{\text{diff}}}\right) \quad (4-5)$$

Der resultierende Diffusionsmassenstrom ist dann $f \cdot G_i$.

Überprüfung anhand von THAI-TH10

Der THAI-Versuch TH10 wurde mit dem Ziel durchgeführt, unter gut bekannten Randbedingungen die bei beim HDR - E11.2 Versuch aufgetretenen Vorgänge besser verstehen zu können. Die Fahrweise war ähnlich wie bei E11.2 und es wurden ähnliche Atmosphärenzustände hergestellt und untersucht.

Der Versuch TH10 sowie die von der GRS durchgeführten COCOSYS-Rechnungen sind ausführlich in /ALL 07/ beschrieben. Hier wird eine Kurzdarstellung gegeben, wobei der Schwerpunkt auf der Heliumschichtung liegt.

Tab. 4-1 Fahrweise THAI TH10

Phase	Zeitbereich	Einspeisung
1	0– 3,58h	35 g/s Dampf, nach oben gerichteter Freistrahler bei 5 m Höhe im Ringraum, bei 2,28 h Druckregelung der Einspeisung auf 1,8 bar
2	3,58– 4,32h	4 g/s Dampf und insgesamt 1,03 kg Helium, nach oben gerichteter Freistrahler bei 5 m Höhe im Ringraum
3	4,32- 6,42h	5,1 g/s Dampf, bei 1 m Höhe in Behältermitte gegen eine horizontale Prallplatte
4	6,5- 14h	Kühlen des oberen Kühlmantels (6,67 bis 8,17 m Höhe). Die Kühlleistung startet mit 12 KW und nimmt mit sinkenden Behältertemperaturen ab. Bei 12,3 h wird sie auf das zu diesem Zeitpunkt mögliche Maximum von 7,6 KW erhöht.

Das in 5 m Höhe eingespeiste Helium verblieb während des gesamten Versuchs hauptsächlich in der oberen Behälterhälfte (Abb. 4-16).

Aus einer blinden Nachrechnung zu TH10 ging hervor, dass das Rechenprogramm die Gasdiffusion stark überschätzte, deshalb wurde diese in einer offenen Nachrechnung ausgeschaltet, was die Simulation wesentlich verbesserte /ALL 07/. Hier werden die Ergebnisse mit dem nunmehr verbesserten Diffusionsmodell in COCOSYS gezeigt. Die COCOSYS-Nodalisierung zu TH10 unterteilt den Behälter in 41 Zonen, die 15 Ebenen bilden (s. Abb. 4-16).

Die COCOSYS-Rechnung mit dem verbesserten Diffusionsmodell gibt den Verlauf der experimentellen Helium-Konzentrationen und Schichtung in zufrieden stellender Weise wieder, vgl. Abb. 4-17 und Abb. 4-18. Abweichungen zum Experiment sind jedoch im oberen Behälterbereich festzustellen, wo der ab 7 h einsetzende (von der Kühlung verursachte) Anstieg der Heliumkonzentrationen nur unzureichend erfasst wird. Im unteren Behälterbereich wird die Konzentration leicht überschätzt (Abb. 4-19).

Eine geringfügig bessere Simulation der Helium-Schichtung als mit dem neuen Diffusionsmodell wird durch ein Abschalten der Diffusion, wie in der offenen Nachrechnung zu TH10, erreicht (Abb. 4-19).

Die Verwendung des alten Diffusionsmodells hingegen führte zu größeren Abweichungen von den Messwerten (Abb. 4-19 bis Abb. 4-21).

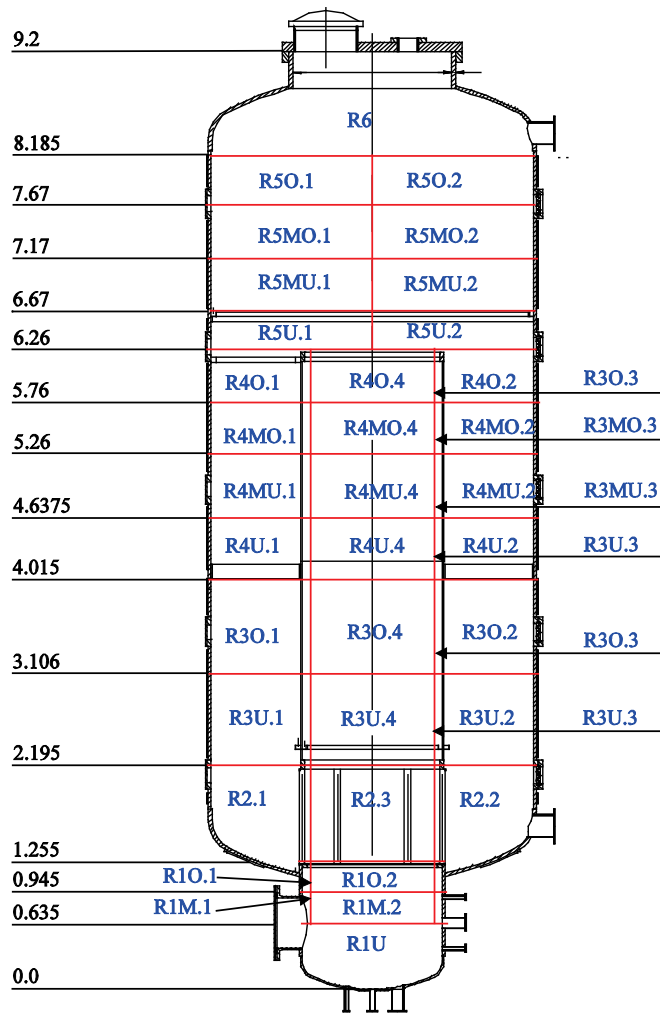


Abb. 4-16 COCOSYS-Nodalisierung zu THAI TH10

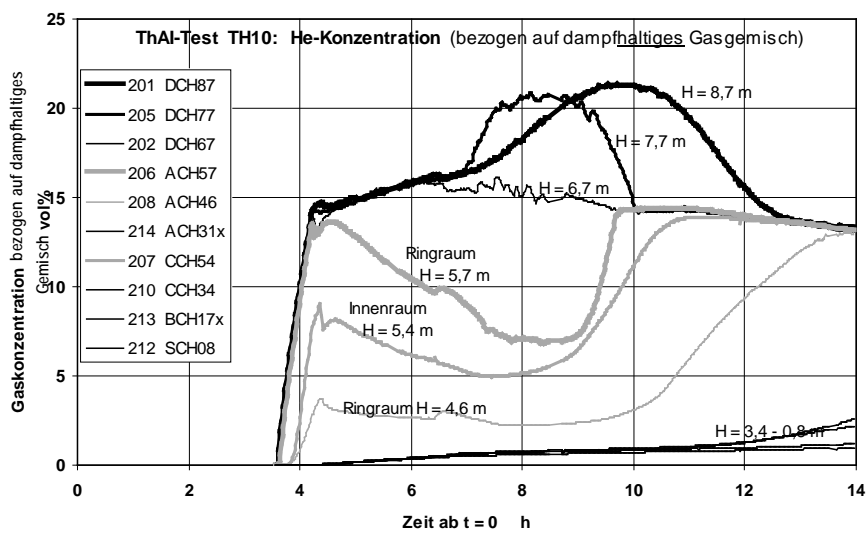


Abb. 4-17 THAI TH10 Experiment, Heliumkonzentrationsverläufe

ThAI 1=TH10_md3, 2=TH10_N7_oKM-FAN5-oD 3=TH10_N7_oKM-FAN4

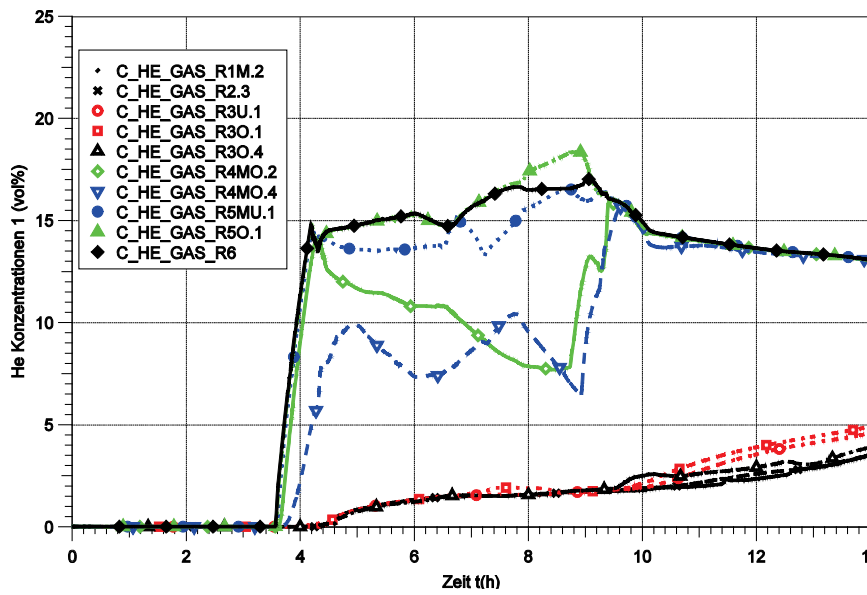


Abb. 4-18 THAI TH10 Heliumkonzentrationen, COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell

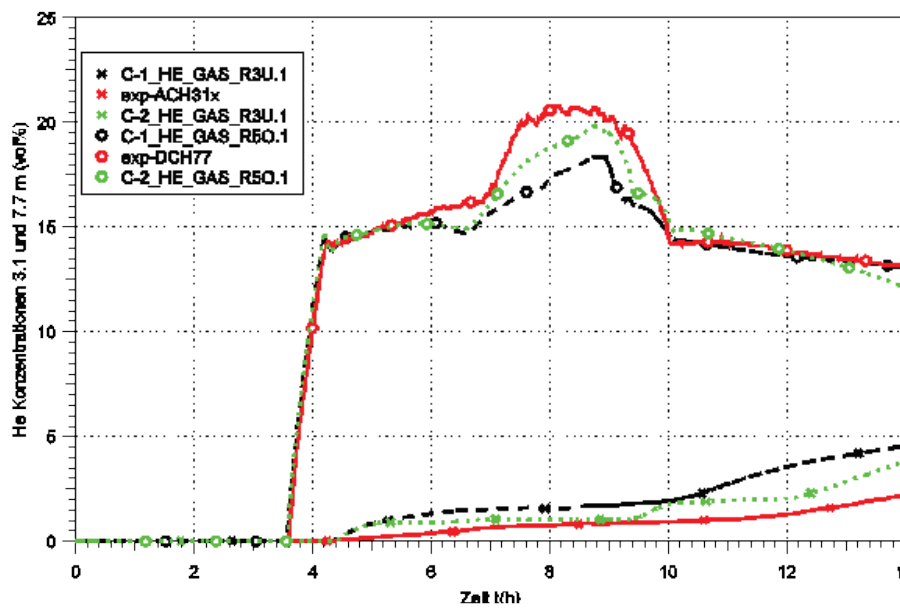


Abb. 4-19 THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 3,1 und 7,7 m, Experiment und COCOSYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion

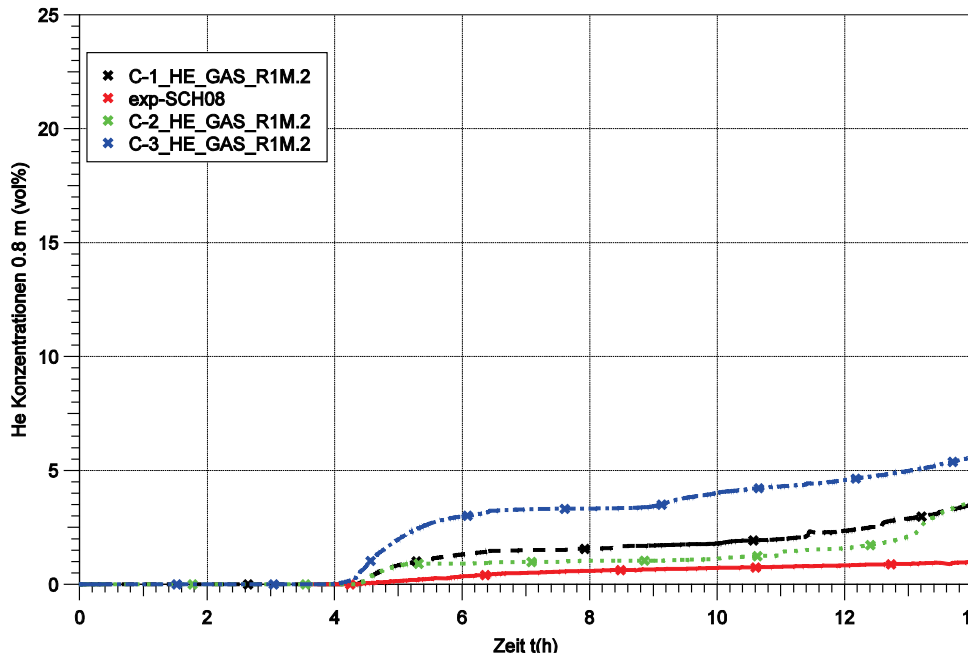


Abb. 4-20 THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 3,1 m, Experiment und COCO-SYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion, (3) mit altem Modell

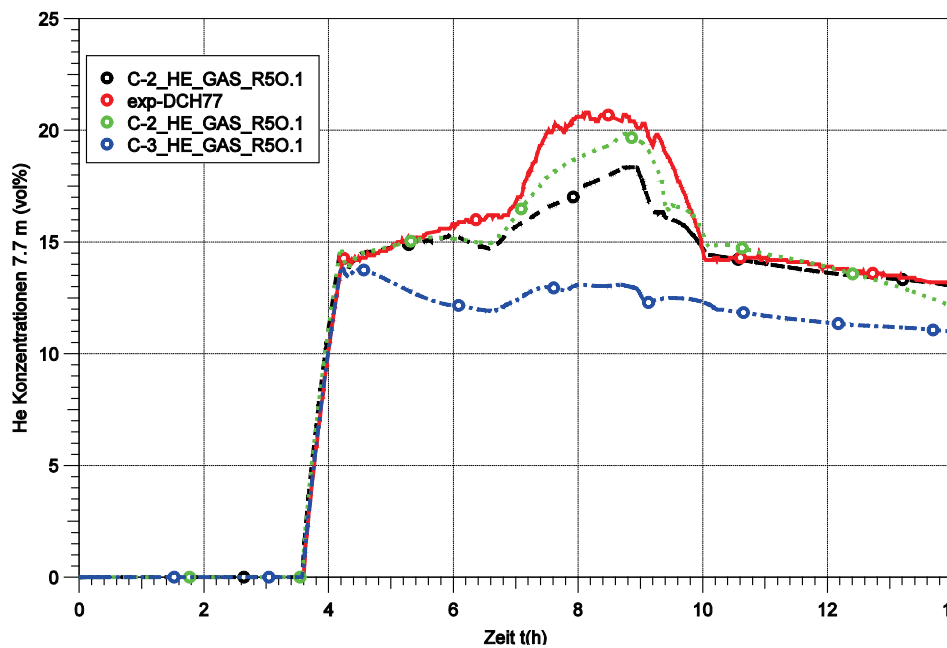


Abb. 4-21 THAI TH10 Heliumkonzentrationen, bei 7,7 m, Experiment und COCO-SYS-Rechnungen (1) mit verbessertem Diffusionsmodell, (2) ohne Diffusion, (3) mit altem Modell

Überprüfung anhand von Panda SETH Test 9

Die SETH-Tests werden in der PANDA-Versuchsanlage des Paul Scherrer Instituts in der Schweiz durchgeführt /ADR 04/. Die Testkonfiguration besteht aus zwei Behältern (Drywells: DW1 und DW2), die jeweils eine Höhe von 8 m und einen Innendurchmesser von 4 m haben. In 3 m Höhe sind sie mit einem 5.2 m langen Rohr, das einen Innendurchmesser von 0.93 m hat, verbunden (Abb. 4-22).

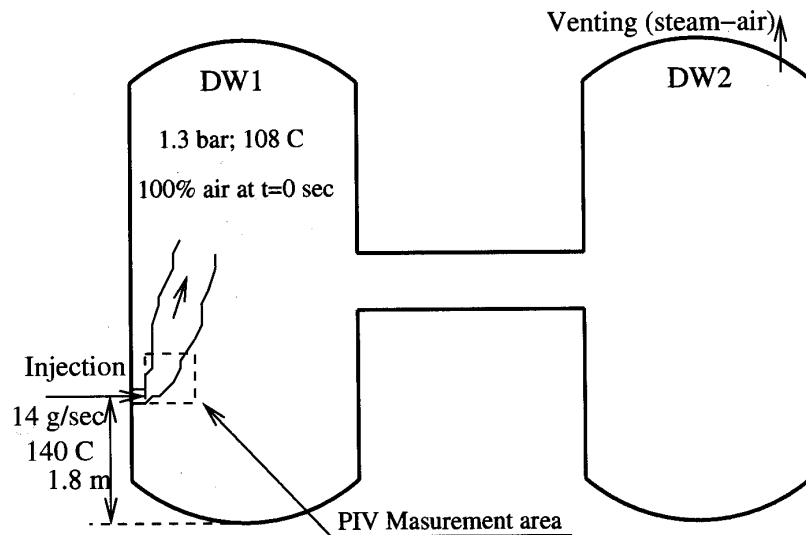


Abb. 4-22 Panda SETH T9, Anfangs- und Randbedingungen

Zur Validierung des COCOSYS Diffusionsmodells eignet sich der Test T9 /AUB 05/. Die Versuchsbehälter waren zu Beginn des Versuchs mit Luft von 1,3 bar gefüllt. Die Wandtemperaturen betragen etwa 108 °C. Damit wurde erreicht, dass sie trotz geringfügiger Abkühlung aufgrund von Wärmeverlusten während des gesamten Versuchs höher als die Sättigungstemperatur der Atmosphäre blieben. Eine Wandkondensation des eingespeisten Dampfes trat also nicht ein.

Durch ein Rohr mit 0,15 m Innendurchmesser wurde 14 g/s Dampf mit einer Temperatur von 140 °C in DW1 eingespeist. Der Dampf stieg plumeförmig nach oben. Atmosphäre strömte über das Verbindungsrohr nach DW2. Der Druck wurde mittels eines Regulierventils am Deckel von DW2 konstant auf 1,3 bar gehalten.

Die Behälter DW1 und DW2 und das Verbindungsrohr werden mit 51 Zonen simuliert, die 10 Ebenen bilden. Die Zonen sind mit Strömungspfaden verbunden, deren Flächen sich aus der Geometrie berechnen.

In DW1 steigt aufgrund der Dampfeinspeisung ein Plume auf. Die aus dem Verbindungsrohr in DW2 eintretende Atmosphäre steigt ebenfalls plumeförmig nach oben. Diese Plumes werden wie im THAI ISP47 Experiment entsprechend /KLE 08/ mit COCOSYS-Zonen simuliert. Sie bilden einen Kegel mit einem Winkel von 20° und sind untereinander mit vertikalen Strömungspfaden verbunden. Mit den Zonen, die die Behälteratmosphäre repräsentieren, sind sie durch horizontale Pfade verbunden. Die Strömungsflächen der Pfade errechnen sich aus der Kegelgeometrie, wobei für die Flächen der horizontalen Pfade unter der Annahme, dass der Plume wandnah verläuft, die halbe Kegelmantelfläche angesetzt ist.

Die Namen der Zonen, die DW1 bilden fangen mit "A" an. "B" steht für DW2 und "C" für das Verbindungsrohr. Zum Beispiel befindet sich die Zone A498R in der "rechten" Hälfte von DW1 und ihr Mittelpunkt liegt auf 4,98 m. B589P ist eine Plumezone in DW2 mit dem Mittelpunkt bei 5,89 m. Die Stahlwände und die Isolierung werden durch "Heatslabs" simuliert, die Energie mit der Behälteratmosphäre und der Umgebung austauschen können.

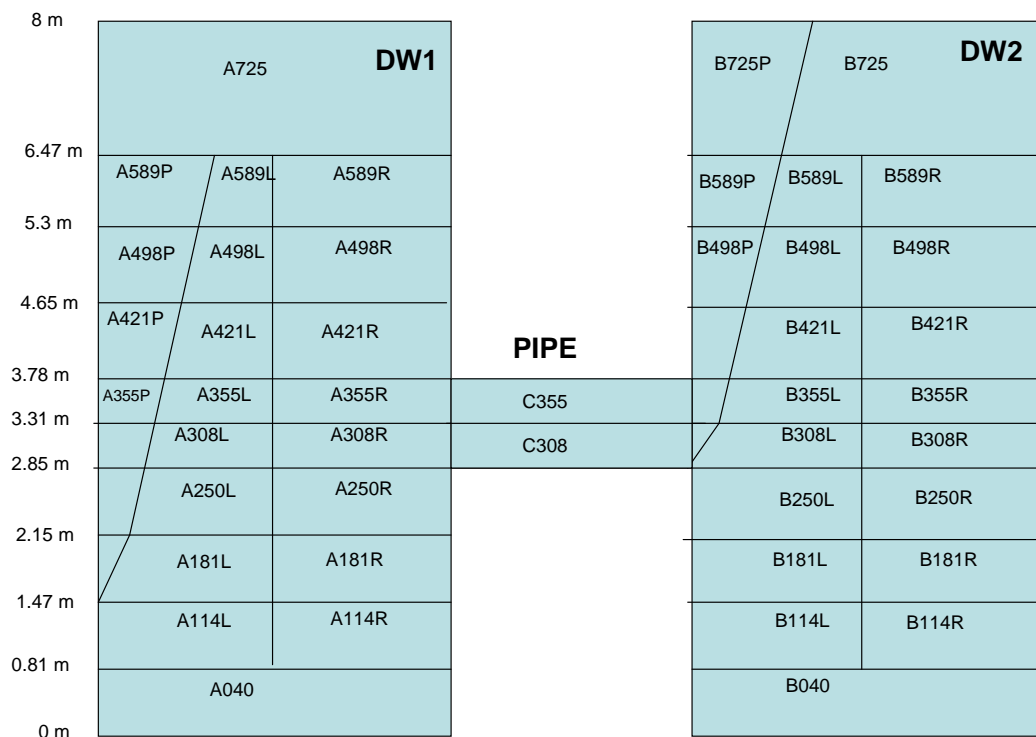


Abb. 4-23 Panda SETH T9 COCOSYS-Nodalisierung Längsschnitt

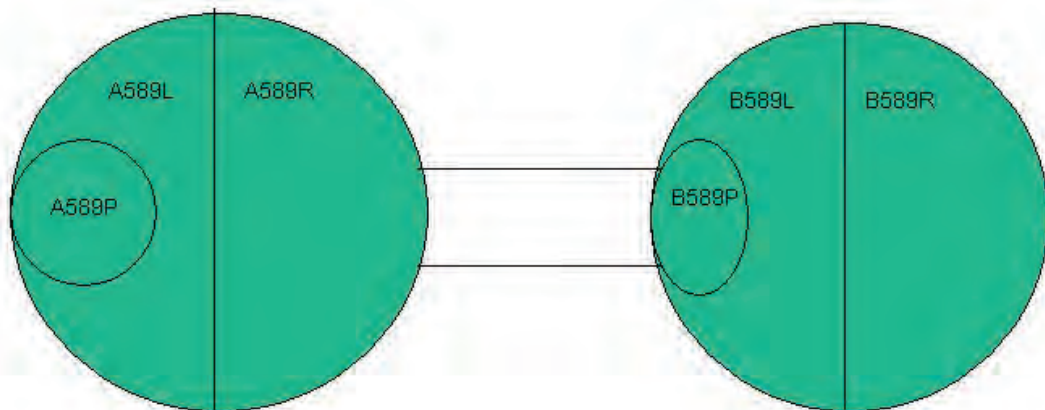


Abb. 4-24 Panda SETH T9 COCOSYS-Nodalisierung Querschnitt bei 6.47 m

Es werden die Ergebnisse der Rechnungen:

1. mit dem verbesserten Diffusionsmodell,
2. mit dem alten Diffusionsmodell,
3. mit abgeschalteter Diffusion gezeigt.

Alle Rechnungen beschreiben gleichermaßen gut den Anstieg der Dampfkonzentrationen in den oberen Behälterbereichen. Dies gilt für:

- DW1 ab der Höhe der Dampfeinspeisestelle (Abb. 4-25, Abb. 4-27 und Abb. 4-29)
- DW2 ab der Höhe des Verbindungsrohres (Abb. 4-26 und Abb. 4-28).

In diesen Behälterbereichen erzeugen die aufsteigenden Plumes eine Naturkonvektion, welche die Atmosphäre durchmischt. In den darunter liegenden Behälterbereichen stagniert die Atmosphäre weitgehend, hier spielt die Gasdiffusion eine Rolle. Zur Validierung des Diffusionsmodells eignet sich insbesondere DW2, da der aus dem Verbindungsrohr austretende Plume eine kleine Geschwindigkeit hat und somit nur geringe Turbulenzen erzeugt. Desweiteren kondensiert der Dampf nicht an den Wänden. Sowohl die Rechnung mit dem verbesserten als auch die mit dem alten Diffusionsmodell liefern für DW2 eine gute Beschreibung des Anstiegs der Dampfkonzentrationen bei 2,38 und 1,076 m (Abb. 4-26 und Abb. 4-28).

In DW1 erzeugt der mit einer Geschwindigkeit von 1 m/s eintretende Dampf im Experiment kleine Turbulenzen, die ebenfalls zu einem Dampftransport in die unteren Be-

hälterregionen beitragen. Die Größe dieses Beitrags wurde nicht ermittelt und wird auch nicht von COCOSYS erfasst. Die gemessenen Dampfkonzentrationen werden für DW1 von der Rechnung mit dem verbesserten Diffusionsmodell unterschätzt, während sie von der Rechnung mit dem alten Modell gut wiedergegeben werden (Abb. 4-25 und Abb. 4-27). Wird die Diffusion jedoch abgeschaltet, so gelangt fast kein Dampf in die unteren Behälterbereiche, was mit der Messung nicht übereinstimmt (Abb. 4-29).

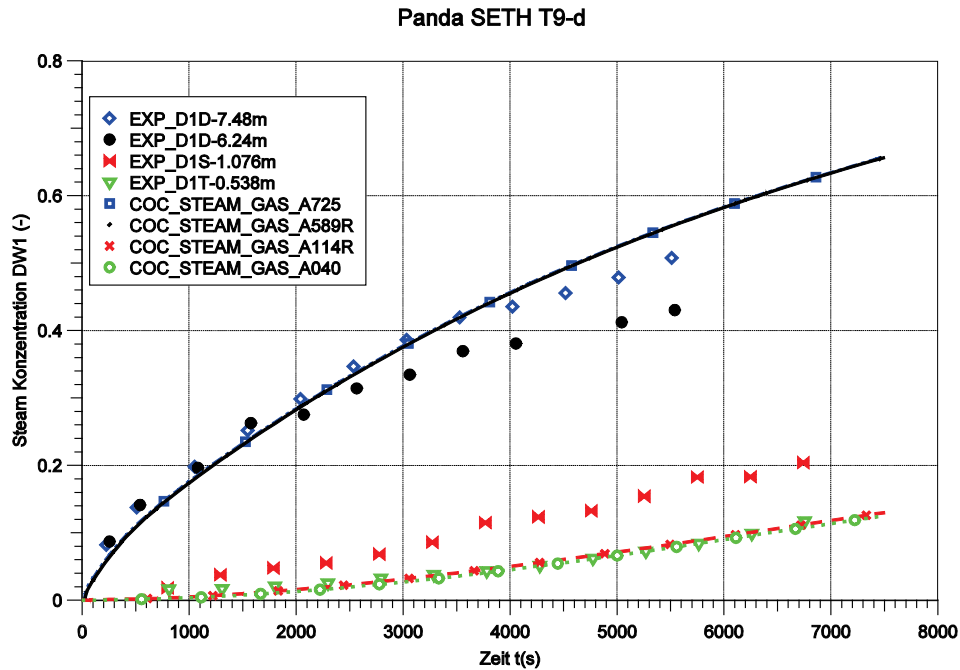


Abb. 4-25 Experiment und COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1

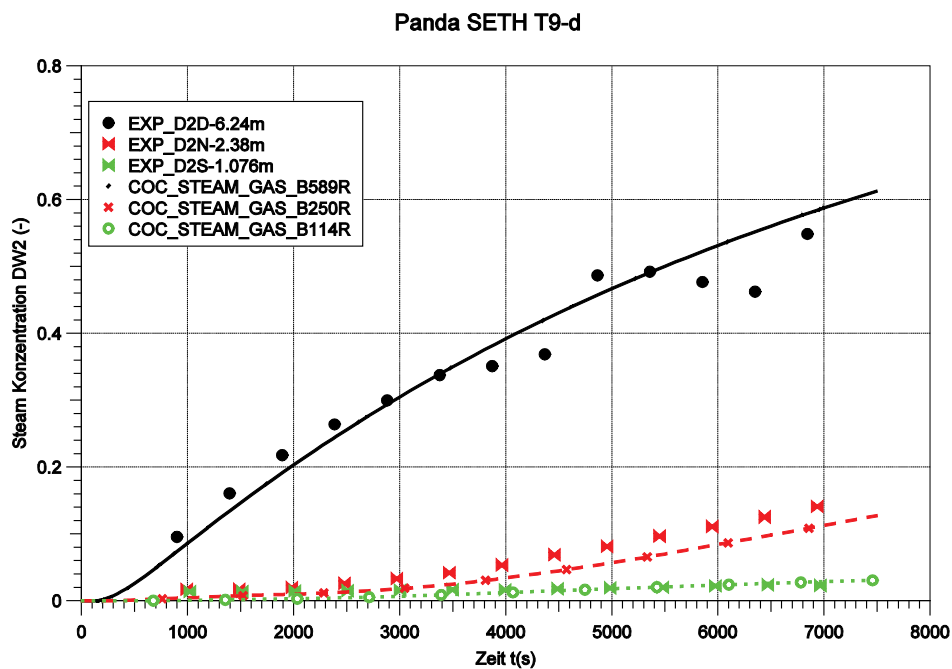


Abb. 4-26 Experiment und COCOSYS-Rechnung mit verbessertem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW2

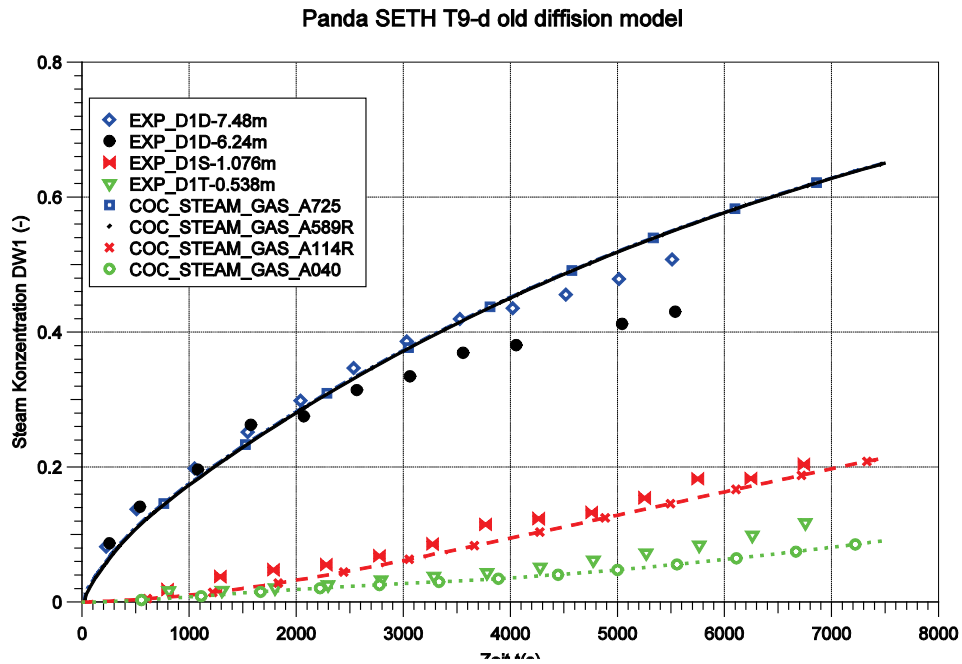


Abb. 4-27 Experiment und COCOSYS-Rechnung mit altem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1

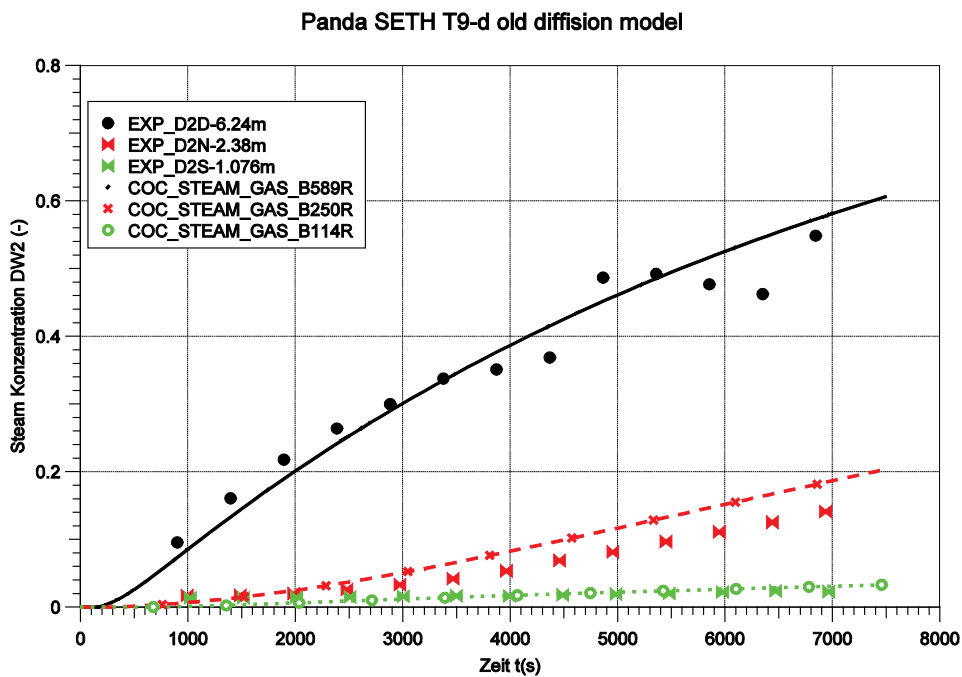


Abb. 4-28 Experiment und COCOSYS-Rechnung mit altem Diffusionsmodell, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW2

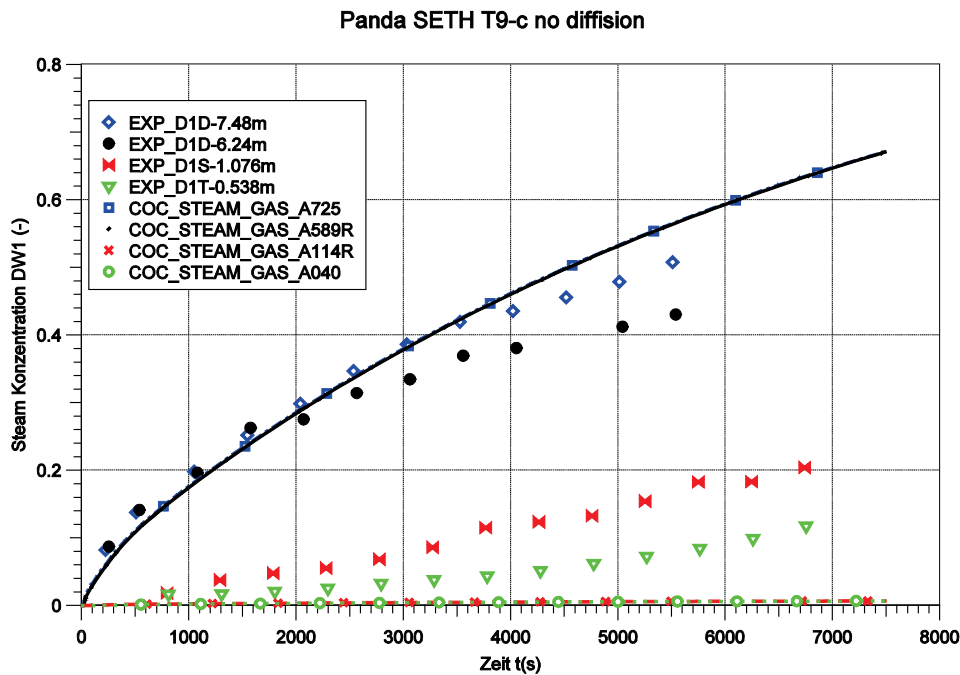


Abb. 4-29 Experiment und COCOSYS-Rechnung mit abgeschalteter Diffusion, Anstieg der Dampfkonzentrationen in DW1

Zusammenfassung

Die Eignung des verbesserten Diffusionsmodells wurde anhand der Experimente THAI TH10 und Panda SETH Test 9 gezeigt. Das Modell sollte standardmäßig in COCOSYS verwendet werden.

4.1.3 Filmverdampfungsmodell

Im THAI-Experiment TH9 wurde mit dem oberen Kühlmantel, dessen Oberfläche etwa ein Zehntel der gesamten Behälterwand bildet, Dampf kondensiert, d. h. die Atmosphäre wurde getrocknet. Dabei verdampfte der auf den anderen Wandteilen befindliche Wasserfilm. Die sich einstellende Atmosphärenfeuchte konnte mit COCOSYS mit Hilfe eines aufwändigen Restarts, in denen diese Wandstrukturen künstlich als "Bottom"-Strukturen zur Rückverdampfung eines Wasserfilms definiert wurden, blind vorausgerechnet werden. Zur Vervollständigung der Modellierung sollte ein Filmverdampfungsmodell eingebaut werden, mit dem dieser Vorgang auch ohne Restart gerechnet werden kann.

4.1.3.1 Beschreibung des Modells

Im Fall einer Wärmeabgabe von nassen Strukturen wird der darauf befindliche Wasserfilm wieder verdampft und führt so zu einer höheren Feuchte in der Atmosphäre. In COCOSYS ist es nun möglich, diesen Effekt zu berücksichtigen. Das entsprechende Modell besteht aus zwei Teilen. In einem ersten Teil wird die aktuelle Filmdicke an einer Wand mittels Integration der Wandkondensationsrate G bestimmt. Die maximale Filmdicke δ ist dabei auf $\delta_{\max} = 0.1$ mm (Eingabewert) begrenzt. Die verwendeten Gleichungen lauten:

$$\frac{d\delta}{dt} = f \frac{10^{-3} G_{\text{source}}}{A} \quad (4-6)$$

$$f = \begin{cases} \max \left(1 - \frac{\delta - \frac{1}{2} \delta_{\max}}{\frac{1}{2} \delta_{\max}}, 1 \right) & \delta > \frac{1}{2} \delta_{\max} \\ 1 & \delta \leq \frac{1}{2} \delta_{\max} \end{cases} \quad (4-7)$$

Der Verdampfungsprozess wurde in den Routinen für die Kondensationsmodelle (COD und CDW) implementiert. Hierbei wird die übliche Stefan-Gleichung verwendet.

$$G_{\text{tot}} = \frac{\beta p}{R_D T (1 - n_o)} \ln \frac{p - p_{DS}(T_f)}{p - p_D} \quad (4-8)$$

Da der Wasserfilm sowohl energetisch als auch massenmäßig nicht separat bilanziert wird, wird das zur Rückverdampfung benötigte Wasser aus dem Sumpf der angrenzenden Zone genommen. Aus Stabilitätsgründen wird dabei die Rate bei geringen Wassermassen im Sumpf bzw. im Film reduziert. Die maximale Verdampfungsrate ist gegeben durch

$$G_{\text{max}} = \min(100 \cdot \delta \cdot f_{\text{red}} A, 0.1 \cdot M_{\text{sump}}) \quad (4-9)$$

$$10^{-5} \leq f_{\text{red}} = \frac{\delta}{\delta_{\text{red}}} < 1 \quad (4-10)$$

4.1.3.2 Untersuchungen anhand von THAI-Versuch TH9

Das Filmverdampfungsmodell wurde anhand des THAI-Versuchs TH9 geprüft. Der Versuch TH9 ist ein thermohydraulischer Basisversuch zur Validierung der Verdampfung von Sumpfwasser und Wasserfilmen an Strukturen. Die Behälteratmosphäre war homogen durchmischt. Die gewünschten thermohydraulischen Zustände wurden durch Dampf- und Heliumeinspeisung sowie durch Kühlen mittels des oberen Heiz-/Kühlmantels hergestellt. Die standardmäßigen Einbauten, also Innenzylinder und Kondensatwannen, waren vorhanden. Die Dampf- und die Heliumeinspeisung erfolgten gegen eine Prallplatte im Sumpfraum in 1 m Höhe.

Kondensatableitung

Ein Schema der Kondensatströme ist in (Abb. 4-30) dargestellt.

- Das in der oberen Kondensatrinne (Höhe 6,6 m) aufgefangene Wasser wurde durch zwei voneinander unabhängige Röhrchen in die Nähe der Behälterachse geführt, so dass es ohne Wandberührung durch den Innenzylinder in den Sumpf fiel.
- Aus den Kondensatrinnen des Innenzylinders (Höhe 2,2 m) wurde das Wasser mittels Röhrchen zum Sumpf geleitet.
- Aus den 4 Kondensatwannen wurde das Wasser jeweils mittels eines 5 cm langen Röhrchens mit einem Innendurchmesser von 9 mm auf den unteren Klörperboden (Höhe 1,2 m) geleitet.

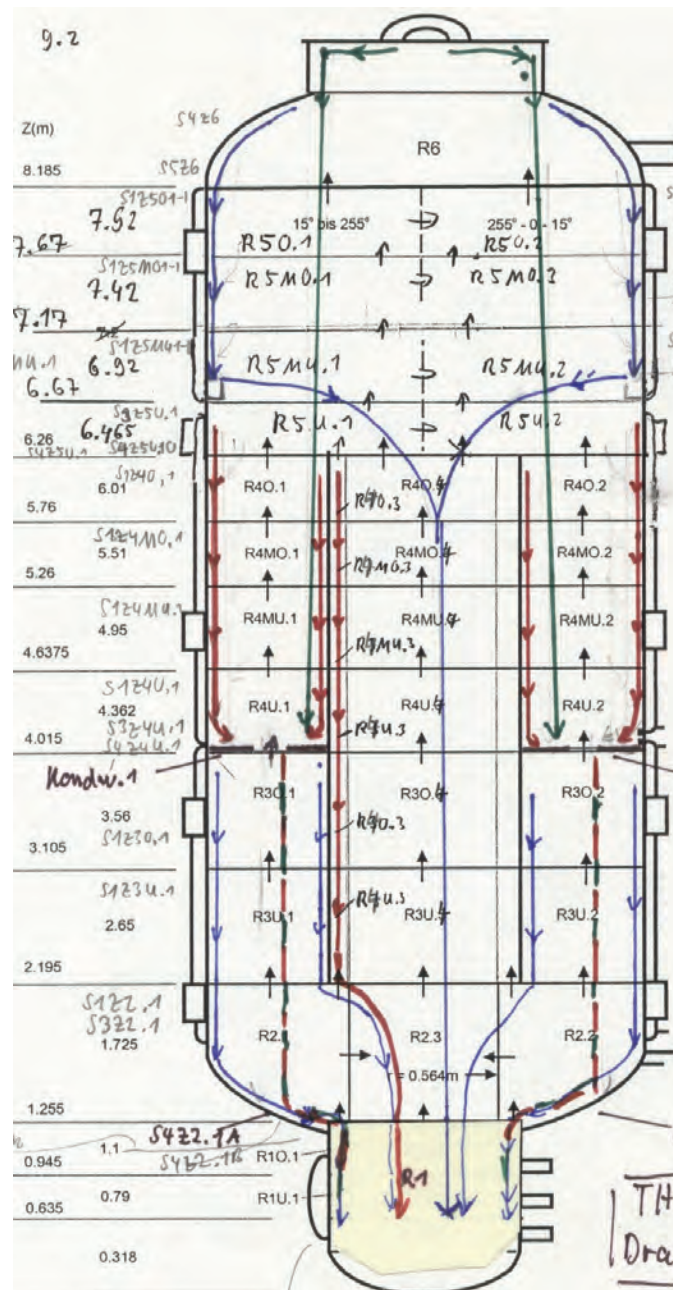


Abb. 4-30 THAI - TH9, COCOSYS-Nodalisierung und Kondensatstropfpfade

Fahrweise

Die Fahrweise wird anhand der Abb. 4-31 bis Abb. 4-34 erläutert, die die Dampfeinspeiserate, die Kühlleistung des oberen Heiz-/Kühlmantels und die Verläufe von Atmosphärendruck und Atmosphärentemperatur zeigen. Die Bilder enthalten neben den experimentellen Daten auch die Ergebnisse von drei COCOSYS-Rechnungen. Die Versuchsdauer betrug zwei Tage.

1. Tag

Zu Beginn befand sich der Versuchsbehälter auf Umgebungsbedingungen mit einem Druck von 1 bar und einer Temperatur von etwa 21 °C.

Zuerst wurde der Behälter mittels einer Dampfeinspeisung aufgeheizt. Die Atmosphärentemperatur stieg auf 100 °C und der Druck auf 2,26 bar. Anschließend wurde der Druck durch Regelung der Dampfeinspeisung konstant gehalten, was ein Absinken der Dampfeinspeiserate zur Folge hatte. Bei 5,55 h wurde die Kühlung des oberen Heiz-/Kühlmantels zugeschaltet. Dies bewirkte ein Ansteigen der Dampfeinspeisung. Bei 6,5 h wurde die Dampfeinspeisung ausgeschaltet. Die Kühlung wurde fortgesetzt, wodurch Druck und Behältertemperatur absanken. Die Kühlleistung nahm mit sinkender Temperatur ab. Dabei führte der Experimentator gelegentliche Korrekturen durch, um die für den Versuch spezifizierte Leistung anzunähern.

Bei 11 h wurde die Kühlung abgeschaltet und der Behälter kühlte sich über Nacht aufgrund der Wärmeverluste langsam weiter ab.

2. Tag

Bei 23,5 h Versuchszeit wurde der Sumpfwasserstand durch Zugabe von Kaltwasser angehoben und die Wassertemperatur anschließend durch elektrische Beheizung erhöht. Ab 24 h wurde der Behälter wieder mittels der Dampfeinspeisung aufgeheizt und der Druck anschließend auf 2,26 bar geregelt. Bei 26 h wurde der obere Kühlmantel in Betrieb gesetzt. Bei 27,13 h wurde Helium eingespeist, was einen Druckanstieg bis 2,7 bar zur Folge hat. Dabei wurde die Dampfeinspeisung mit der aktuellen Rate ungeregelt weiter fortgesetzt. Bei 30,15 h wurde die Dampfeinspeisung abgeschaltet. Die Kühlung wurde fortgesetzt und die Kühlleistung sank mit abnehmender Behältertemperatur. Bei 34,5 h wurde die Kühlung abgeschaltet.

Bei 34,5 h wurde die Dampfeinspeisung nochmals gestartet. Dies ist in den hier gezeigten COCOSYS-Rechnungen nicht simuliert.

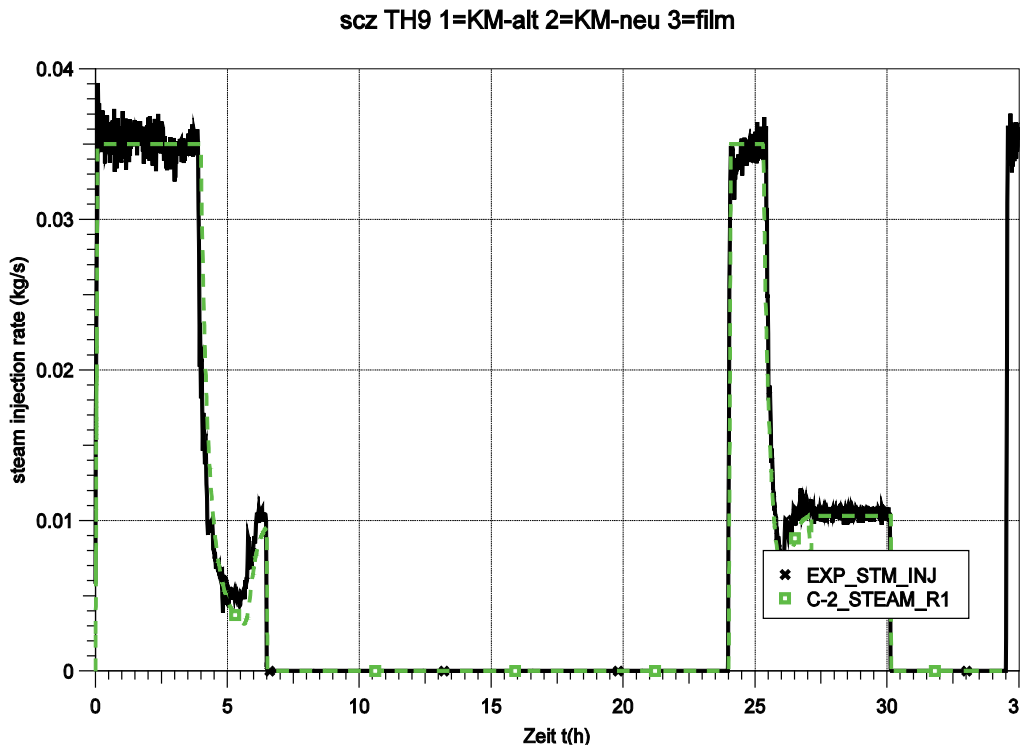


Abb. 4-31 THAI TH9, Dampfeinspeiserate, Experiment und COCOSYS

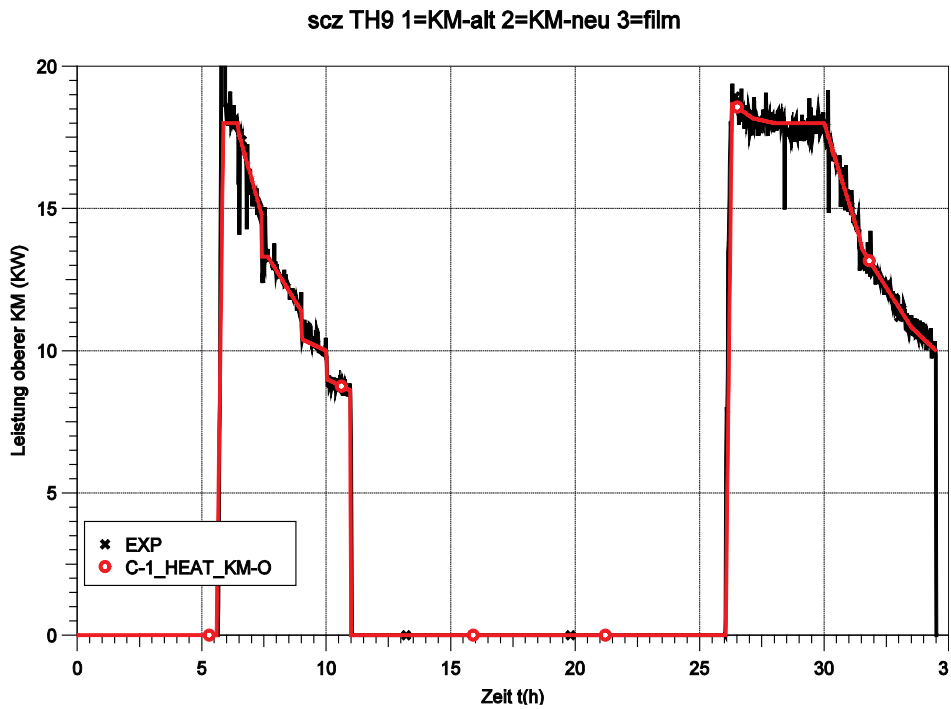


Abb. 4-32 THAI TH9, Kühlleistung oberer Kühlmantel, Experiment und COCOSYS

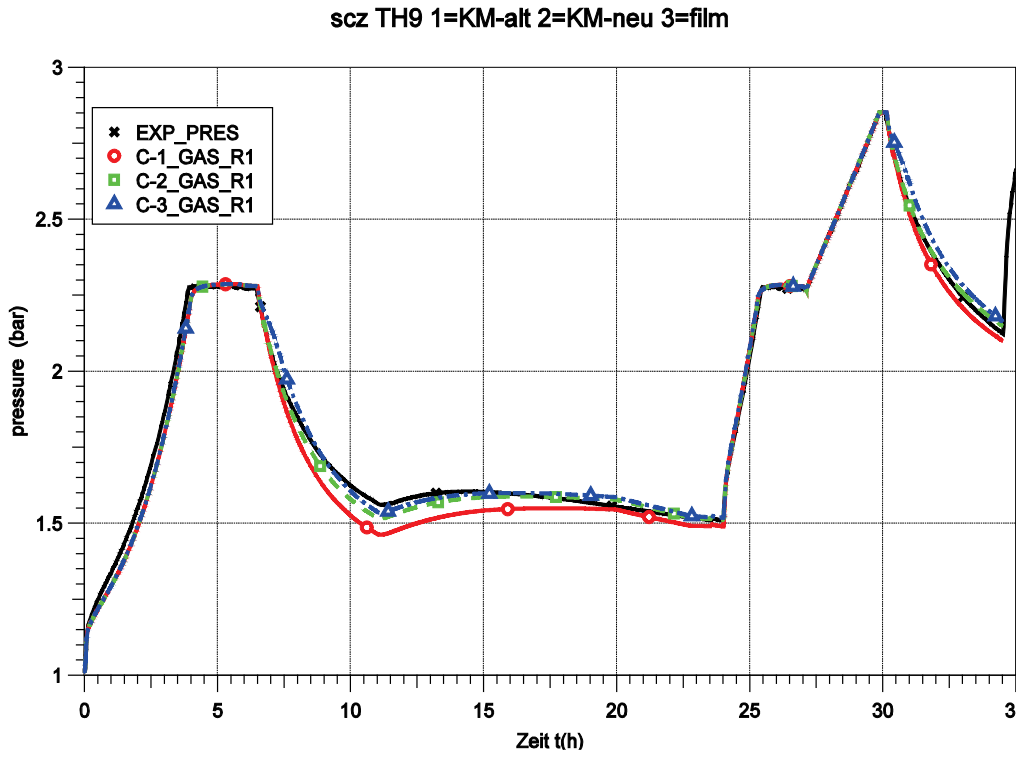


Abb. 4-33 THAI TH9, Atmosphärendruck, Experiment und COCOSYS

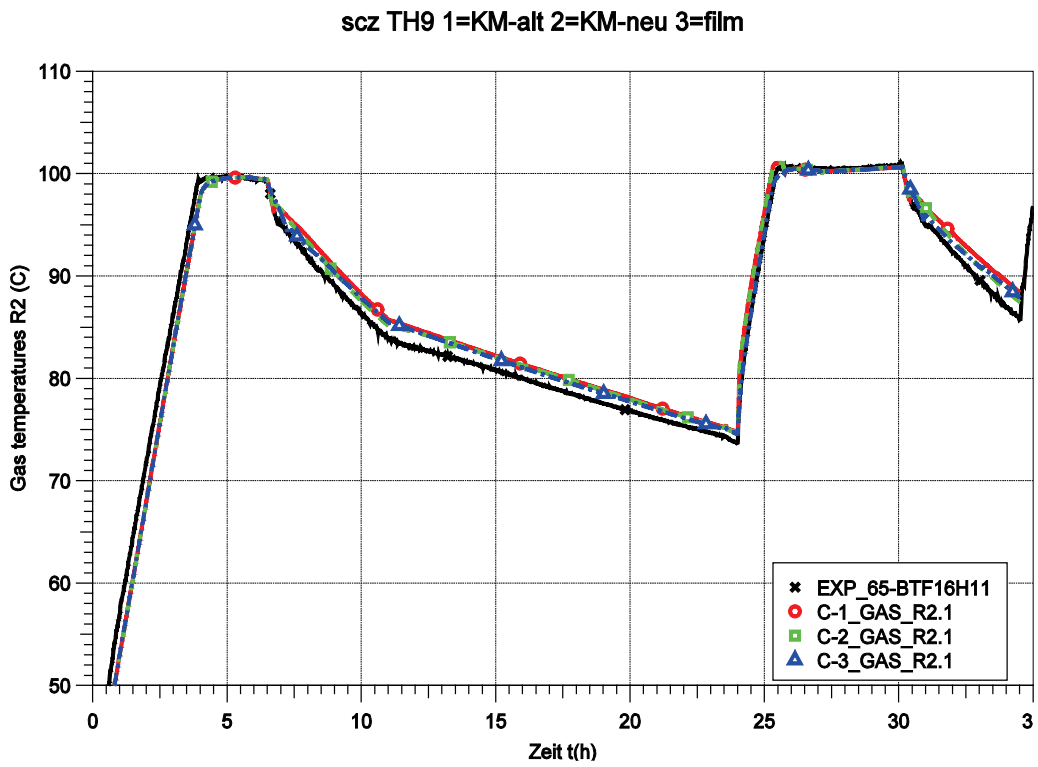


Abb. 4-34 THAI TH9, Atmosphärentemperaturen, Experiment und COCOSYS

4.1.3.3 COCOSYS Nodalisierung und Rechenmodelle

In verschiedenen früheren Experimenten war festgestellt worden, dass COCOSYS in Abkühlphasen oft die relative Feuchte unterschätzte und das Absinken des Druckes überschätzte. Als mögliche Ursache wurde eine Unterschätzung der Verdampfung von Pfützen sowie von Wasserfilmen an Strukturen vermutet. Dies sollte mit Hilfe des neuen Filmverdampfungsmodells verbessert und an TH9 validiert werden. Im Laufe der Untersuchungen stellte sich heraus, dass bei TH9 zusätzlich die Wärmeleitung durch die Wand in vertikaler Richtung einen starken Einfluss auf die Ergebnisse hat.

Der COCOSYS-Datensatz in Abb. 4-30 teilt die Behälteratmosphäre in 37 Zonen auf, die 13 vertikale Ebenen bilden. Es wäre auch die Verwendung einer weitaus größeren Nodalisierung möglich gewesen, da im Versuch TH9 die Atmosphäre gut durchmischt ist. Grund für die Anwendung dieses detaillierten Datensatzes ist dessen Verwendung in modifizierter Form auch für den Nachfolgeversuch TH10, in dem Atmosphärenschichtungen auftraten.

Der Behandlung des Kondensats liegen die folgenden Überlegungen zugrunde. Während der Einspeisephase kondensiert der Dampf an den Wänden und das Kondensat läuft an diesen ab. Nach Ende der Einspeisung verbleibt ein Rest von Kondensat, das nur langsam oder nicht abläuft. Anhand von Messungen bei THAI-Versuchen wurde grob abgeschätzt, dass dieser Rest etwa einem Wasserfilm von 0,1 mm – verteilt auf alle Wandflächen – entspricht, was 14 l ergibt. Hinzu kommen noch Pfützen, die sich auf exponierten Stellen bilden. Für die Kondensatsammelrinnen bei 6,6 m wurden 3,6 l abgeschätzt und für die Kondensatwannen bei 4 m 10 l. Die Kondensatauffangrinne bei 1,25 m kann maximal etwa 41 l aufnehmen. Der überwiegende Teil des Kondensats fließt beim Versuch TH9 über die in Abb. 4-30 dargestellten Pfade in den Sumpf.

Die drei hier diskutierten COCOSYS-Rechnungen unterscheiden sich wie folgt:

- **Rechnung 1**, Bezeichnung in den Bildern "1=KM-alt": Die Drainage wird mit den herkömmlichen DRAIN_WALL Verbindungen gerechnet. Dabei werden die Verbindungen aber nicht von Zone zu Zone geführt, sondern direkt auf die entsprechende exponierte Struktur geleitet, z. B. von R6 direkt in die Kondensatsammelrinne bei 6,6 m, von R4MO.1 direkt auf die Kondensatwanne bei 4 m oder von R3O.2 direkt in die Kondensatauffangrinne bei 1,2 m. Grund für diese vereinfachte Drainageführung ist die Reduzierung von programmtechnischen An- und Abschaltvorgängen,

die in früheren Rechnungen eine starke Verkleinerung der Zeitschrittweite und eine dementsprechende Verlängerung der Rechenzeit verursachten. Ein Wärmeaustausch zwischen den Wänden und dem Kondensat wird berechnet, solange wie ein Massenstrom in den DRAIN_WALL Verbindungen stattfindet. Dieser Massenstrom kommt zum Erliegen, wenn die vorgegebenen Restwassermengen (s. o. "Behandlung des Kondensats") unterschritten werden. Dieses Restwasser hat in der Rechnung in der Regel keinen Kontakt zur Wand. Stattdessen steht es nur in Kontakt zur Atmosphäre, wodurch die Verdampfung unterschätzt wird.

- **Rechnung 2**, Bezeichnung in den Bildern "2=KM-neu": Die Drainage und die Restwasserbehandlung entspricht Rechnung 1. Zusätzlich wird der Wärmetransport in vertikaler Richtung innerhalb der Behälterwand berücksichtigt. Das erwies sich als erforderlich, da sich während des Betriebs des oberen Kühlmantels zwischen den ungekühlten und den gekühlten Wandbereichen eine Temperaturdifferenz von bis zu 17 °C ausbildet (Abb. 4-35). Somit vergrößert der Wärmetransport innerhalb der Wand faktisch die Fläche des gekühlten Wandbereichs. Dies ist in Rechnung 1 nicht erfasst. Da COCOSYS den Wärmetransport nur eindimensional (hier in radialer Richtung) berechnet, konnte der vertikale Transport in Rechnung 2 auch nur in vereinfachter Weise berücksichtigt werden. Basierend auf Handabschätzungen wurde der gekühlte Bereich nach oben hin um 12 cm und nach unten um 16 cm erweitert und so um 20 % vergrößert. Zusätzlich wurde aus noch weiter oben und unten liegenden Wandbereichen zeitabhängig per Tabelle Wärme abgezogen und in die gekühlten Bereiche zurückgespeist.
- **Rechnung 3**, Bezeichnung in den Bildern "3=film": Die Drainage wird nicht mehr mit DRAIN_WALL gerechnet sondern mit den neu entwickelten Strömungspfaden längs der Strukturen. So lange, wie Wasser durch dieses Pfade fließt, tauscht es Wärme mit den Strukturen aus. Des Weiteren wird an allen Wandflächen die Bildung eines Kondensatfilms von maximal 0,1 mm Dicke zugelassen, der verdampfen und den Wänden Wärme entziehen kann. Die Berücksichtigung des vertikalen Wärmetransports in den Wänden ist gleich wie in Rechnung 2.

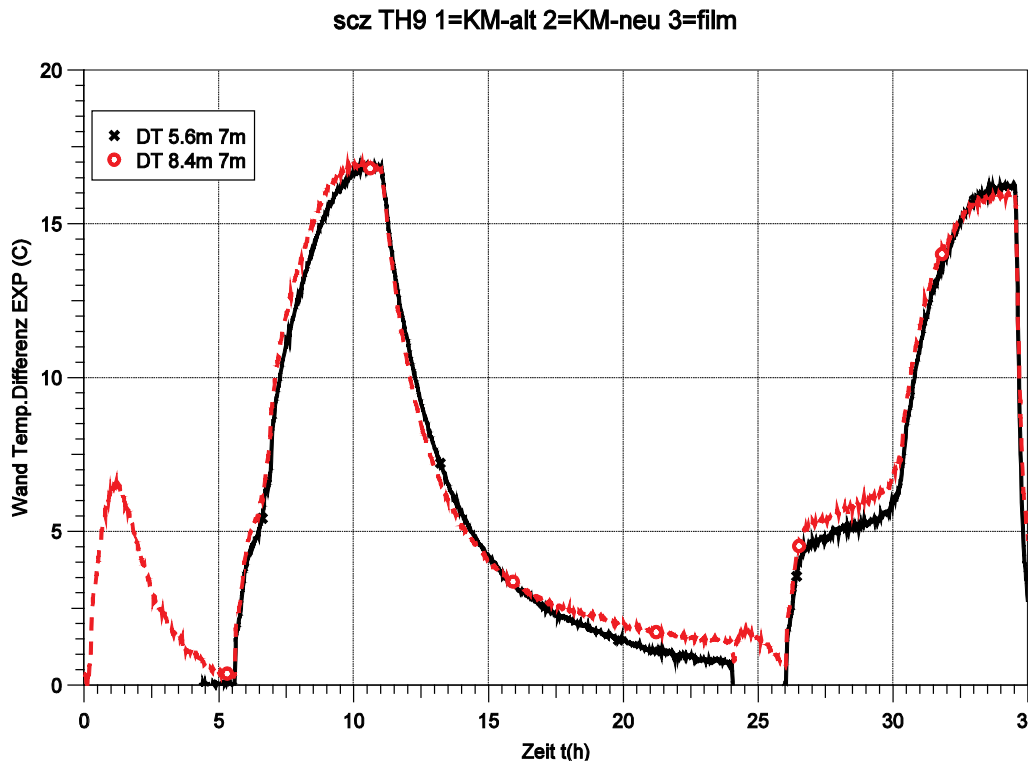


Abb. 4-35 THAI TH9, Temperaturdifferenzen zwischen der ungekühlten Behälterwand bei 5,6 m und 8,4 m und der gekühlten Wand bei 7 m, experimentelle Daten

4.1.3.4 Vergleich COCOSYS-Rechnungen mit Experiment

Die drei COCOSYS-Rechnungen geben die experimentellen Verläufe des Druckes und der Temperaturen gut wieder, wobei Abweichungen - eher geringfügiger Art - während der Abkühlphasen (= Druckabsenkphasen) auftreten, was insbesondere auf Rechnung 1 zutrifft (Abb. 4-33 und Abb. 4-34).

Die relative Feuchte der Atmosphäre wird insbesondere von Rechnung 1 unterschätzt (Abb. 4-36). Das ist in Übereinstimmung mit der Unterschätzung der Wandtemperatur des oberen Kühlmantels (Abb. 4-37), die als niedrigste Oberflächentemperatur die Sättigungstemperatur der Atmosphäre und somit die Feuchte bestimmt.

Mit Berücksichtigung des vertikalen Wärmetransports in der Wand in Rechnung 2 wird die Simulation des Druckes, der Feuchte und der Wandtemperatur des oberen Kühlmantels wesentlich verbessert, wobei die Feuchte allerdings immer noch unterschätzt wird. Die Verbesserung der Ergebnisse ergibt sich aus der Vergrößerung der Kühlfläche im Vergleich zu Rechnung 1, der damit verbundenen Vergrößerung der abzuküh-

lenden Stahlmasse, sowie insbesondere auch der Veränderung der Kondensatströme. In Rechnung 1 wird das gesamte aufgrund der Kühlung anfallende Kondensat von der Sammelrinne bei 6,6 m aufgefangen und dann direkt in den Sumpf geleitet (s. Abb. 4-30). In Rechnung 2 hingegen wirkt die Kühlung auch noch bis zu einer Höhe von 16 cm unterhalb der Sammelrinne. Das dadurch entstehende Kondensat wird auf die Kondensatwanne bei 4 m geleitet und fällt schließlich auf den unteren Klöpperboden bei 1.25 m. Dort kühlt es die Wand ab und verdampft dabei teilweise (s. Abb. 4-38 und Abb. 4-39 von 7 bis 9 h und ab 30 h). Dabei wird die Abkühlung anfangs überschätzt. Auch in Rechnung 1 (und 3) verdampft Kondensat auf dem unteren Klöpperboden, jedoch bei weitem nicht soviel, wie in 2. Ein Grund für die zu starke Verdampfung am unteren Klöpperboden in Rechnung 2 ist die vereinfachte Behandlung der Drainage. So rinnt das Kondensat nicht die Wand entlang und verdampft bereits dort, sondern es wird direkt auf die Klöpperboden geleitet.

In Rechnung 3 wird das Entlangrinnen des Kondensats an der Wand simuliert. Es tritt folglich keine so starke Verdampfung am unteren Klöpperboden auf und dessen Wandtemperaturverlauf wird zumindest am Anfang der Abkühlphasen richtig berechnet. Später nimmt die Temperatur jedoch etwas zu langsam ab. In Abb. 4-40 sind Verdampfungsraten für einige Strukturen unterhalb der Kondensatsammelrinne bei 6,6 m aufgetragen. In fast allen hört die Verdampfung bereits etwa eine Stunde nach Beginn der Druckabsenkung auf, weil kein Kondensat mehr an diese Stellen gelangt. Nur an der Struktur S4Z5.1, die sich direkt unterhalb des gekühlten Bereichs befindet, hält die Verdampfung während der gesamten Kühlphase an. Kurz nach Beendigung der Kühlung und damit auch Beendigung der Kondensatentstehung hört auch hier die Verdampfung auf. Abb. 4-41 zeigt keine wesentlichen Wasserfilme die sich auf den ungekühlten Strukturen halten und aus denen Dampf entstehen könnte. Nur auf der Struktur S3Z5U.1, die zum gekühlten Bereich gehört, bleibt ständig ein Film bestehen. Die anderen Parameter ändern sich nur geringfügig gegenüber der Rechnung 2. Insbesondere wird die Feuchte weiterhin unterschätzt.

Das Modell könnte dahingehend verbessert werden, dass nicht ein gleichmäßig auf die Wand verteilter 0,1 m dicker Film angenommen wird, sondern dass das Kondensat unregelmäßig über die Wand verteilt wird, so dass es benetzte und unbenetzte Wandflächen gibt. Die Wärme aus den benetzten Flächen würde Kondensat verdampfen und somit die Feuchte erhöhen, während die Wärme aus den unbenetzten Flächen die Feuchte verringern würde. Solange jedoch der Wärmetransport in vertikaler Richtung

durch die Behälterwand, der einen starken Einfluss auf die Ergebnisse hat, nur sehr vereinfacht beschrieben werden kann, ist es nicht sinnvoll, weitere Arbeiten an dem Filmablauf- und Verdampfungsmodell durchzuführen.

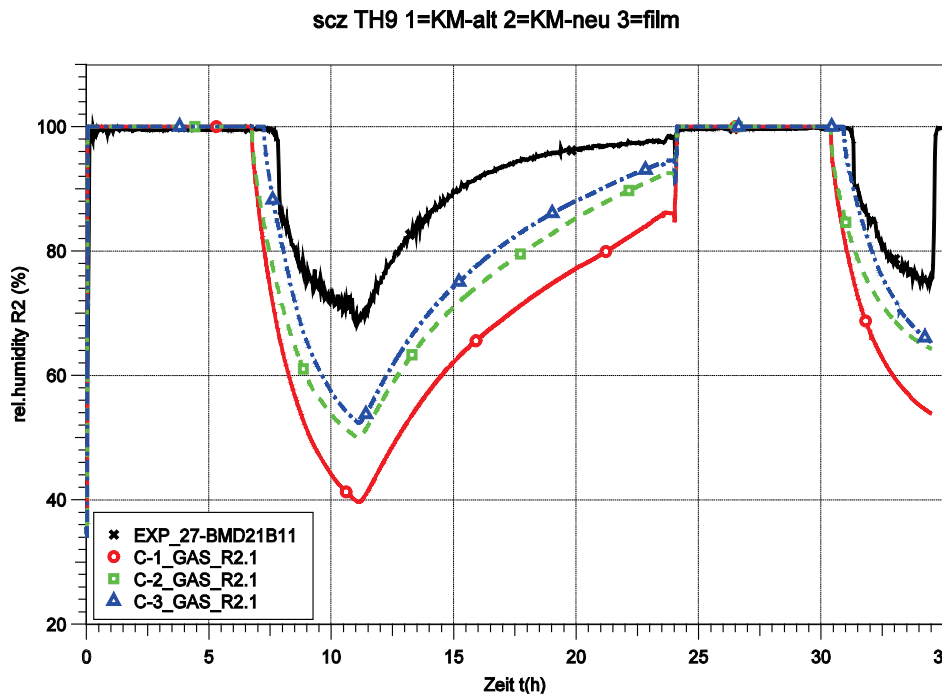


Abb. 4-36 THAI TH9, relative Feuchte, Experiment und COCOSYS-Rechnungen

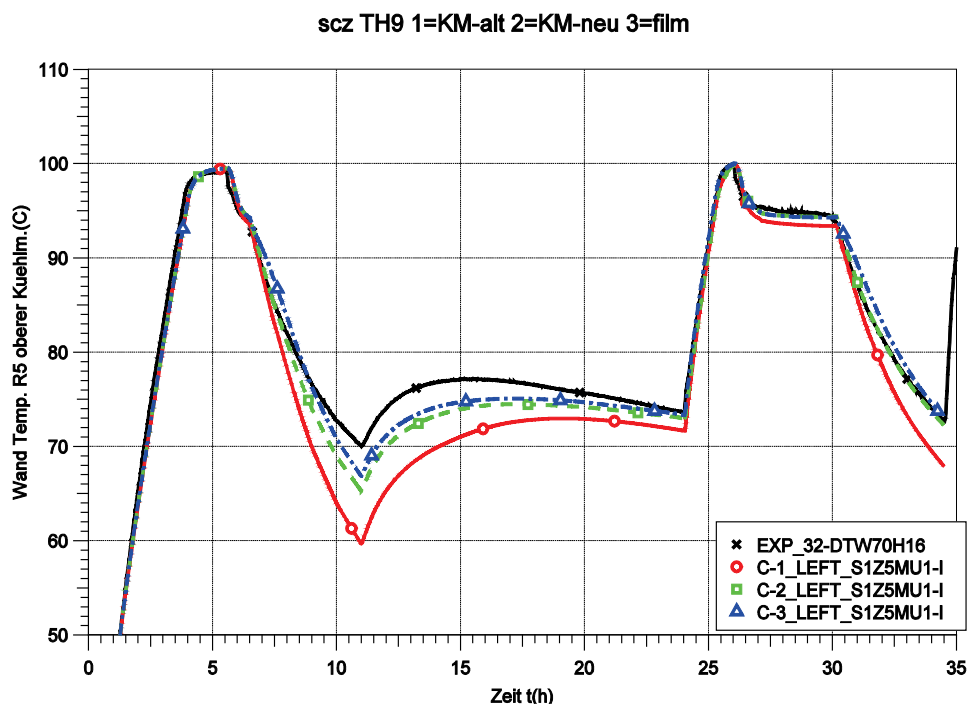


Abb. 4-37 THAI TH9, Wandtemperatur oberer Kühlmantel, Experiment und COCOSYS-Rechnungen

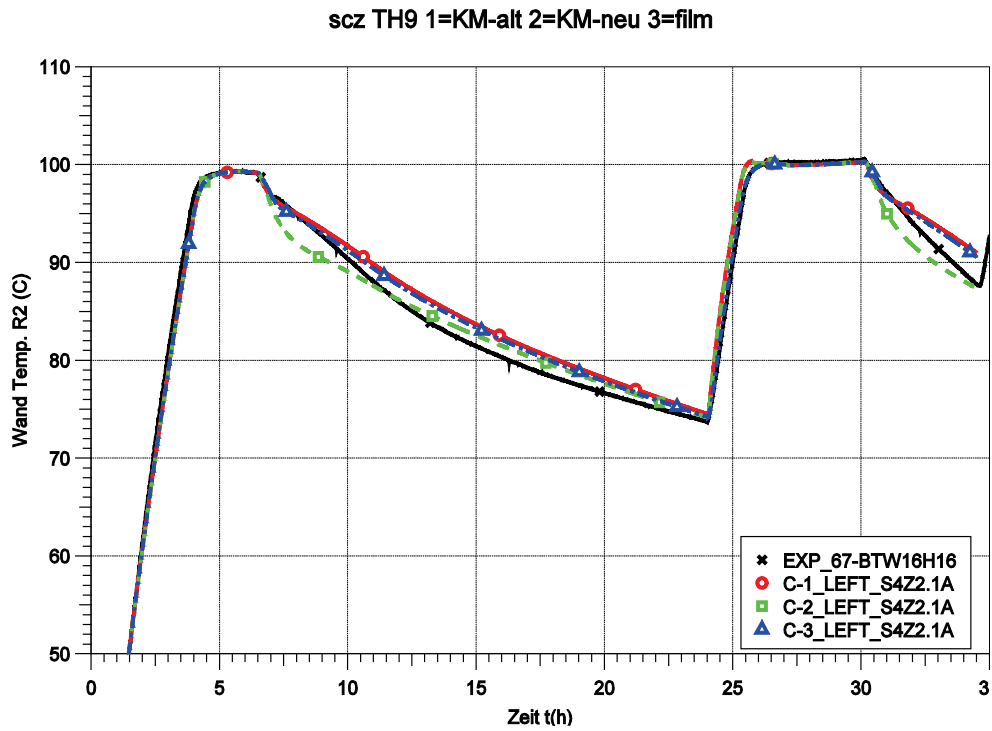


Abb. 4-38 THAI TH9, Wandtemperatur unterer Klöpperboden, Experiment und CO-COSYS-Rechnungen

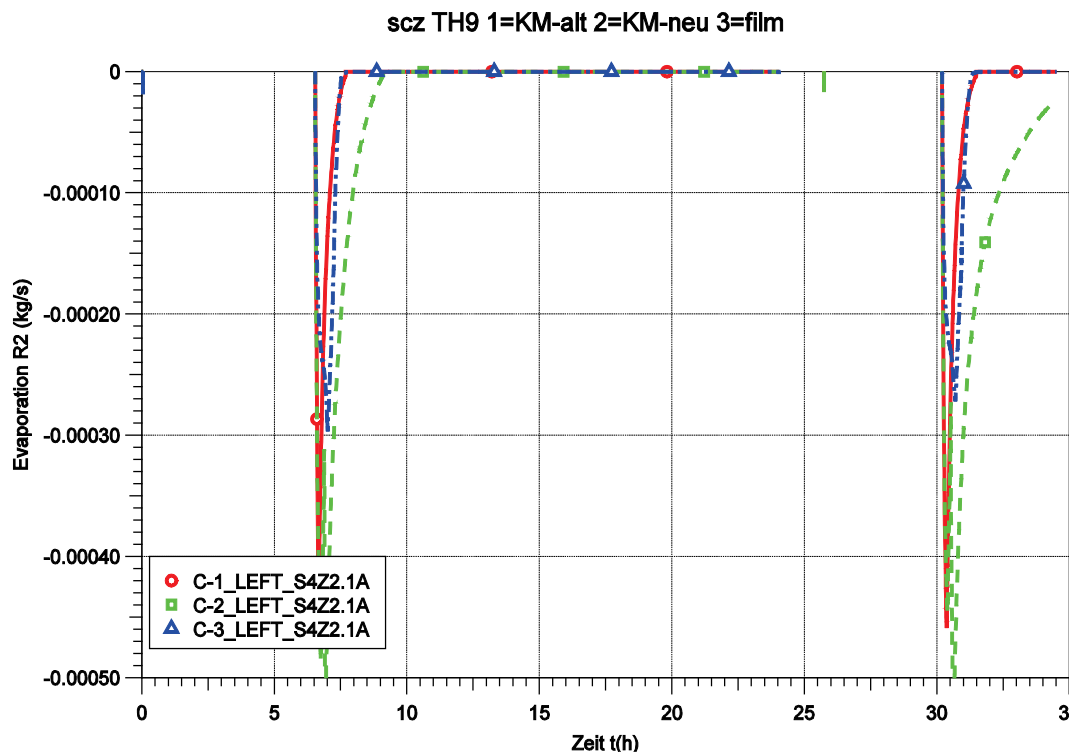


Abb. 4-39 THAI TH9, Verdampfungsrate unterer Klöpperboden, COCOSYS-Rechnungen

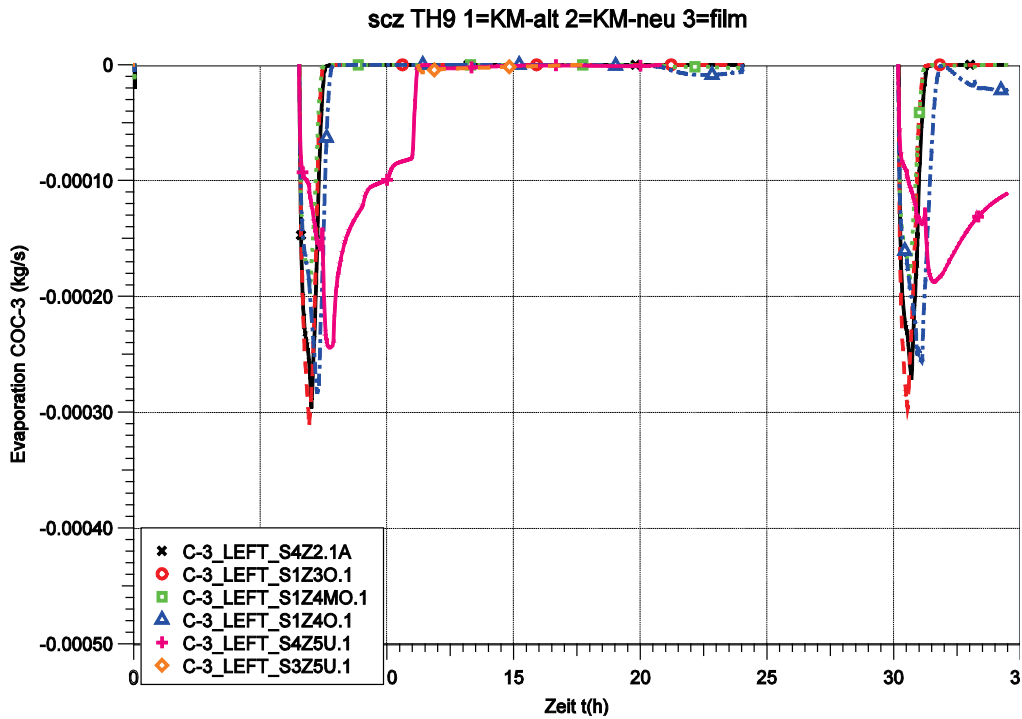


Abb. 4-40 THAI TH9, Verdampfungsrate an verschiedenen Strukturen, COCOSYS - Rechnung 3

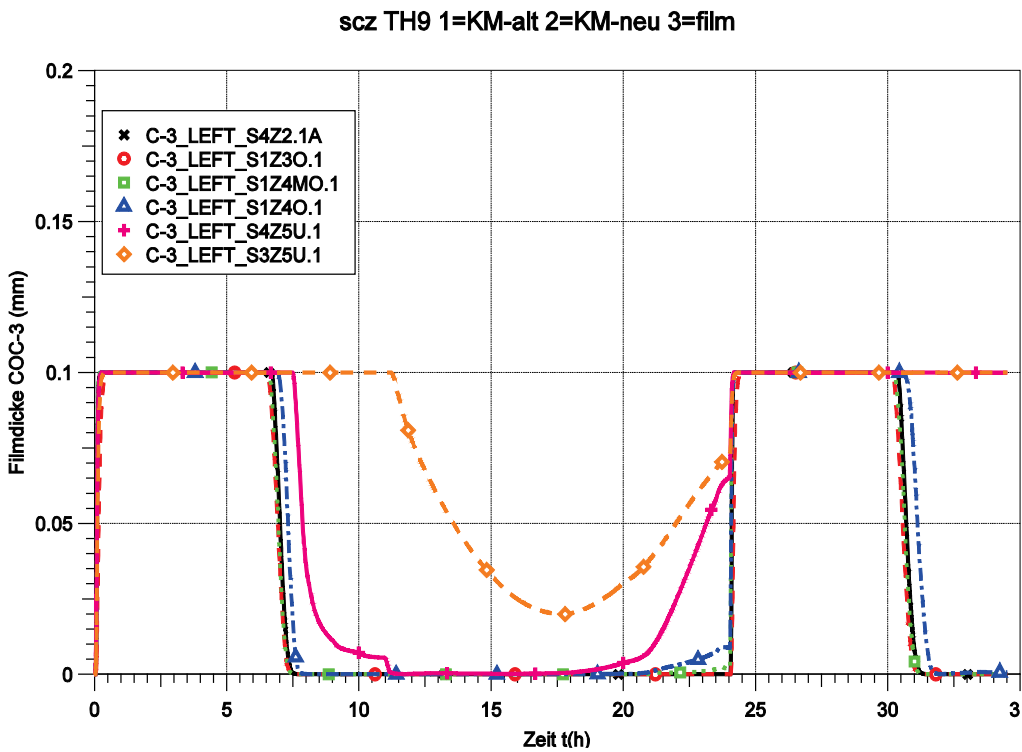


Abb. 4-41 THAI TH9, Filmdicke an verschiedenen Strukturen, COCOSYS-Rechnung 3

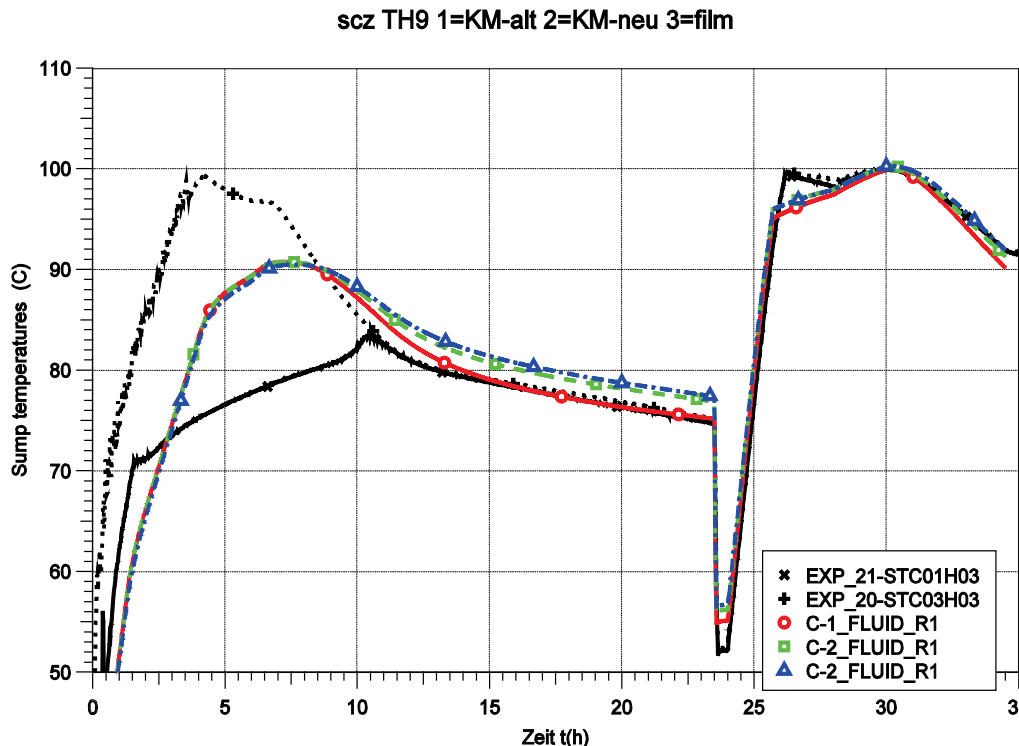


Abb. 4-42 THAI TH9, Sumpfwassertemperaturen, Experiment und COCOSYS-Rechnungen

Einen erheblichen Beitrag zur Verdampfung liefert der Sumpf. In der ersten Abkühlphase ist der Sumpf im Experiment geschichtet, während es in den Rechnungen nur möglich ist, den Sumpf als homogen durchmischt zu beschreiben. Somit lassen sich die Rechenergebnisse nur qualitativ mit den Messwerten vergleichen. Vor Beginn der zweiten Abkühlphase wurde im Experiment der Sumpf durch eine elektrische Beheizung homogenisiert. Die Rechnungen beschreiben den Temperaturverlauf des Sumpfwassers während der zweiten Abkühlphase sehr gut. Daraus kann geschlossen werden, dass auch die Verdampfung des Sumpfwassers gut beschrieben wird.

4.1.3.5 Zusammenfassung

Bei der Simulation des THAI-Versuches TH9 zeigte sich, dass der Wärmetransport in vertikaler Richtung durch die Behälterwand einen starken Einfluss auf die Versuchsergebnisse hat. Da COCOSYS den Wärmetransport nur eindimensional (hier in radialer Richtung) berechnet, konnte der vertikale Transport in Rechnung 2 auch nur in vereinfachter Weise berücksichtigt werden. Somit ist eine belastbare Validierung des neuen Filmablauf- und Verdampfungsmodells zurzeit nicht möglich.

Es wird empfohlen, ein zweidimensionales Wärmetransportmodell für COCOSYS zu entwickeln. Dies würde neben TH9 die Simulation von zahlreichen weiteren THAI-Versuchen verbessern, die eine wesentlich Grundlage der COCOSYS-Validierung darstellen.

4.2 Pyrolyse

Brandsimulationsrechnungen und rechnerische Nachweisverfahren haben vor allem im Zusammenhang mit der Überprüfung der Brandsicherheit in Betrieb befindlicher Kernkraftwerke eine zunehmende Bedeutung erlangt. Dies gilt insbesondere auch für deterministische Brandgefahrenanalysen. Derartige rechnerisch-analytische Verfahren haben bereits Eingang in neuere Regelwerke gefunden. Allerdings haben alle verfügbaren Analysehilfsmittel ihre Anwendungsgrenzen und sind ohne vertiefte Kenntnis der unterschiedlichen Phänomene und Randbedingungen nicht ohne weiteres für jede Problemstellung anzuwenden. Zur Auswertung der bestehenden Modelle beteiligt sich die GRS unter Nutzung der Betriebserfahrungen im internationalen Rahmen an den Gremien ICFMP (International Collaborative Project to Evaluate Fire Models for Nuclear Power Plant Applications) und OECD-PRISME (Mehrraum-Versuche zur Wärme- und Rußausbreitung).

Schwerpunkt der Entwicklung in diesem Vorhaben ist die Modellierung von Plumes und die Simulation der Rußausbreitung.

Anmerkung: Da die experimentellen Daten des OECD-PRISME Projekts zurzeit noch nicht frei verfügbar sind, wurden die Achsenbeschriftungen in den folgenden Abbildungen teilweise entfernt. Die Ergebnisse wurden aber in separaten Berichten dokumentiert.

4.2.1 Nutzung von F&E-Ergebnissen zur Pyrolyse

Das COCOSYS-Pyrolysemodell wurde im Zeitraum des Entwicklungsvorhabens RS 1159 auch im Rahmen anderer Vorhaben z. B. zur Nachrechnung von Versuchen genutzt. Hier sind insbesondere das ICFMP (International Collaborative Project to Evaluate Fire Models for Nuclear Power Plant Applications) und das OECD-PRISME Projekt zu nennen.

Im Vorhaben wurden die im ICFMP durchgeführten und von deutscher Seite geleiteten Benchmarks Nr. 4 zum Treibstoffbrand und Nr. 5 zum Kabelbrand abgeschlossen und dokumentiert /KLE 06, RIE 06/. Ferner wurde im Rahmen dieser internationalen Zusammenarbeit eine Zusammenfassung /ROW 08/ erstellt, in dem die Möglichkeiten aber auch die Grenzen von Brandsimulationsprogrammen dargestellt werden.

Parallel zum OECD PRISME Projekt wurde eine PRISME Benchmark-Gruppe (PBG) eingerichtet. Hier nahm die GRS aktiv teil. Arbeiten hierzu werden im Rahmen des COCOSYS Validierungsvorhabens RS1170 und des Projekts SR 2577 durchgeführt. In Abstimmung mit der Benchmark-Gruppe wurden die PRISME-Einraumversuche SI-D1, SI-D3 und SI-D6 gerechnet. Für jeden Versuch wurden dabei zwei Rechnungen durchgeführt, wobei in einer Rechnung die experimentelle Pyrolyserate und in einer weiteren Rechnung die sogenannte Peatross & Beyler-Korrelation /PEA 97/ zur Berechnung der Pyrolyserate verwendet wird. Für die Verwendung der Peatross & Beyler-Korrelation wurde das COCOSYS-Programm entsprechend ergänzt. Für jeden Versuch wurde ein separater Bericht erstellt.

4.2.2 Implementierung eines Plumemodells

Aufgabe eines Plumemodells ist die korrekte Simulation des Luftentrainments (Luftmitriss) in den Plume. Dieser hat Einfluss auf die Konvektionsströmungen im Nahbereich der Flamme und somit auf das Temperaturprofil innerhalb und außerhalb der Flamme. Die bisherigen Rechnungen zeigten, dass die Temperaturstratifikation nicht optimal berechnet wird.

Zur Berechnung des Luftmitrisses gibt es zahlreiche Korrelationen. Eine sehr bekannte Korrelation ist die von McCaffrey /MCC 83/. Eingangsgrößen sind die konvektive Wärmefreisetzung und die Höhe der Grenzschicht. Für die Berechnung der Grenzschichthöhe muss das Temperaturprofil über die Höhe ausgewertet werden. Hierzu wurden zwei verschiedene Modelle (von Quintiere /QUI 84/ und von Audouin /AUD 99/) eingebaut. Bei der Berechnung des Luftentrainments ist zu beachten, dass die Dichte innerhalb des Plumes nicht zu stark durch die Abkühlung erhöht wird und die Brandgase nach wie vor nach oben strömen. Daher wird in CFAST /JON 05/ der auf Basis der Plumekorrelation berechnete Luftmitriss unter Umständen reduziert. Die Situationen H₂-Plume und Plume durch Brand sind im Prinzip sehr ähnlich. Bezüglich H₂-Plumes wurde anhand von THAI-Rechnungen gezeigt, dass bei Verwendung von so genann-

ten Plumezonen (Kegelstumpf-förmige Zonen) sehr gute Ergebnisse mit COCOSYS erzielt werden, ohne die von COCOSYS berechneten Strömungen zu modifizieren. Das COCOSYS-Programm wurde nun dahin gehend ergänzt, dass der auf Basis der Plumekorrelation berechnete Luftmitriss berechnet wird und mit den von COCOSYS berechneten Strömungswerten in Richtung des Plumes verglichen werden kann. Die Ergänzung wurde anhand des PRISME-SOURCE Versuchs SI-D1 getestet.

Berechnung der mittleren Temperaturen und Grenzschichthöhe

In der verwendeten Plumekorrelation von McCaffrey geht die Höhendifferenz zwischen Grenzschichthöhe und Höhe des Brandgutes ein. Zur Berechnung der Grenzschichthöhe gibt es wiederum unterschiedliche Ansätze, die sich darin unterscheiden, welcher Funktionsverlauf für die 'mittlere' Temperatur angenommen wird (Abb. 4-43).

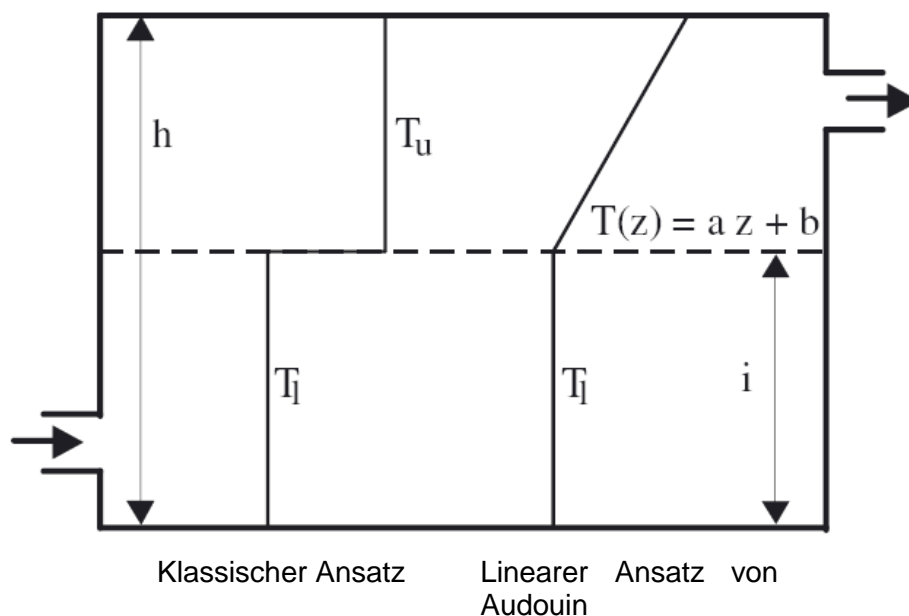


Abb. 4-43 Ansätze zur Berechnung der mittleren Temperatur

Beiden verwendeten Ansätzen ist gemeinsam, dass die Integrale

$$I = \int_0^h \frac{1}{T(z)} dz \quad \text{und} \quad J = \int_0^h T(z) dz \quad (4-11)$$

für das angenommene und tatsächliche Temperaturprofil $T(z)$ gleich sind (Massen- und Energieäquivalenz). Um die 2 Gleichungen mit drei Unbekannten T_l , T_u und i zu lösen, wird noch $T_l = T(z=0)$ angenommen. Bezüglich der Methode von Audouin ist noch zu

beachten, ob für $0 < i < h$ tatsächlich eine Lösung vorliegt. Falls nicht, wird die Bedingung $T_i = T(z=0)$ durch $i = 0$ ersetzt.

Beide Rechenmethoden sind detailliert im COCOSYS Reference Manual beschrieben.

Luftmitriss wird nur dann berechnet, wenn die Grenzschicht höher ist als die Lage des Brandgutes. Die Methode von Audouin ergibt tendenziell niedrigere Grenzschichthöhen und erreicht oft sogar die Bodenfläche. Daher wurde für die Vergleichsrechnungen (siehe unten) das Quintiere-Modell bevorzugt.

Verwendetes Plumemodell

In dem verwendeten Plumemodell von McCraffrey /MCC 83/ wird die Entrainmentrate \dot{m}_e von frischer Luft als Funktion der konvektiven Wärmefreisetzung Q_f [kW] und der Plumehöhe z (= Grenzschichthöhe - Höhe des Brandgutes) berechnet. Dabei wird zwischen den Bereichen Flamme, Übergangsbereich und Plume unterschieden:

$$\text{Flamme:} \quad \frac{\dot{m}_e}{Q_f} = 0.011 \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right)^{0.566} \quad 0.00 \leq \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right) < 0.08$$

$$\text{Übergangsbereich:} \quad \frac{\dot{m}_e}{Q_f} = 0.026 \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right)^{0.909} \quad 0.08 \leq \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right) < 0.20$$

$$\text{Plume:} \quad \frac{\dot{m}_e}{Q_f} = 0.124 \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right)^{1.895} \quad 0.20 \leq \left(\frac{z}{Q_f^{2/5}} \right)$$

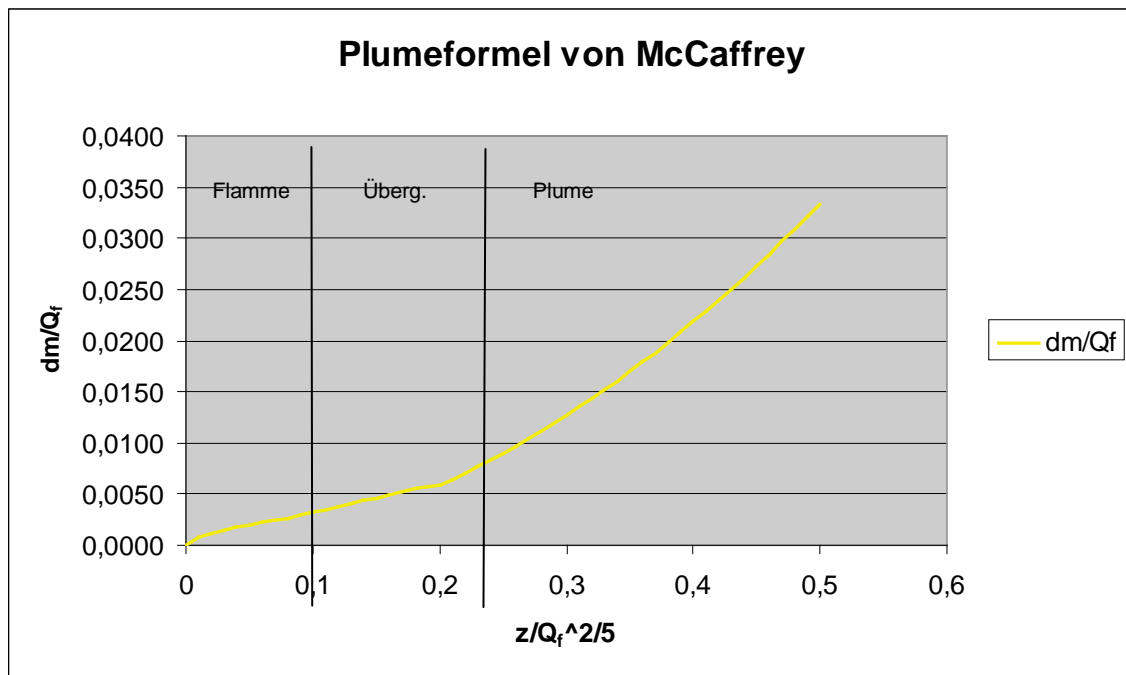


Abb. 4-44 In COCOSYS verwendete Plumeformel nach McCaffrey

Vergleich mit berechneten Strömungen

In COCOSYS werden automatisch für jede brennende Struktur die dazugehörigen Plumezonen (Zonen oberhalb dieser Struktur) anhand der existierenden Atmosphärenverbindungen identifiziert. Voraussetzung ist, dass eine eindeutige Zuordnung (nur eine nach oben gerichtete Verbindung) möglich ist. Ebenso werden die seitwärts gerichteten Verbindungen ermittelt und deren Massenströme in Richtung des Plumes aufsummiert, sofern sich die Verbindung unterhalb der Grenzschicht befindet. Befindet sich die Grenzschicht innerhalb einer Verbindung, wird entsprechend linear interpoliert.

Die berechneten Massenströme reagieren empfindlich auf Druckänderungen. Sofern es möglich ist, ein Eingreifen in diese Strömungsberechnung zu vermeiden, sollte dieses bevorzugt werden. Daher wird in dem jetzigen Stadium nur eine Vergleichsmöglichkeit geschaffen. Die Strategie, so genannte Plumezonen (Zonen in Form von Kegelstümpfen) zu definieren, hat außerdem den Vorteil, dass ein entsprechendes Entrainment auch in der Heißgasschicht berechnet wird. Die Plumekorrelationen würden hier keine Informationen liefern.

Test anhand des PRISME-SOURCE-D1 Experiments

Die Plume Korrelation wurde anhand eines Versuchs aus der PRISME-SOURCE Serie /AUD 07/ getestet. Es handelt sich hierbei um Einraumbrandversuche in der DIVA-Versuchsanlage (Abb. 4-45).

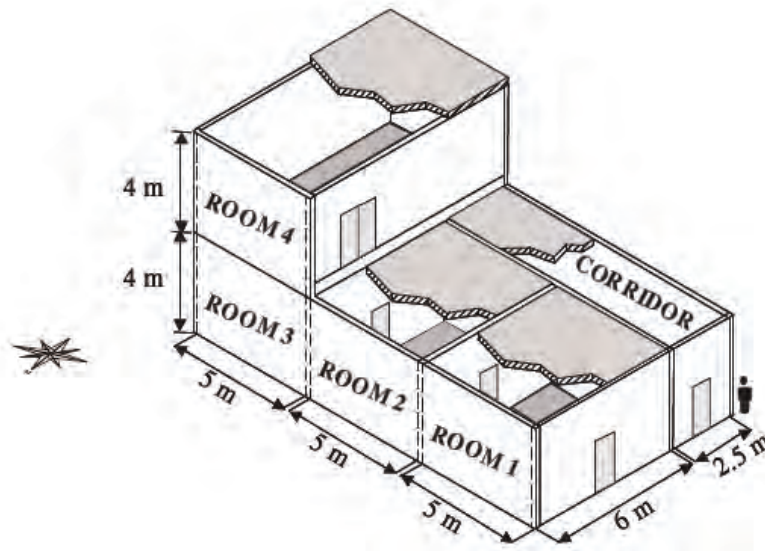


Abb. 4-45 DIVA Versuchsanlage

Für diesen Versuch wurde der Raum 2 verwendet. Der DIVA-Versuchsstand befindet sich innerhalb der JUPITER-Anlage mit einem freien Volumen von 2630 m^3 . Die Größe des Brandraums beträgt $6 \times 5 \times 3,95 \text{ m}^3$. Die Betonwände sind 30 cm dick. Die Decke ist durch eine 5 cm dicke Isolierung geschützt. In der Mitte des Raums befindet sich eine $0,4 \text{ m}^2$ große Wanne, welche mit ca. 5 cm Öl gefüllt ist. Im Deckenbereich befindet sich die Zu- und Abluft, welche mit einer Luftwechselrate von ca. 4,7/h betrieben wird.

Mit COCOSYS ist es möglich, das Ventilationssystem mit Hilfe von zusätzlichen Zonen und Verbindungen zu simulieren. Abb. 4-46 zeigt das Schema des Ventilationssystems. Zu Beginn des Versuchs wurden die Volumenströme und die Drücke gemessen. Abb. 4-47 zeigt die verwendete Nodalisierung des Ventilationssystems. Dabei wurden die Knoten N3 und N4 sowie N15 und N17 in einer Zone zusammengefasst, da sich die Drücke nicht wesentlich unterscheiden.

Für eine korrekte Simulation des Ventilationssystems ist es nun notwendig, die Verlustbeiwerte der Verbindungen entsprechend einzustellen. Dazu wurde die Möglichkeit geschaffen, die Zeta-Werte von Verbindungen über ATLAS anzusteuern, so dass eine Anpassung dieser Verlustbeiwerte interaktiv möglich ist.

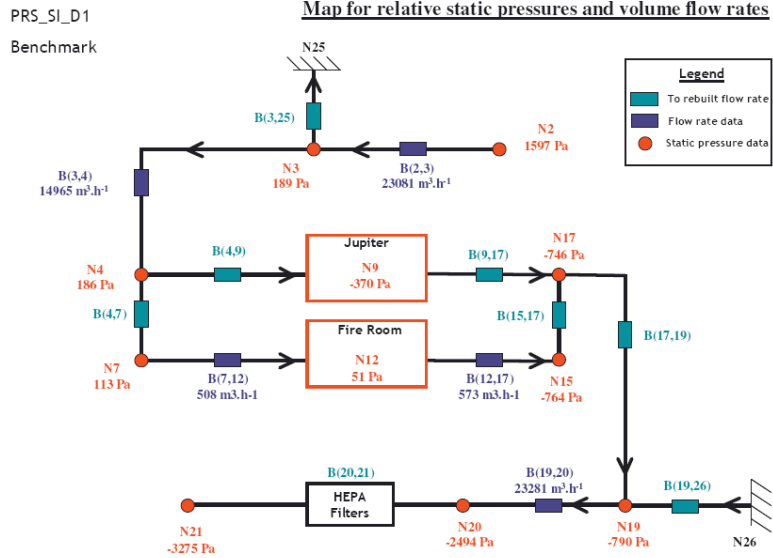


Abb. 4-46 Schema des Ventilationssystems

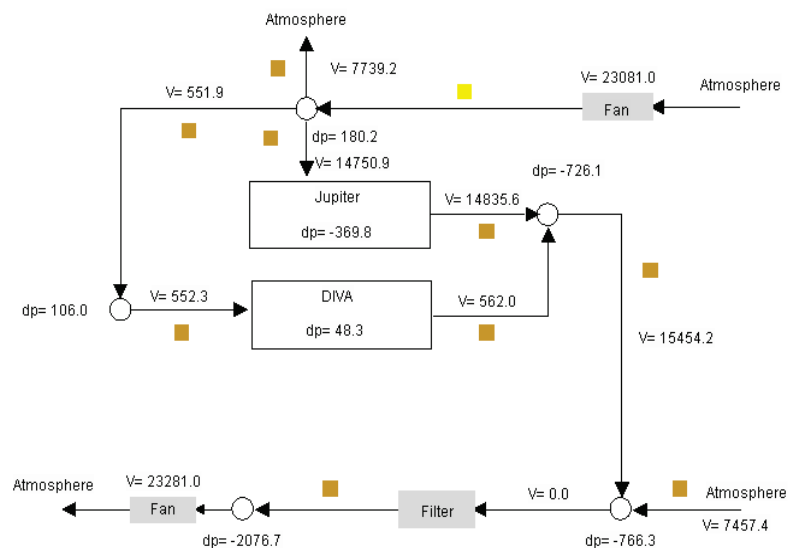


Abb. 4-47 Simulation des Ventilationssystems mit COCOSYS

Für Brandrechnungen ist es notwendig, den Brandraum detailliert zu nodalisieren. Es werden 10 Ebenen von Zonen verwendet. Die Einteilung innerhalb einer Ebene ist in Abb. 4-48 dargestellt.

Für eine verbesserte Simulation des Plumes wurden die zentralen Zonen oberhalb und unterhalb der Wanne modifiziert. Die Zonen unterhalb der Wanne wurden entsprechend der Wannengröße verkleinert. Die Zonen oberhalb der Wanne wurden von unten nach oben vergrößert, so dass sie die Form von Pyramidenstümpfen haben. Zu-

sätzlich wurde eine Atmosphärenverbindung zwischen den Zonen unter- und oberhalb der Wanne definiert, welche eine Querschnittsfläche von 10 % der Wannenfäche hat.

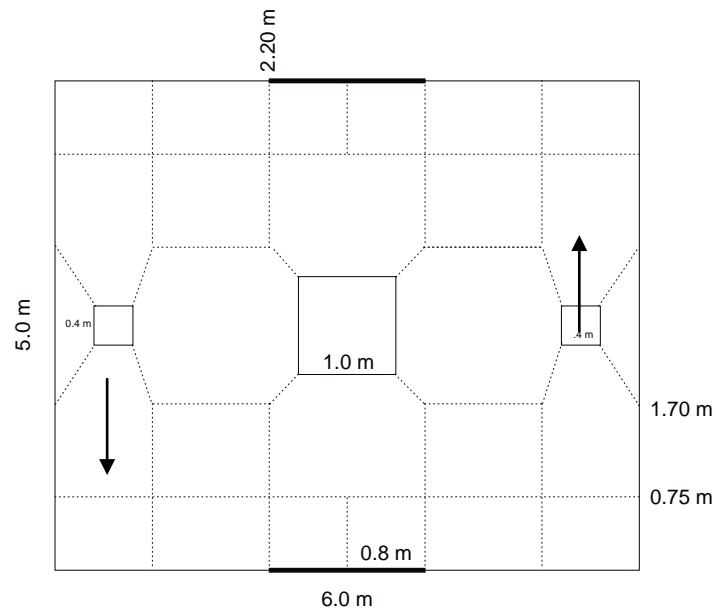


Abb. 4-48 Nodalisierung des Brandraums

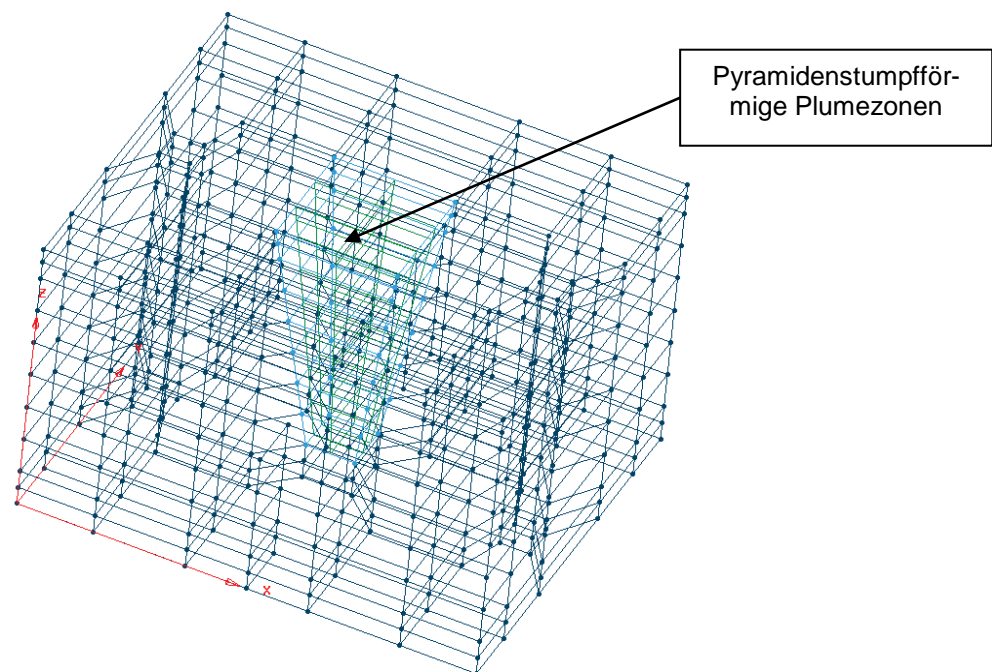


Abb. 4-49 Nodalisierung mit Plumezonen

Im Folgenden werden einige Ergebnisse dargestellt, welche in Bezug zum implementierten Modell stehen. Die Verwendung von Plumezonen hat insbesondere die Temperaturschichtung verbessert.

Abb. 4-50 zeigt den Vergleich der berechneten Raumtemperaturen mit den experimentellen Werten. Die Ergebnisse unter Verwendung von Plumezonen sind rot dargestellt, die ohne sind blau. Insbesondere für den unteren Raumbereich werden bessere Übereinstimmungen mit den experimentellen Werten erzielt. Zusätzlich wurden die Temperaturprofile für die maximalen Temperaturen und die Temperaturen während der stationären Phase bei 1500 s ausgewertet. Die Ergebnisse sind in Abb. 4-51 und Abb. 4-52 dargestellt. Der Vergleich der gelben und orangefarbenen Kurven zeigt den Einfluss der zusätzlichen Verbindung über der Wanne. Diese führt zu einem verbesserten Temperaturprofil unterhalb der Wanne. Die Änderungen haben nur einen geringen Einfluss auf die anderen Ergebnisse. Beispielsweise ist in Abb. 4-53 der Vergleich der berechneten Gaskonzentrationen dargestellt. Die Sauerstoffkonzentration ist etwas höher und liegt etwas näher an den experimentellen Werten. Dagegen sind die Abweichungen für CO und CO₂ etwas höher.

Die Entrainmentrate wird in Abb. 4-54 verglichen. Wie oben dargestellt, ist nun der Anwender in der Lage, die von COCOSYS unterhalb der Grenzschicht berechnete Entrainmentrate mit den auf die Plumekorrelation basierten Werten zu vergleichen. Die Ergebnisse ohne Verwendung von Plumezonen sind grün (COCOSYS) und schwarz gestrichelt (Korrelation) dargestellt. Da die Verwendung von Plumezonen einen Einfluss auf die Temperaturschichtung und somit auf die Höhe der Grenzschicht hat, sind die beiden schwarzen Kurven unterschiedlich, da die Grenzschichtlage in die Korrelation eingeht. Die Abbildung zeigt aber deutlich, dass die Abweichung zwischen COCOSYS-Rechnung und Korrelation bei Verwendung von Plumezonen deutlich geringer ist.

Die Rechenergebnisse zeigen, dass auch für Brände die Anwendung von Plumezonen sinnvoll ist. Mit der implementierten Plumekorrelation von McCaffrey wird der Anwender in der Lage versetzt, seine Ergebnisse hinsichtlich Luftzufuhr in den Plume quantitativ zu überprüfen.

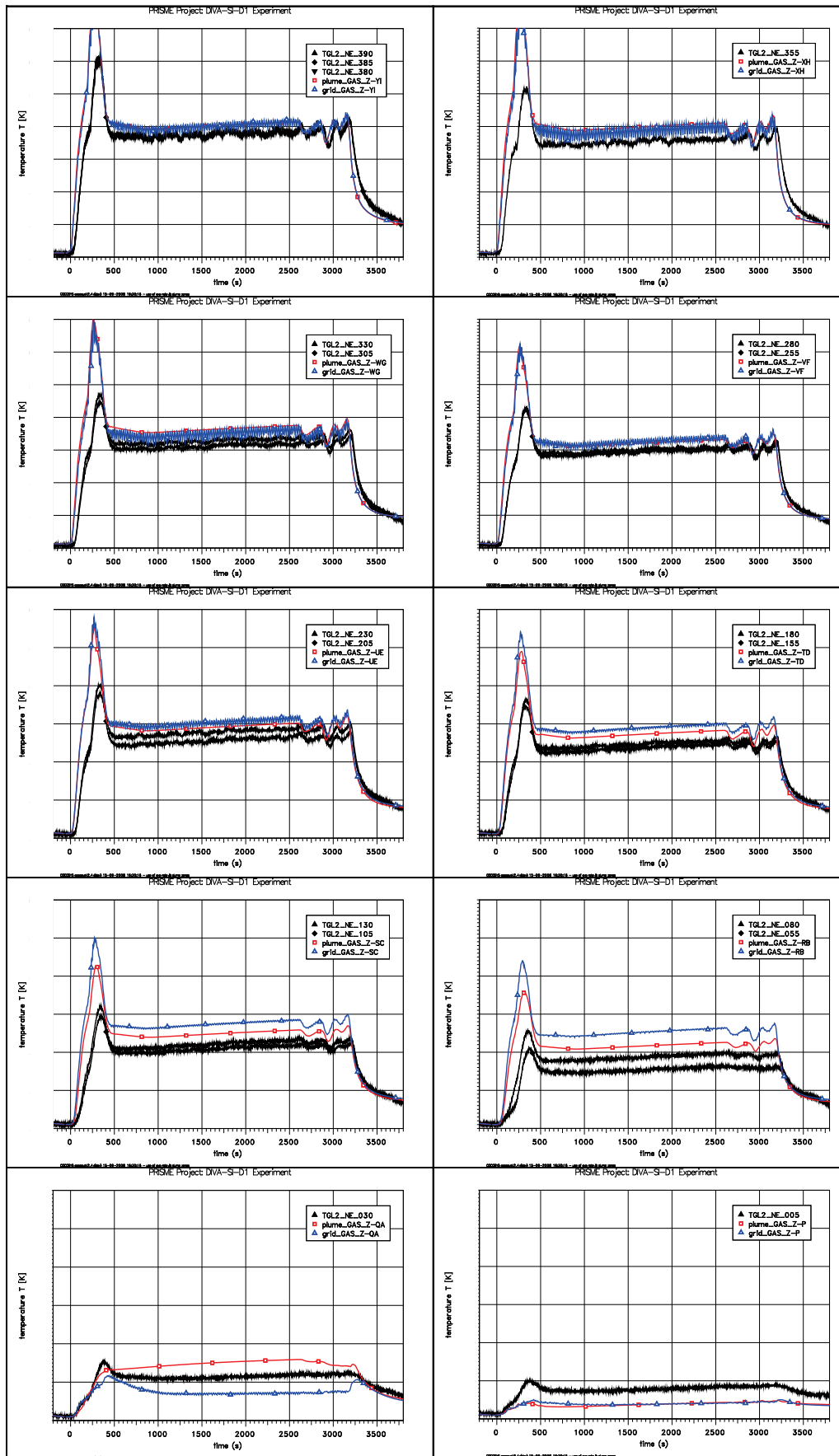


Abb. 4-50 Vergleich der berechneten Raumtemperaturen

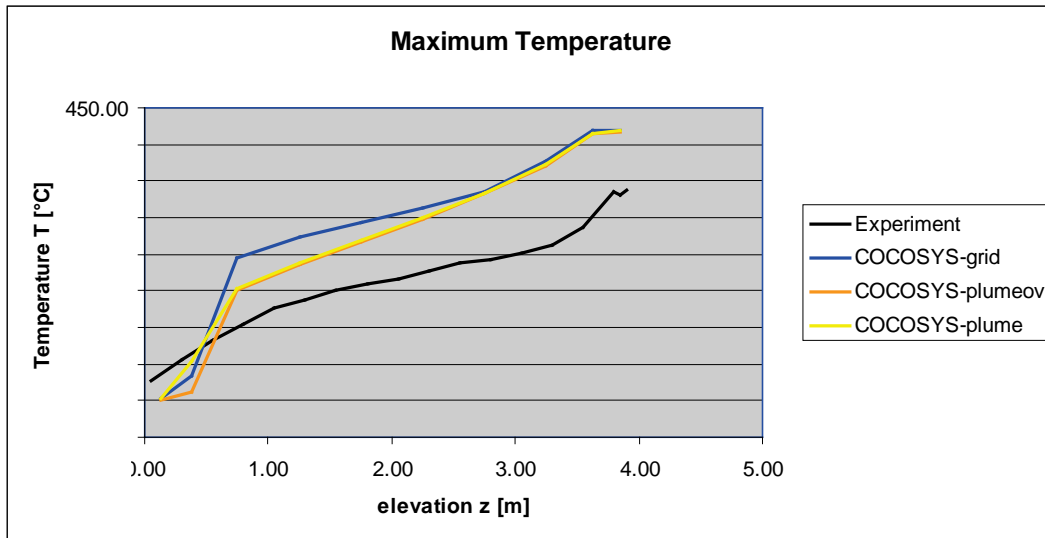


Abb. 4-51 Temperaturprofil der maximalen Temperaturen

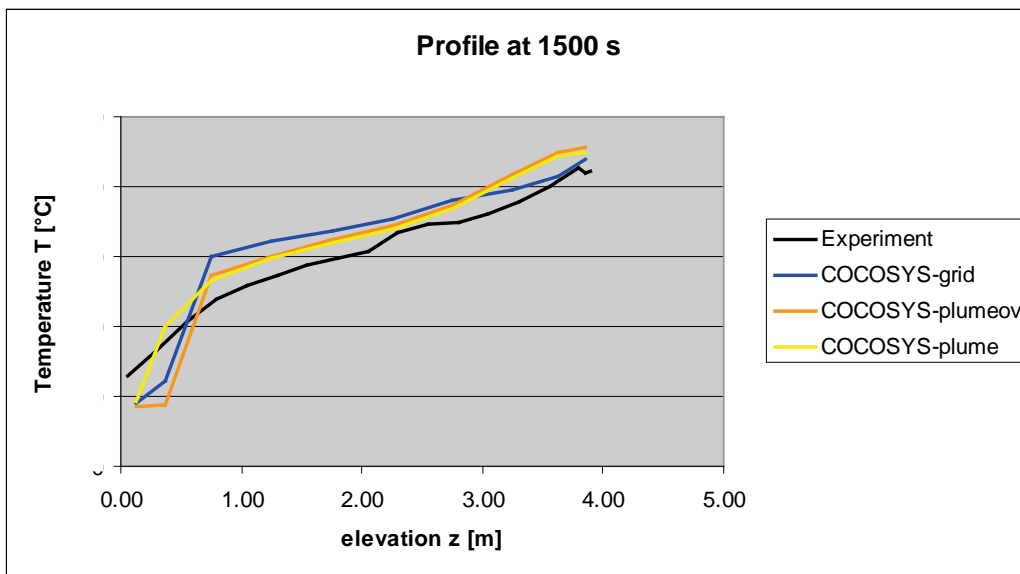


Abb. 4-52 Temperaturprofil bei 1500 s (stationäre Phase)

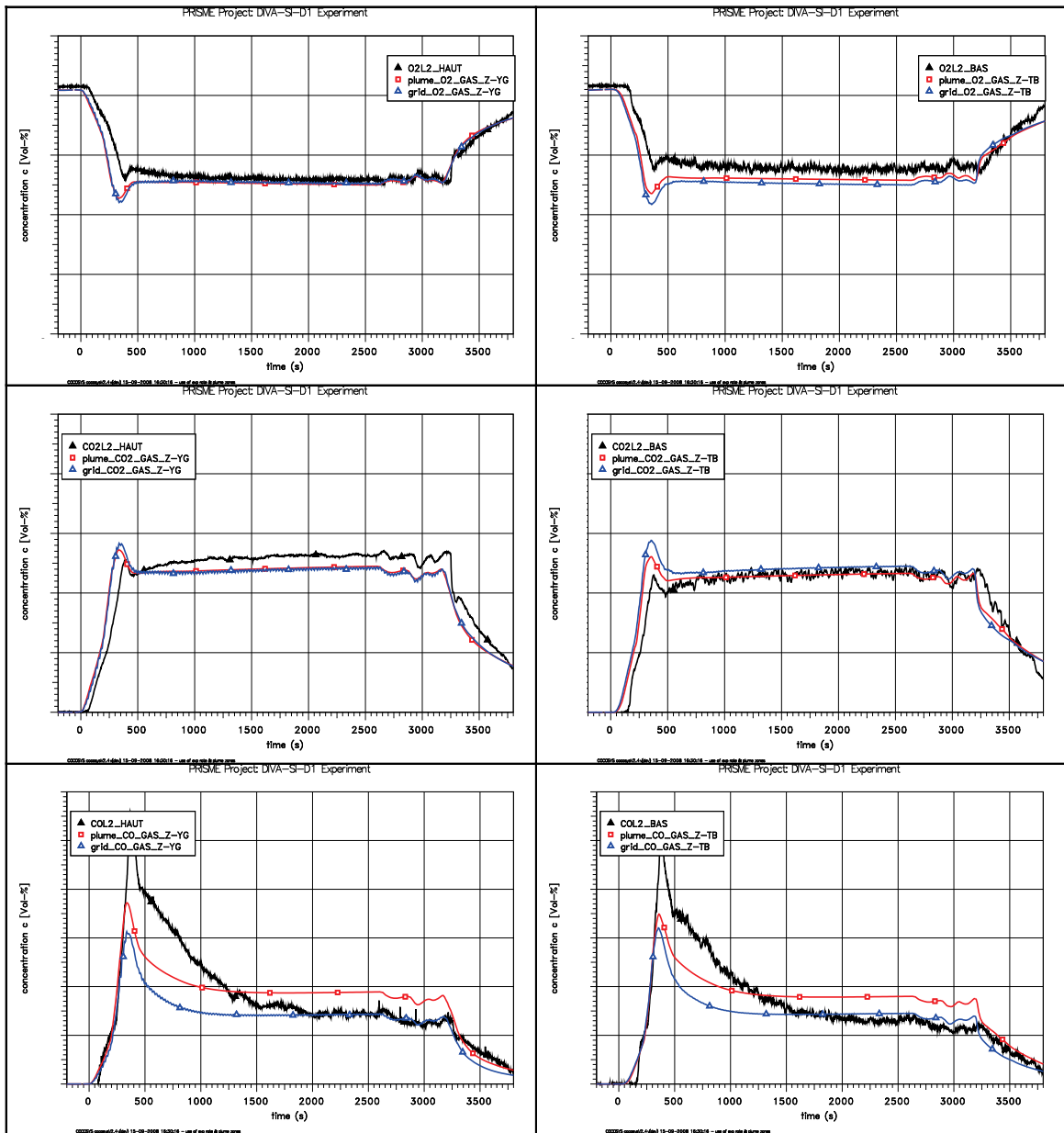


Abb. 4-53 Vergleich der Gaskonzentrationen

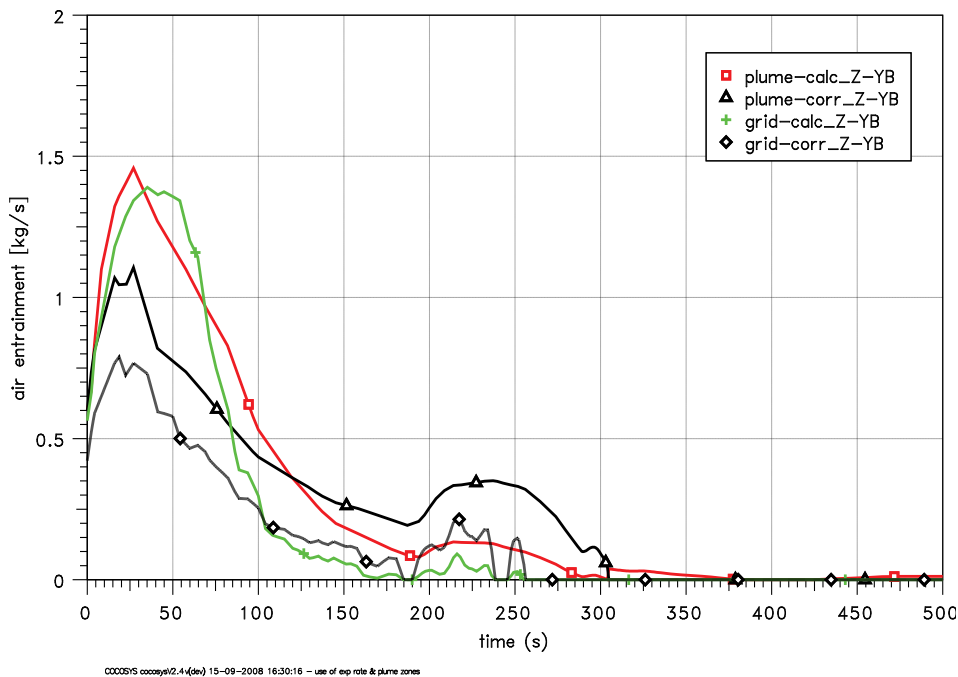


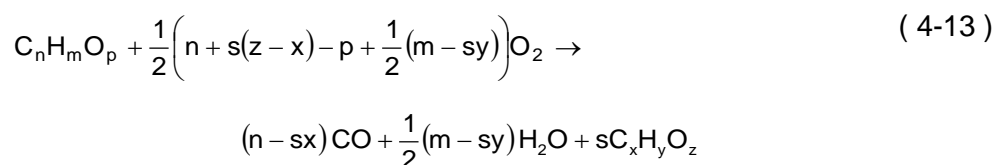
Abb. 4-54 Vergleich der Entrainmentrate

4.2.3 Modellierung der Rußproduktion und -ausbreitung

In Zonenmodellen wie CFAST, MAGIC und 'lumped parameter'-Programmen werden üblicherweise keine deterministischen Modelle zur Berechnung der Rußentstehung verwendet. Vielmehr muss durch den Anwender dieser Programme ein Faktor zur Rauchausbeute vorgegeben werden. In Pyrolysemodell von COCOSYS wird die chemische Zusammensetzung des Brandgutes per Eingabe vorgegeben. Entsprechendes gilt nun auch für den Rauch. Ferner ist es nun möglich eine von der Sauerstoffkonzentration abhängige molare Rauchausbeute s als Tabelle vorzugeben.

$$s = \frac{r_{\text{soot}}}{r_{\text{fuel}}} \left[\frac{\text{kmol}}{\text{kmol}} \right] \quad (4-12)$$

Die Reaktionsgleichung für die Kohlenwasserstoffe (CHX) ändert sich nun entsprechend



In vielen Programmen wird die Rauchausbeute y_s auf Basis der erzeugten und verbrannten Masse bezogen. Die Beziehung beider Eingabegrößen ist gegeben durch:

$$y_s = \frac{\dot{m}_{\text{soot}}}{\dot{m}_{\text{fuel}}} = s \frac{M_{\text{soot}}}{M_{\text{fuel}}} = s \frac{12x + y + 16z}{12n + m + 16p} \quad (4-14)$$

Ferner ändert sich durch die unvollständige Verbrennung die Wärmefreisetzung. Dies kann durch Vorgabe eines entsprechenden Korrekturfaktors f_s für die Reaktionswärme berücksichtigt werden. Im COCOSYS User Manual werden Hinweise zur Bestimmung des Faktors f_s gegeben.

4.2.4 Test des Rußmodells anhand des PRISME-SI-D3 Experiments

Im Vorfeld des OECD PRISME Projekts wurden zahlreiche Vorversuche zum Verhalten von Poolbränden in der DIVA-Versuchsanlage durchgeführt /AUD 07/. Im Rahmen des COCOSYS Validierungsvorhabens wurden diese Versuche zum Testen des Plumemodells verwendet. Im Folgenden werden die Ergebnisse im Hinblick auf die Modellierung des Rußverhaltens dargestellt. Dieser Versuch eignet sich deshalb besonders gut, da hier auch in der Ablagerungsphase nach Ende des Brandes Messdaten vorliegen.

Der Versuchsaufbau und -ablauf ist analog zu SI-D1. Lediglich die Luftwechselrate wurde auf 1,5/h reduziert. Entsprechend zu SI-D1 wurden die Verlustbeiwerte in den Ventilationsleitungen den Versuchsrandbedingungen angepasst. (Abb. 4-55, Abb. 4-56).

PRS_SI_D3
Benchmark

Map for relative static pressures and volume flow rates

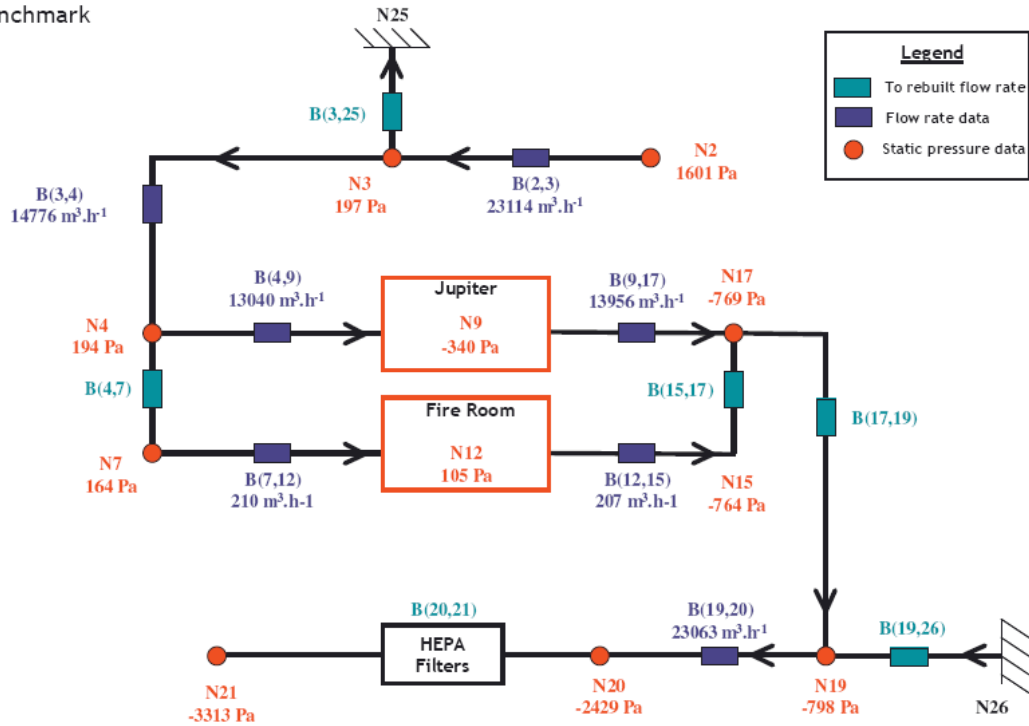


Abb. 4-55 Schema des Ventilationsystems

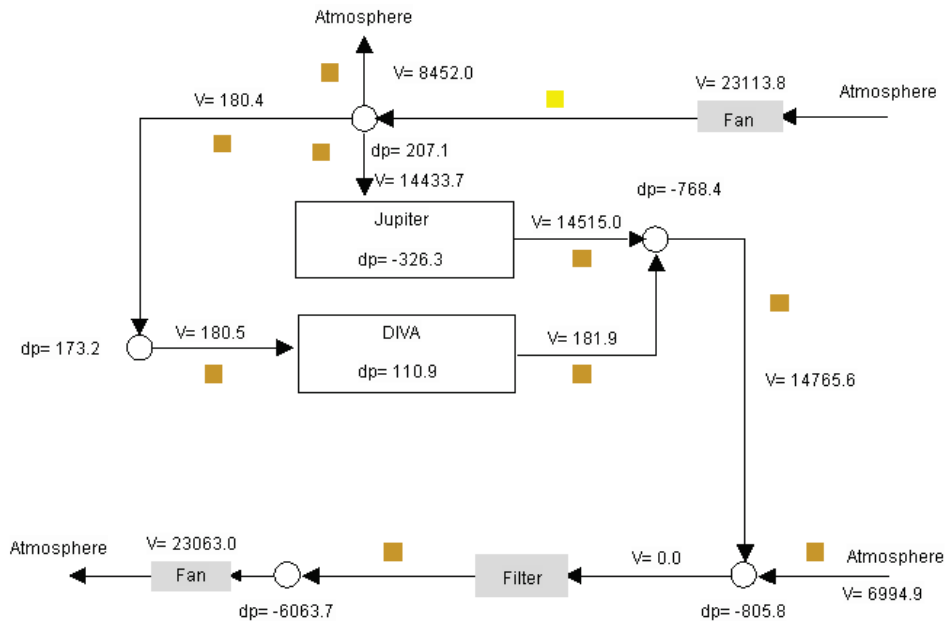


Abb. 4-56 Simulation des Ventilationsystems mit COCOSYS

Durch die geringe Luftwechselzahl von $1,5 \text{ h}^{-1}$ erlischt der Brand bei ca. 390 s von selbst aufgrund von Sauerstoffmangel. Im weiteren Verlauf nach dem Erlischen des Brandes wird die Ventilationsrate erhöht. In COCOSYS wurde daher die Möglichkeit dafür geschaffen, zeitabhängige Zeta-Werte vorzugeben.

Abb. 4-57 zeigt die Abbrandrate für den Versuch SI-D3. Nach einem Anstieg der Abbrandrate ähnlich zu einem offenen Brand sinkt diese wieder aufgrund des Sauerstoffmangels im Brandraum.

Zu diesem Versuch wurden mehrere Rechnungen durchgeführt. Die Rechnung ohne Verwendung von Plumezonen wird als 'grid' bezeichnet und in blauen Kurven dargestellt. Die Rechnung mit Plumezonen wird als 'plume' bezeichnet und in roten Kurven dargestellt. Die schwarzen Kurven zeigen Messergebnisse.

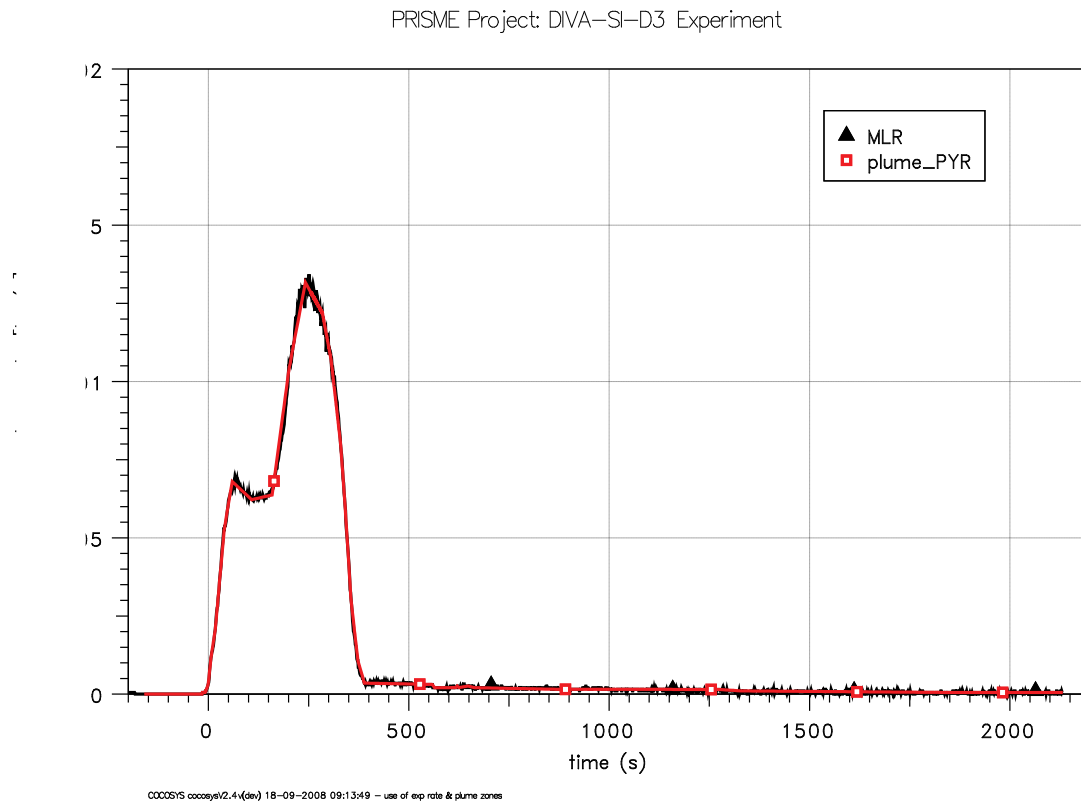


Abb. 4-57 Abbrandrate im SI-D3 Experiment (MLR)

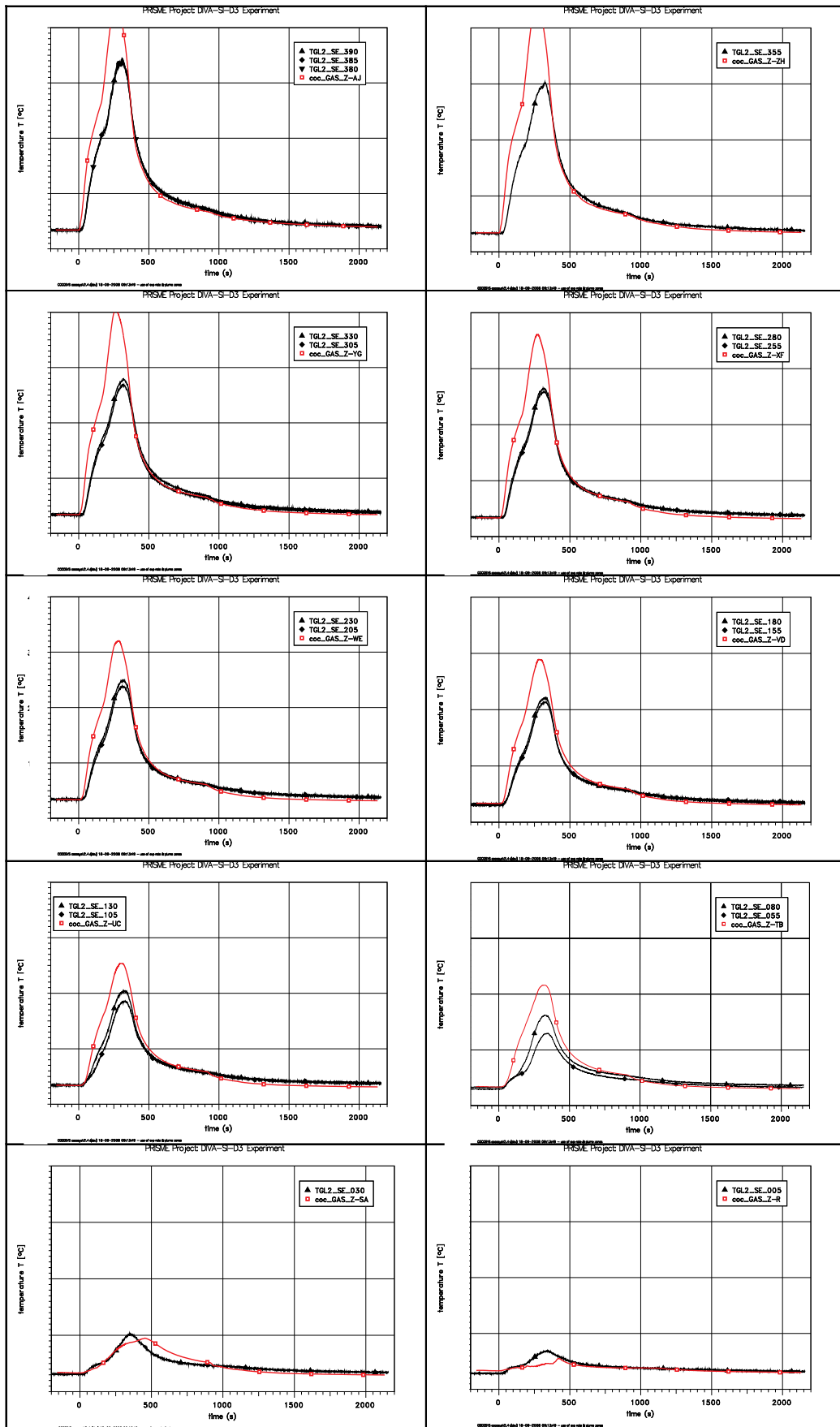


Abb. 4-58 Vergleich der Temperaturen im Brandraum für Versuch SI-D3

Abb. 4-58 zeigt den Vergleich der Temperaturen im Brandraum. In der Rechnung werden die Temperaturen im oberen Bereich um ca. 100 K überschätzt, obwohl die spezifische Wärmefreisetzung im Vergleich zu anderen Versuchen in der DIVA-Anlage nur 39 MJ/kg beträgt. Die Konzentrationsverläufe von Sauerstoff, CO₂ und CO werden in Abb. 4-59 wiedergeben. Insgesamt ist die Abweichung zwischen Rechnung und Experiment relativ gering. Ein Schwerpunkt der Experimente ist die Rückwirkung des Brandes auf das Ventilationssystem. In Abb. 4-60 sind einige Ergebnisse dargestellt. Damit ist gezeigt, dass COCOSYS mit Hilfe von zusätzlichen Knoten das Ventilationssystem gut simulieren kann.

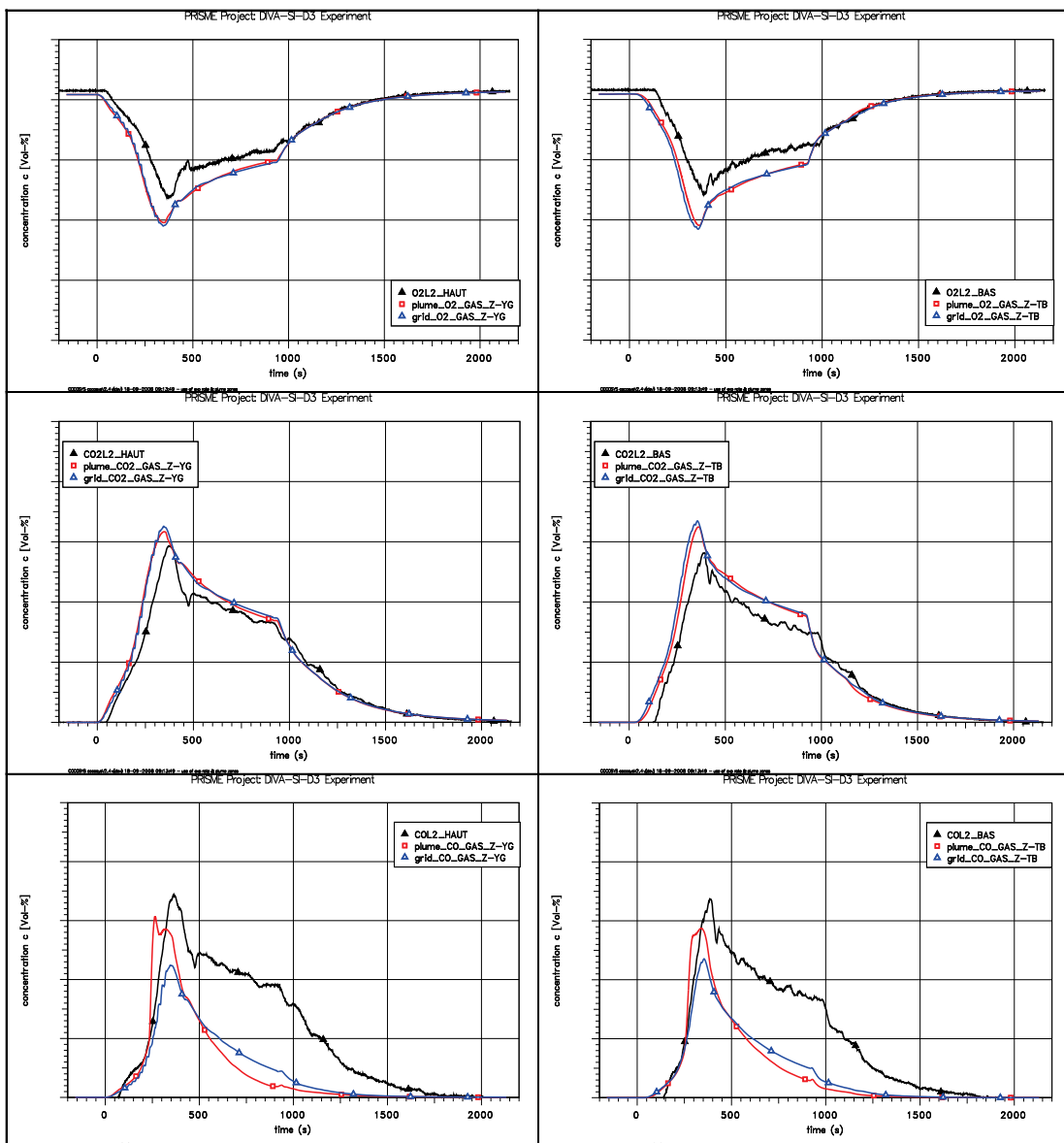


Abb. 4-59 Vergleich der Gaskonzentrationen für Versuch SI-D3

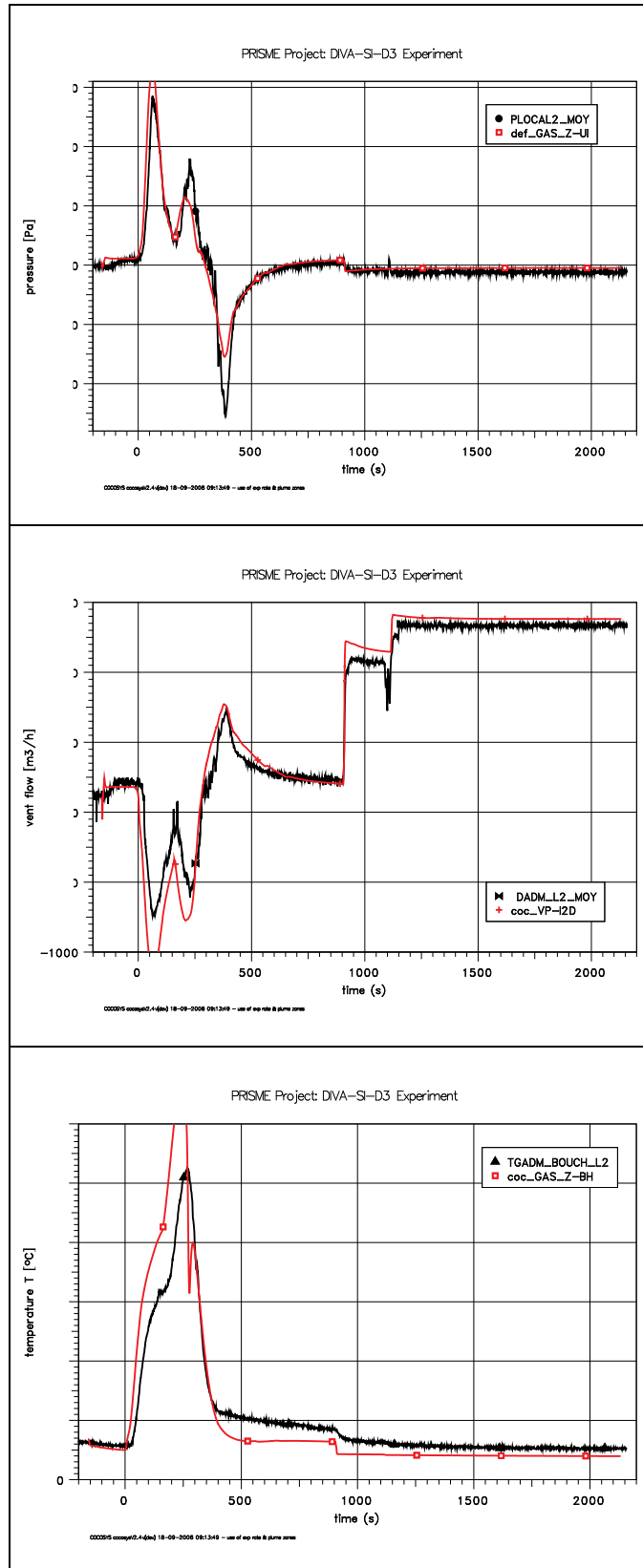


Abb. 4-60 Verhalten des Ventilationssystems im Versuch SI-D3

Abb. 4-61 zeigt den Vergleich der berechneten Rußkonzentrationen oben und unten im Brandraum und im Abluftschacht mit den Messergebnissen. Nachdem der Faktor für die Rauchausbeute (auch anhand von Versuchen aus der PRISME-DOOR Serie) angepasst wurde, stimmen die Ergebnisse gut mit der Messung überein. Dies gilt vor allem auch für den Zeitraum nach Ende der Verbrennung. Die hohen Volumenströme im Abluftschacht führen allerdings in der Rechnung zu Instabilitäten (rote Kurve). Hier besteht noch Verbesserungsbedarf.

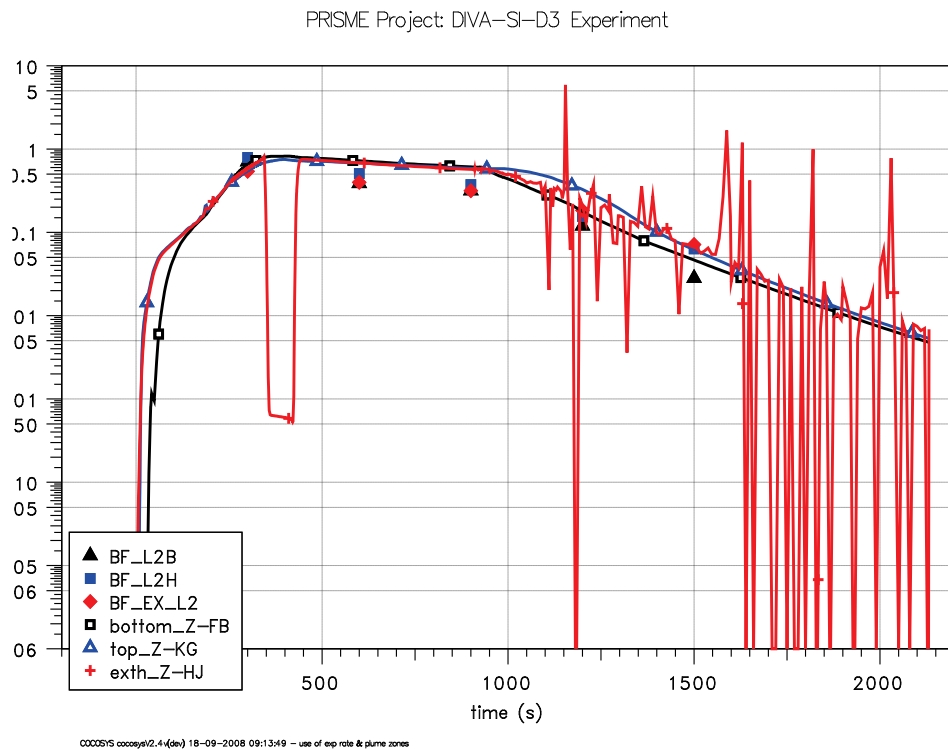


Abb. 4-61 Vergleich der Rußkonzentrationen im Versuch SI-D3

4.2.5 Analyse von Ansätzen zur Behandlung korrosiver Chemikalien

Bisher wurden die korrosiven Eigenschaften des bei der Verbrennung von bestimmten Kabelmaterial freiwerdenden HCl, also die Anlagerung an vorhandene Strukturen, nicht berücksichtigt. Es wurde untersucht, inwieweit dies Einfluss auf die Gaszusammensetzung am Brandort hat.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden existierende Modelle, wie z. B. in CFAST /JON 05/, analysiert. Die untersuchten Modelle (/GAL 89/, /GAL 90/) betrachten den Transport des HCl durch eine Grenzschicht an der Wand zur Wandoberfläche. Dabei wird angenommen, dass die HCl-Konzentration in der Grenzschicht im Gleichgewicht

mit der Wandoberflächenkonzentration entsprechend einer Gleichgewichtskonstanten k_e steht. Das an der Wand angelagerte HCl dringt dann im nächsten Schritt tiefer in die Wand ein.

Modellbeschreibung

Damit ergeben sich folgende Gleichungen:

- Transport des HCl zur Grenzschicht:

Dabei wird die sogenannte Reynolds-Analogie genutzt. Für den Transportkoeffizienten wird $k_c = \frac{\alpha}{\rho_{\text{gas}} c_p}$ angenommen. α : Wärmeübergangskoeffizient [$\text{W}/\text{m}^2\text{K}$],

ρ_{gas} : mittlere Gasdichte im Gasraum. Die Massenstromdichte ergibt sich dann zu

$$g_{\text{bg}} = k_c (\rho_g - \rho_b)$$

mit der Dichte des HCl im Gasraum ρ_g und in der Grenzschicht ρ_b .

- Gleichgewichtszustand zwischen Grenzschicht und Wandoberflächendichte:

Es wird angenommen, dass das HCl in der Grenzschicht immer im Gleichgewicht zur an der Wandoberfläche angelagerten HCl steht: $\rho_b k_e = d_s$ mit der Wandoberflächendichte d_s [kg/m^2] und der Gleichgewichtskonstanten k_e . Die Gleichgewichtskonstante setzt sich aus zwei Faktoren zusammen /GAL 90/ mit den materialspezifischen Koeffizienten $b_1 \dots b_7$:

$$k_e = \frac{b_1 e^{\frac{1500}{T_w}}}{1 + b_2 e^{\frac{1500}{T_w}} \rho_{\text{HCL}}} \left(1 + \frac{b_5 (\rho_{\text{H}_2\text{O}})^{b_6}}{(\rho_{\text{H}_2\text{O,sat}} - \rho_{\text{H}_2\text{O,g}})^{b_7}} \right)$$

Der erste Faktor basiert auf dem Langmuir-Absorptionsmodell, welches die physikalische Absorption der Spezies bei niedrigem Partialdrücken adäquat beschreibt. Der zweite Term berücksichtigt die erhöhte Kapazität, HCl unter feuchten Randbedingungen zu speichern. $\rho_{\text{H}_2\text{O,sat}}$ beschreibt dabei die Sättigungsdichte eines HCl-Dampf-Gemisches. Entsprechend /GAL 89/ wird diese durch

$$\rho_{\text{H}_2\text{O,sat}} = \frac{18 \cdot \left(8,4041 \cdot 10^5 - 8,7209 \cdot 10^4 \ln \left(\frac{p_{\text{HCL}}}{10} \right) + 2,9849 \cdot 10^4 T_c + 761,67 T_c^2 + 34,202 T_c^3 \right)}{1000 \cdot R (T_c + 273,15)}$$

mit dem HCl Partialdruck p_{HCl} [Pa], der Wandtemperatur T_c [$^{\circ}\text{C}$] berechnet.

- Transport des HCl in die Wand:

Für die Beschreibung dieses Transportvorganges wird ein Arrhenius-Ansatz verwendet

$$k_s = b_3 e^{\frac{b_4}{RT_w}}$$

Testbeispiel

Das implementierte Modell wurde zunächst anhand eines einfachen Testbeispiels überprüft. Leider ist die Beschreibung in /GAL 89/ nur sehr rudimentär, so dass ein direkter Vergleich nicht möglich ist. In dem Testbeispiel wird in einem Raum von ca. 10 m³ und einer Wandoberfläche von 30 m² (Gipswände) eine Anfangskonzentration von 3000 ppm HCl angenommen. Die Dampfpartialkonzentration wird im Fall (a) mit 0,5 % und im Fall (b) mit 2 % angenommen. Die Temperatur beträgt 40 °C. Weiterhin wird der Wärmeübergangskoeffizient mit $\alpha = 9,32$ [W/m²K] angenommen, um Werte für k_c zu erhalten, die auch in /GAL 89/ verwendet wurden.

Abb. 4-62 zeigt das Verhalten der HCl-Konzentrationen (schwarze Kurven) für beide Fälle. Die Halbwertszeit beträgt für den Fall (a) ca. 300 s und für den Fall (b) ca. 100 s. In /GAL 89/ werden Werte von ca. 1600 s und 220 s angegeben. Da aber die Randbedingungen, insbesondere die Gesamtoberfläche der Wände, nicht bekannt ist, können die Werte nur zur Orientierung genommen werden.

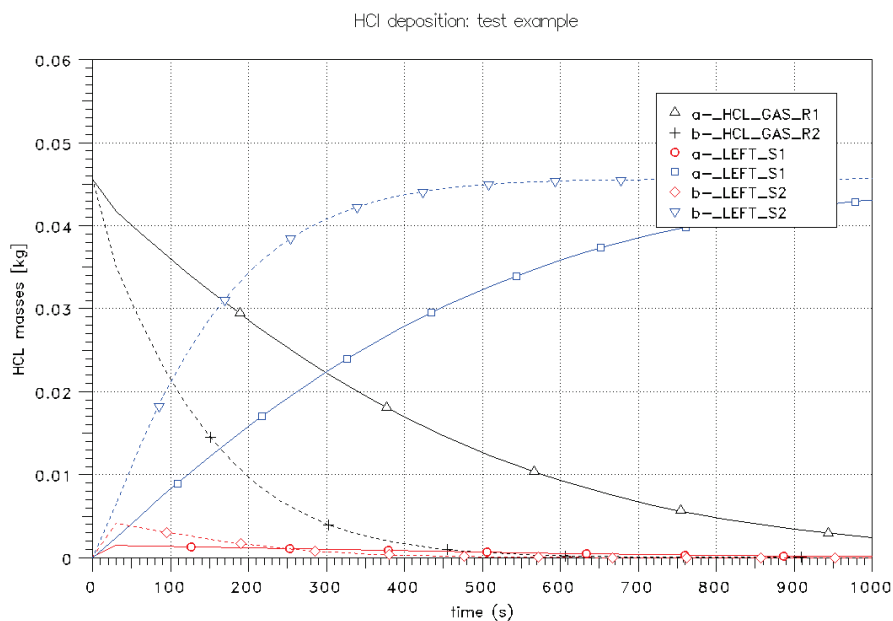


Abb. 4-62 HCl-Deposition an Wandoberflächen

Anwendung anhand HDR E42.2 Versuch

Um den Effekt der HCl-Deposition anhand eines realen Beispiels zu testen, wurde die Rechnung zum HDR-Versuch E42.2 wiederholt. Details zu diesen Versuchen sind in /ALL 07/ beschrieben. Im Folgenden werden einige exemplarische Ergebnisse gezeigt. Die Abbrandrate der Kabel war in diesem Versuch sehr hoch, so dass dieser Versuch bei ca. 850 s abgebrochen wurde (Aktivierung des Sprinklersystems). Die Simulation dieses Versuchs mit dem vereinfachten Kabelbrandmodell ist nur bedingt möglich und führt zu einer gewissen Abweichung mit den experimentellen Daten. Allerdings steht in dieser Vergleichsrechnung der Effekt der HCL-Anlagerung an Wänden im Vordergrund.

Abb. 4-63 zeigt den Vergleich des Temperaturverlaufs im oberen Bereich des Brandraumes. Wie zu erwarten, werden in beiden Fällen gleiche Temperaturen berechnet. Auch der Einfluss auf andere Gaskonzentrationen im Brandraum ist relativ gering. Lediglich die HCl-Konzentration (orange Kurve) ist mit Berücksichtigung der HCl-Anlagerung an den Wänden etwas geringer. Im Flurbereich, werden allerdings die Effekte deutlicher, da einerseits außerhalb des Brandraums keine HCl-Quelle (brennende Kabel) vorhanden ist und die entlang des Strömungspfad „verfügbare“ Anlagerungsfläche zunimmt. Wie **Abb. 4-65** zeigt, liegt der Unterschied hier im Prozentbereich.

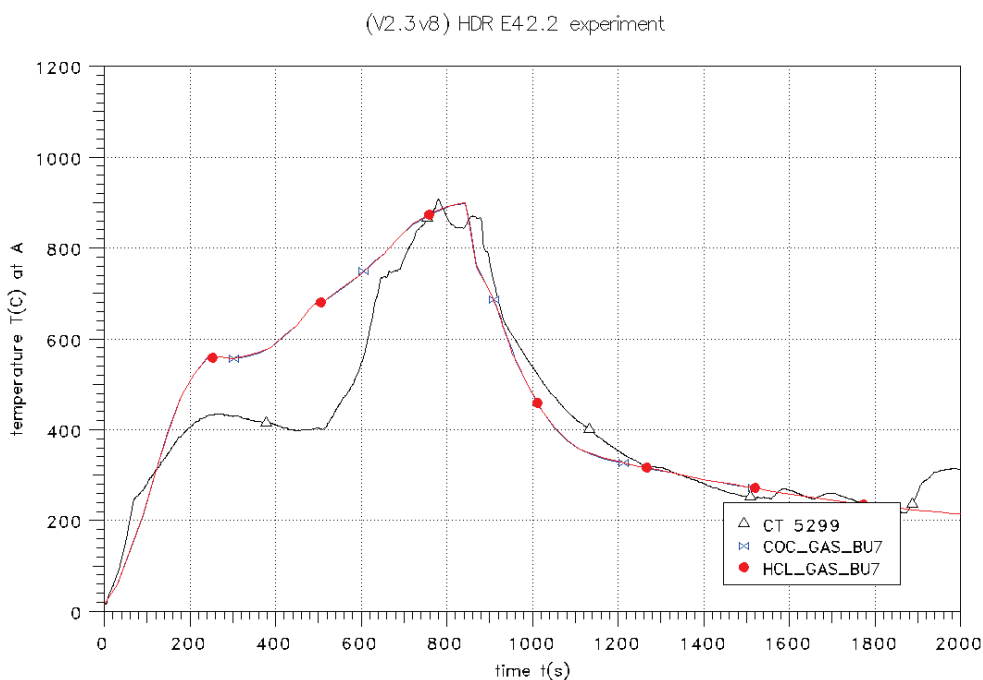


Abb. 4-63 HDR E42.2: Vergleich der Temperaturen im Brandraum

(V2.3.v8) HDR E42.2 experiment

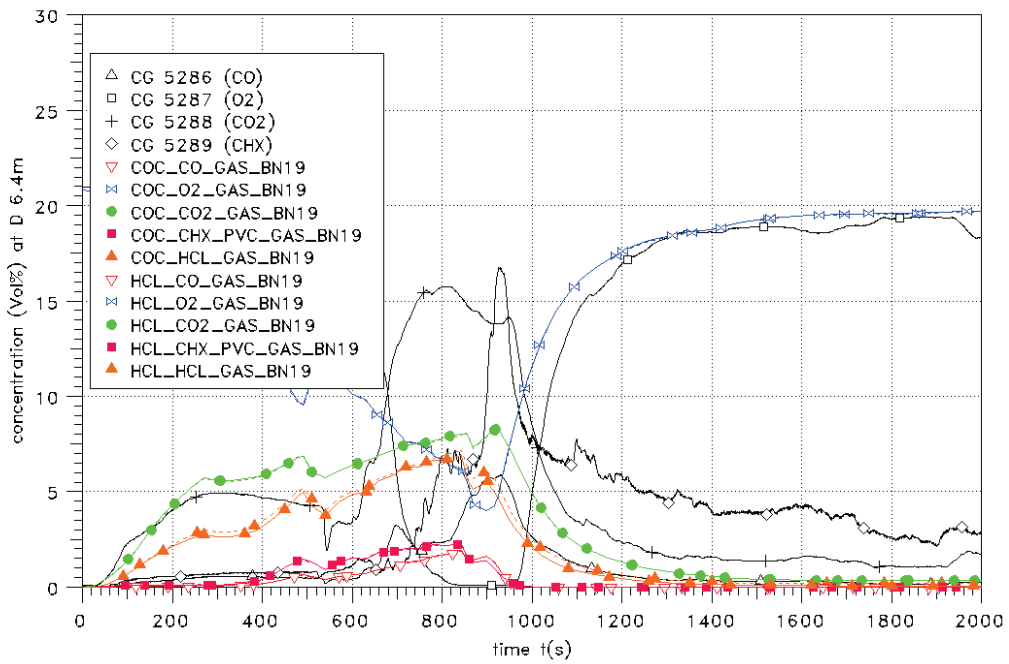


Abb. 4-64 HDR E42.2: Vergleich der Konzentrationen im Brandraum

(V2.3.v8) HDR E42.2 experiment

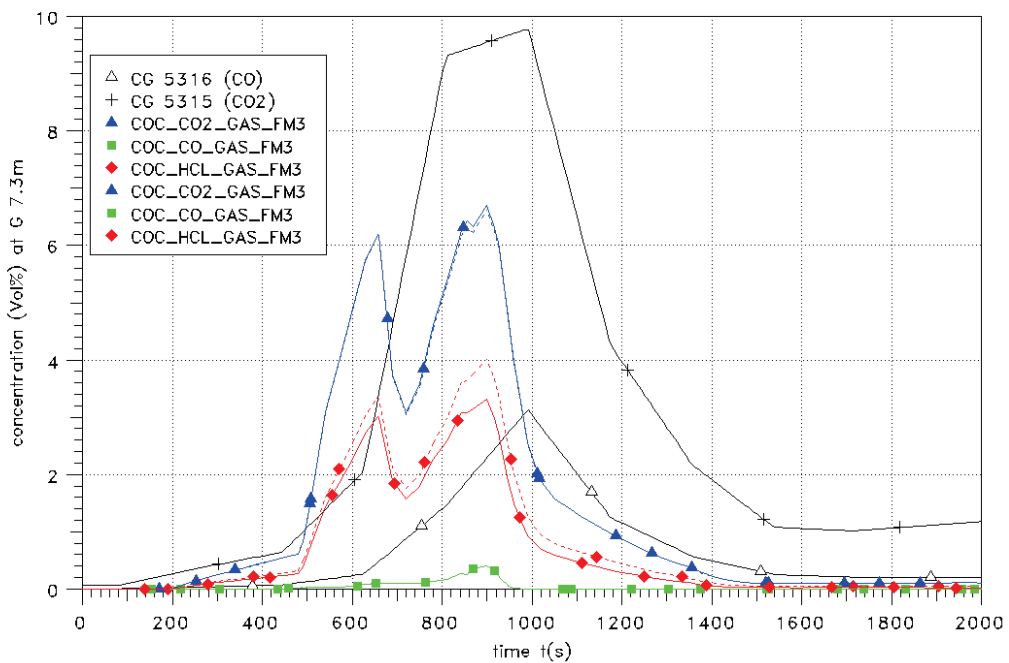


Abb. 4-65 HDR E42.2: Vergleich der Konzentrationen im Flurbereich

Fazit

In COCOSYS wurde ein Modell zur Simulation des korrosiven Verhaltens von HCl als Reaktionsprodukt von Kabelbränden implementiert. Erste Testrechnungen am Beispiel eines HDR-Versuchs wurden erfolgreich durchgeführt. Allerdings sind noch weitere Validierungsrechnungen zu spezifischen HCl-Versuchen notwendig. Unter Umständen muss auch die Datenbasis der verschiedenen Materialien erweitert werden. Die Rückwirkungen auf den Brand selbst sind auch bei großen Bränden gering. Die Auswirkungen dieses Modells machen sich erst in größerer Entfernung zum Brandort bemerkbar. Zur genauen Berechnung der toxischen Situation in Fluchtwegen während eines Brandes mit HCl-Freisetzung sollte dieses Modell allerdings aktiviert werden

5 SWR-Modelle

5.1 Kopplung DRASYS mit SPARC-B

Bei der Anwendung von COCOSYS rückt neben thermohydraulischen Fragestellungen bei Störfällen auch zunehmend das Aerosol- und Spaltproduktverhalten bei Unfallabläufen in den Mittelpunkt der Untersuchungen. Für auslegungsüberschreitende Störfälle (Unfälle) in Siede- und Druckwasserreaktoren mit Druckabbausystemen (SWR-69 und 72, Mark I bis III, RBMK-1000 und 1500, WWER-440/W-213) ist dabei das Auswaschen radioaktiver Aerosole und Spaltprodukte in Wasservorlagen (z.B. der Kondensationskammer bei SWR) von Bedeutung. Dieser Vorgang wird durch das SPARC-B/98 Modell beschrieben (Suppression Pool Aerosol Removal Code), das in das AFP-Hauptmodul von COCOSYS integriert ist. Bisher ist die Kopplung zwischen dem Zonenmodell DRASYS (DRuckAbbauSysteme im Thermohydraulik-Modul THY) und dem 'Pool Scrubbing' Modell (SPARC, im Modul für Aerosole/Spaltprodukte AFP) wie folgt realisiert: Als Schnittstelle wird die an das Kondensationsrohr der DRASYS-Zone angebundene Atmosphärenverbindung verwendet. Die Massenströme und die Zustände dieser Atmosphärenverbindung werden zu SPARC transferiert. Sowohl aus eigenen GRS-Anwendungen als auch aus den Erfahrungen externer Anwender ist bekannt, dass durch diese Kopplung gerade in der Langzeitphase Inkonsistenzen auftreten bzw. insbesondere kleine Massenströme die Ursache für gehäufte Programmabbrüche sind.

Deshalb wurde diese Kopplung überprüft und dahingehend modifiziert, dass die Schnittstelle in der DRASYS-Zone nunmehr die Grenze zwischen dem Rohr- (POOL) und dem Gasraum im Zonenmodell (GASROOM) ist. Diese Änderung in der neuen COCOSYS Entwicklerversion V2.4dev zog auch weitere Modifikationen in den Hauptmodulen THY und AFP nach sich. Dabei wurde auch die Kopplung der vereinfachten Modellierung von Kondensationsrohren (Atmosphärenverbindung in den FLUID-Zonenteil einer Nichtgleichgewichtszone mit VALVE und INSERTION Option) mit SPARC realisiert. Weiterhin wurden die Bedingungen, unter denen eine Berechnung der Aerosol-Rückhaltefaktoren mit SPARC erfolgt, abgeändert. Damit erfolgt jetzt kein Aufruf mehr von SPARC unter solchen Bedingungen, die keinen praktischen Einfluss auf das Aerosolverhalten haben oder im Modell nicht abgedeckt sind und dadurch oftmals zu Programmabstürzen führten.

Zur Prüfung der Programmänderungen wurde eine Reihe von Testrechnungen durchgeführt. Diese Tests beziehen sich auf KKW mit RBMK-Reaktoren, da in der Vergangenheit insbesondere für diese Anlagen bei der COCOSYS-Anwendung Probleme auftraten. Ergänzend dazu wurden Nachrechnungen zu vier Experimenten an der POSEIDON-Versuchsanlage wiederholt und alten Ergebnissen aus der SPARC-Validierung gegenübergestellt. Die entsprechenden Arbeiten sind im Detail in /ARN 08/ beschrieben, wobei wesentliche Punkte im Folgenden dargestellt werden.

5.1.1 Allgemeine Änderungen in SPARC

Im Zusammenhang mit der Überarbeitung der Schnittstelle DRASYS - SPARC wurde eine Reihe von Änderungen bzw. Modellerweiterungen in SPARC-B/98 vorgenommen, die nicht nur für den Fall der Verwendung von DRASYS sondern auch z. B. bei Simulation eines in den Pool eingetauchten Rohres mit der INSERTION-Option für die Strömungsverbindung vom Typ ATM_VALVE in Kombination mit SPARC relevant sind. Dies waren u. a.:

- Bisher war bei der Anwendung von SPARC die Definition der Gaskomponente AIR zwingend erforderlich. Um auch Szenarien ohne Luft rechnen zu können, wurde SPARC entsprechend erweitert. Anforderungen dazu kamen aus der Simulation der Wasserstoffrekombination (Modellierung von Sauerstoff und Stickstoff anstatt Luft) oder aus Analysen zum Bruch von Kühlkanälen in der Reaktorgrube von RBMK-Anlagen, wo das zur Kühlung des Graphitmoderators verwendete Stickstoff/Helium-Gemisch in ein Druckabbausystem abgeblasen wird.
- Als Reaktion auf einen Programmfehler in der Anwenderversion COCOSYS V2.1v3, wo SPARC Dekontaminationsfaktoren (DF) kleiner als 1 berechnete /COC 05/, wurde das Tauchrohrmodell modifiziert. Mit dieser Korrektur wird die nicht zur Bilanz der eingespeisten und durchgelassenen Gasmasse gehörige Anfangsmasse in der am Ende des Tauchrohrs ausgebildeten Blase aus der Massenbilanz entfernt /SCH 05/.
- Insbesondere bei kleinen Massenströmen war SPARC Ursache für gehäufte Programmabbrüche von COCOSYS. Dies trat wiederholt bei der Anwendung auf KKW mit RBMK-1500 auf /ARN 04/. Daraufhin wurde ein Änderungsvorschlag bzgl. der Erhöhung der maximalen Anzahl von Iterationen in SPARC implementiert /SCH 05/. Die weitere Analyse zeigte, dass während der Iteration z. T. negative Dampfmasseanteile berechnet wurden. Nach zusätzlicher Prüfung des Dampf-

massengehaltes, dem Abbruch der Iteration bei falschen Werten und der Wiederholung mit einer verringerten Schrittweite tritt nun kein Fehler mehr auf.

- Der Wasserhöhenstand im Pool und damit die Eintauchtiefe wurden bisher unter Verwendung der Wassermasse und -dichte sowie der Bodenfläche der Zone ermittelt. Dies wurde dahingehend geändert, dass die Eintauchtiefe nun auf Basis der im Thermohydraulik-Hauptmodul berechneten Wasserhöhe bestimmt wird. Werden im Thermohydraulik-Hauptmodul unregelmäßige Formen der Zone durch Vorgabe von Tabellen für das Wasservolumen als Funktion des Wasserhöhenstandes simuliert, dann wird dies in SPARC automatisch mit berücksichtigt.
- Das Freilegen der Einspeisedüse ist im DRASYS-Zonenmodell nicht berücksichtigt und führt zum Programmstopp (z. B. ein Abfall des Wasserstandes in einer Zone bis unterhalb des Endes eines Kondensationsrohres). Dies entspricht in SPARC einer Eintauchtiefe $SUBXT < 0$, so dass hier ebenfalls ein Fehler ausgegeben wird. Eine Ausnahme hiervon ist die Simulation eines in den Pool eingetauchten Rohres mit der INSERTION Option für die Strömungsverbindung vom Typ ATM_VALVE. Hier wird im Thermohydraulik-Modul bei Unterschreiten einer Eintauchtiefe kleiner als der Rohrradius eine abnehmende Kondensation und bei Freilegung der vollständige Bypass der Wasservorlage berücksichtigt. In SPARC wird vereinfachend entweder die Aerosolrückhaltung berechnet bzw. ein völliger Bypass angenommen.
- Im Rahmen der Arbeiten wurde weiterhin der Quellcode von SPARC modernisiert:
 - komplette Umstellung auf doppelt genaue REAL-Zahlen,
 - Umstellung auf explizite Definition aller verwendeten Variablen,
 - Umwandlung aller noch verwendeten COMMON-Blöcke mit SPARC-spezifischen Variablen in MODULE.

5.1.2 Änderungen der Schnittstelle DRASYS - SPARC

Um die Probleme bei der Kopplung von DRASYS und SPARC zu lösen, wurden die für Atmosphärenverbindungen im Thermohydraulik-Modul berechneten Massen- und Volumenströme im speziellen Fall der Einströmung in das Kondensationsrohr einer DRASYS Zone durch die vom Kondensationsrohr in den Pool ausströmende Gasmasse ersetzt (siehe Abb. 5-1). Diese Gasmassenströme werden intern in der

DRASYS Zone in Abhängigkeit von den Modellen für Gasüberspülung und Dampfkondensation berechnet (LAIMO und LCOMO, siehe /KLE 00/). Dadurch ist das Auftreten einer negativen Gasströmung, d. h. aus dem Pool zurück in das Kondensationsrohr, nicht möglich.

In verschiedenen Teilen des AFP Hauptmoduls wurde bisher eine verbindungsbezogene Volumenaustauschrate der Zonenatmosphäre (AEANTL, in s^{-1}) verwendet. Dieser Wert wurde in allen Unterprogrammen durch die aktuellen Volumenströme (VIFVOL und VOFVOL) und das freie Gasvolumen der Zonen ersetzt.

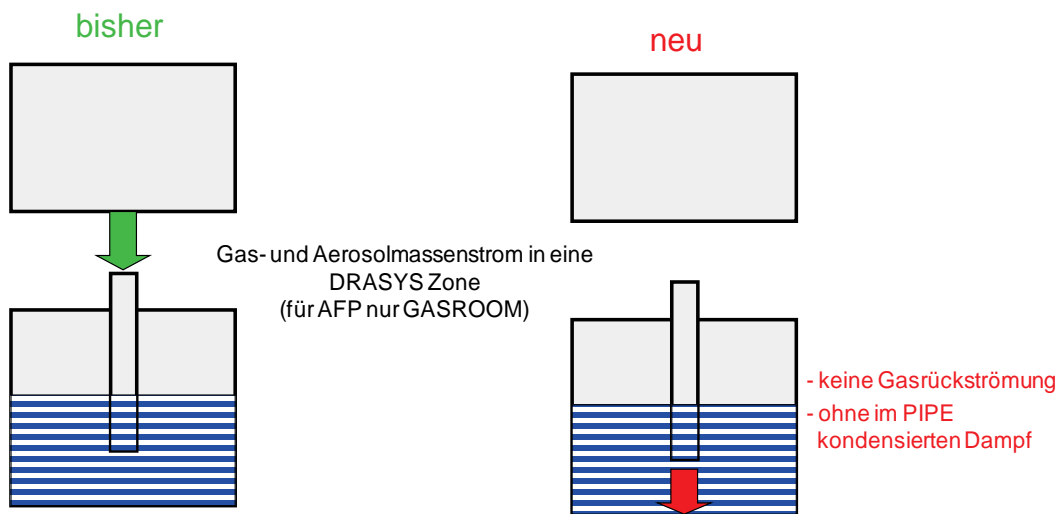


Abb. 5-1 Änderung der Schnittstelle zwischen DRASYS und SPARC

5.1.3 Modifikation der Kriterien für den Aufruf von SPARC

Der Aufruf von SPARC zur Bestimmung der Aerosolrückhaltefaktoren erfolgt nur bei Erfüllung einer Reihe von Kriterien. Diese resultieren aus grundlegenden Vereinfachungen des SPARC Modells. Eine Erweiterung von SPARC mit dem Ziel, diese Einschränkungen zu beseitigen, ist nur mit erheblichem Aufwand zu verwirklichen und erfordert u. a. auch neue Versuche. Diese Kriterien wurden mit dem Ziel der Vermeidung von extremen Randbedingungen und damit der Reduzierung von Programmabbrüchen aufgrund numerischer Probleme abgeändert.

Bei z. B. sehr kleinen Gas- und Aerosolmassenströmen ist die Berechnung der Dekontaminationsfaktoren irrelevant, weil es praktisch keine Auswirkungen auf die Aerosolverteilung gibt. Die Rückhaltung wird deshalb unter diesen Randbedingungen konservativ behandelt, d. h. keine Aerosolrückhaltung ($DF = 1$). Zur neuen Abschätzung der

Schwellenwerte wurden Daten für einen typischen Reaktorstörfall herangezogen. Somit sollten Anlagenrechnungen oder die Nachrechnung von Experimenten (Messdaten i. A. nicht kleiner als 10^{-7} kg/m³) davon nicht beeinflusst werden.

Die aktuellen Kriterien für den Aufruf von SPARC sind in /ARN 08/ im Einzelnen aufgelistet. Bei einer normalen Rechnung ist der neue Parameter I_SRC als SPARC-Rückkehrcode im Print Output bzw. im Plotfile gleich Null. Für den Fall, dass keine SPARC-Rechnung erfolgt, wird abhängig vom Grund $I_SRC > 0$ gesetzt. Bei Verletzung von wesentlichen Randbedingungen wird zusätzlich eine Fehlermeldung im Print Output des AFP Hauptmoduls generiert und $I_SRC < 0$ gesetzt. Die Berechnung der Dekontaminationsfaktoren erfolgt in jedem AFP-Zeitschritt pro Pool Scrubbing Verbindung einmal, d. h. der Dekontaminationsfaktor ist über diesen Zeitschritt konstant.

Eine Modellannahme in SPARC ist, dass das einströmende Gas vorwiegend aus nicht kondensierenden Komponenten besteht. Weiterhin wird beim anfänglichen Kontakt mit dem Pool eine sofortige Einstellung des thermischen Gleichgewichts berechnet. Aufgrund dieser Annahmen ist es nicht möglich, eine reine Dampfströmung oder einen siedenden Pool zu simulieren. Auch für sehr große Dampfanteile sind die Modellannahmen unzutreffend /FIS 98/. Um Programmabbrüche zu verhindern, werden diese Fälle jetzt vereinfachend ohne den Aufruf von SPARC behandelt (vollständige Aerosolrückhaltung bei nahezu reiner Dampfströmung, keine Aerosolrückhaltung im Wasserpool bei Annäherung an Sättigungsbedingungen ($T_{\text{pool}} > (T_{\text{sättigung}} - 3 \text{ K})$).

Eine spezielle Änderung betrifft die Rückhaltung von Wasseraerosol. Begründet durch vereinfachende Modellannahmen in SPARC werden in der Schnittstellenroutine der Aerosolmassenstrom und die Aerosolkonzentration in der Startzone ohne eventuell auftretendes Wasser (WATER Aerosol) übergeben. Die von SPARC berechnete Größenklassen-abhängige, Aerosolkomponenten-unabhängige Rückhaltung wird dann auf alle Aerosole inklusive Wasser angewendet. In einer Testrechnung führte dies aber zu nichtkonservativen Ergebnissen hinsichtlich der atmosphärischen Aerosolkonzentration nach der Wasservorlage. Hier bewirkte das den Pool passierende "Wasseraerosol" eine schnellere Ablagerung aller Aerosolkomponenten. Daraufhin wurde für spezielle Randbedingungen (z. B. sehr kleiner Massenstrom der nichtkondensierbaren Gase und damit nahezu reine Dampfströmung) abweichend zu den anderen Aerosolkomponenten die vollständige Rückhaltung des Wasser definiert. Im Normalfall hat das keine Auswirkungen, da von den radioaktiven Spaltprodukten Restwärme frei wird und die

Aerosolpartikel damit trocken sind. Lediglich in Rechnungen mit vernachlässigter Restwärme oder für Experimente ist dies von gewisser Bedeutung.

5.2 Testrechnungen zur Überprüfung der modifizierten Kopplung DRASYS - SPARC

Testrechnungen zur Überprüfung der Änderungen an den Kriterien für den SPARC-Aufruf und an der Schnittstelle DRASYS - SPARC sowie zu speziellen Fragestellungen konnten nicht zu einer deutschen Siedewasseranlage (SWR 69 oder 72) durchgeführt werden, da ein entsprechender COCOSYS-Datensatz, der sowohl Thermohydraulik als auch Aerosol- und Spaltproduktmodelle inklusive SPARC enthält, gegenwärtig noch nicht vorliegt. Arbeiten dazu sind im neuen COCOSYS-Validierungsvorhaben geplant. Zur Überprüfung der Programmmodifikationen wurde deshalb ein verfügbarer RBMK-1500 Datensatz genutzt. Der Eingabedatensatz wurde im Rahmen eines BMU-Projektes für das KKW Ignalina-2 (RBMK-1500) erstellt /WEB 00/. Der simulierte Störfall ist der Bruch eines Drucksammlers im Raum PBB5 (Abb. 5-2). In den hier durchgeführten Rechnungen wurde als Aerosol die Spezies AECOMP über 0,1 s mit 0,5 kg/s eingespeist.

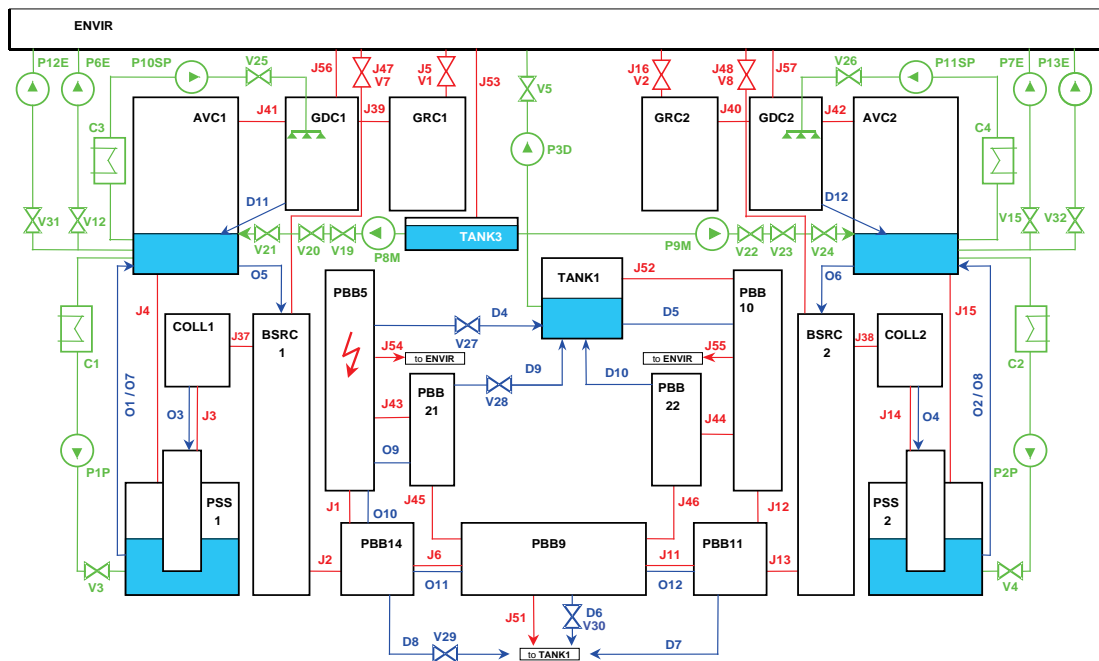


Abb. 5-2 KKW Ignalina-2, Bruch eines Drucksammlers, Nodalisierung mit 22 Zonen

Beim Druckaufbau strömt das Gasgemisch vom Freisetzungsort in den linken und rechten Kondensationsturm (PSS1 und PSS2), wo der Dampfanteil kondensiert und die nicht kondensierbaren Gase über die nachgelagerten Räume in die Umgebung abströmen. Die Öffnungen in die Umgebung (J5 und J16) werden nach 300 s geschlossen.

Von besonderem Interesse sind hier die Kondensationstürme PSS1 und PSS2, die durch je eine Zone vom DRASYS-Typ simuliert werden. Die Atmosphärenverbindungen in diese Zonen (J3 und J14) sind als Pool Scrubbing Verbindungen definiert. Modelländerungen in SPARC oder an der Schnittstelle DRASYS - SPARC wirken sich in diesen Verbindungen aus. Die "Einspeise-Rohre" in den Pools der Zonen PSS1 und PSS2 sind rechteckig (ca. 0,05 m * 1 m) und enden mit einer Zackenkante. Ihre Eintauchtiefe beträgt etwa 1 m.

An dieser Stelle sei auch erwähnt, dass bei COCOSYS-Rechnungen mit diesem Datensatz bzw. zu diesem KKW die überwiegende Zahl der oben angesprochenen Programmabbrüche durch SPARC aufgetreten ist.

Die Testrechnungen wurden mit der geänderten COCOSYS Entwicklerversion V2.4dev gerechnet und die Ergebnisse denen der Ursprungsversion V2.3v0 gegenüber gestellt. Von den in /ARN 08/ durchgeführten Rechnungen werden im Folgenden einige ausgewählte Ergebnisse erläutert.

Hier sind z. B. die Testrechnungen zur Neubestimmung der Kriterien für den SPARC-Aufruf sowie zur Untersuchung ihres Einflusses zu nennen. In der Rechnung in Abb. 5-3 fällt der Anteil der nicht kondensierbaren Gase (AIR) in der Strömung durch Verbindung J3 bereits nach 20 s unter 1 kg/s. Nach 6500 s hat sich der Luftmassenstrom auf weniger als $1 \cdot 10^{-6}$ kg/s verringert. In der Abbildung sind für die aktuellen Bedingungen der minimale Gasmassenstrom pro Eintauchrohr sowie der totale Gasmassenstrom eingetragen, bis zu denen SPARC jetzt noch aufgerufen wird (COCOSYS V2.4dev) sowie das alte Limit bzgl. des totalen Gasmassenstroms in COCOSYS V2.3v0.

Der Aerosolmassenstrom in der Pool Scrubbing-Verbindung J3 ist in Abb. 5-4 dargestellt. Anstatt des alten Grenzwertes von 10^{-23} kg/s wird SPARC nur noch für Ströme größer 10^{-12} kg/s aufrufen. Dieser Wert wird hier nach ca. 40 s unterschritten.

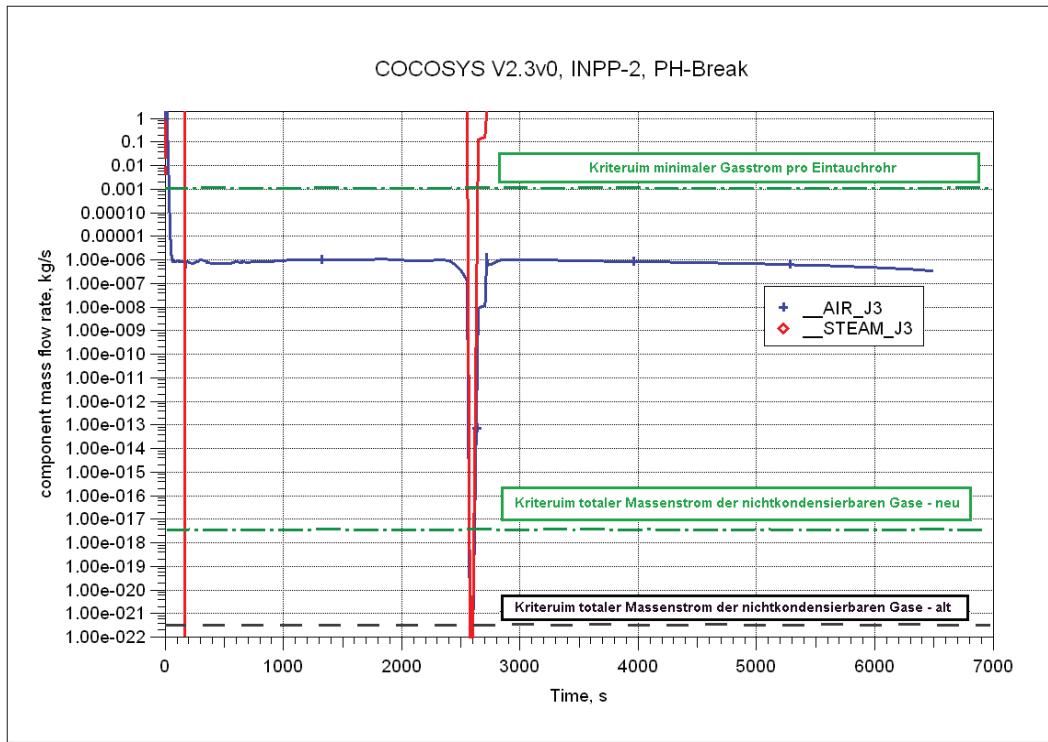


Abb. 5-3 Massenstrom der Gaskomponenten in Verbindung J3 und Kriterien für den SPARC Aufruf (alt = V2.3v0, neu = V2.4dev)

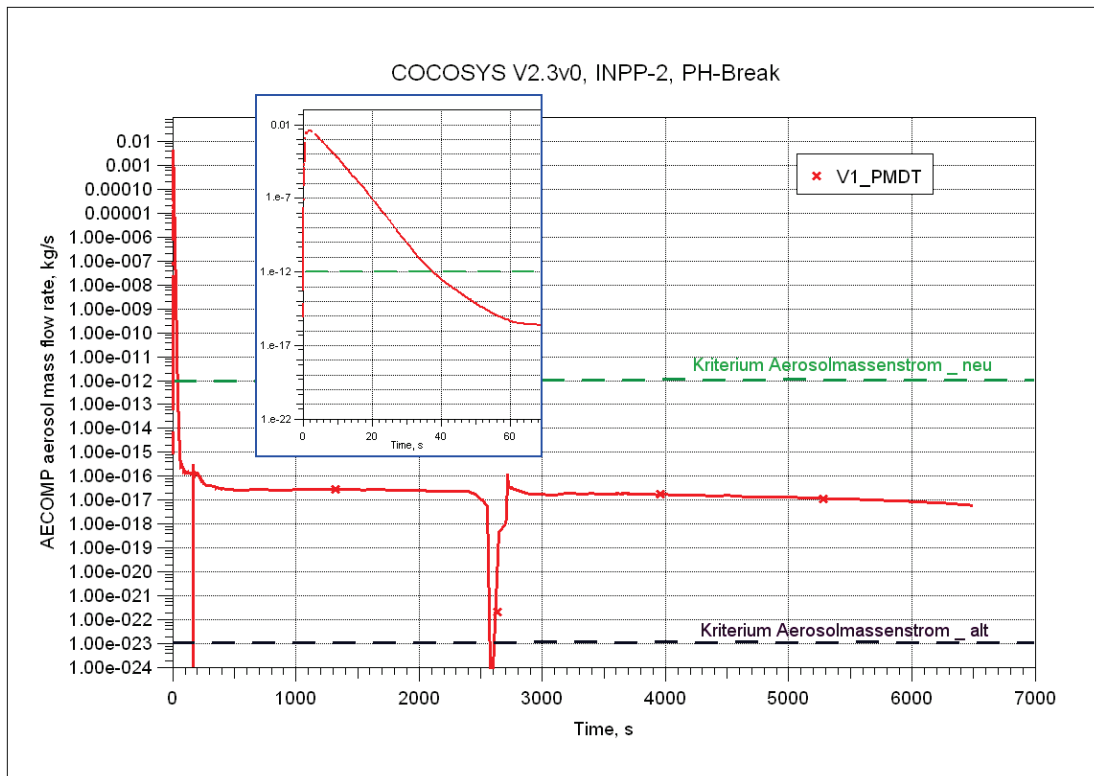


Abb. 5-4 Aerosolmassenstrom durch Verbindung J3 und Kriterien für den SPARC Aufruf (alt = V2.3v0, neu = V2.4dev)

Nach Unterschreiten einer der Grenzwerte in der betreffenden Pool Scrubbing-Verbindung wurde SPARC nicht mehr aufgerufen, aber die zuletzt berechneten Werte weiterhin für die Rückhaltung der Aerosole verwendet. Der Nutzer erhielt darüber keine entsprechende Information. Nach der Modifikation werden in der Entwicklerversion V2.4dev unter diesen Bedingungen die Default-Werte für die Dekontamination und die Rückhalteeffizienz verwendet und zusätzlich dem Nutzer mit dem Parameter I_SRC (Return Code der SPARC-Verbindung) eine entsprechende Information gegeben.

In Abb. 5-5 bis Abb. 5-8 ist für das Testbeispiel der Einfluss aller Programmmodifikationen auf die berechneten Parameterverläufe und insbesondere auf die Aerosolrückhaltung und die Aerosolverteilung vor und hinter der Wasservorlage untersucht. Das wesentlichste Ergebnis ist, dass im Unterschied zur Ausgangssituation, in der die Rechnung nach ca. 6500 s abbrach (Variante V1), die Testrechnung nunmehr ohne Absturz durchläuft.

Die Änderungen an der Schnittstelle DRASYS - SPARC betreffen auch die Definition der Volumenströme von Verbindungen in dem Zonenteil PIPE. Die identischen Ergebnisse für den berechneten Druckverlauf (Abb. 5-5), speziell des Verlaufs im GASROOM der DRASYS-Zone PSS1 zeigen, dass sich die Modifikationen nicht auf die thermohydraulischen Ergebnisse auswirken.

Der Vergleich der Aerosolrückhaltung in Abb. 5-6 zeigt wesentliche Unterschiede. In der Kurzzeitphase bis 1.5 s beruhen diese darauf, dass keine/nur kleine Massenströme in den Pool Scrubbing Zonen auftreten und damit jetzt kein SPARC Aufruf mehr erfolgt. Ab ca. 20 s ist der Dampfanteil der Zuströmung in Zone PSS1 größer als 99,99 %, so dass SPARC nicht mehr aufgerufen und die vollständige Kondensation und damit Aerosolrückhaltung im unterkühlten Pool angenommen wird. Nach 2000 s (Zone PSS2) bzw. 7000 s (PSS1) kommt es zum Druckausgleich über die Wasservorlage und die Atmosphärenzuströmung wird Null.

Die Unterschiede in der berechneten Aerosolrückhaltung wirken sich aber nur unwesentlich auf das Aerosolverhalten aus. Es treten lediglich innerhalb der ersten 2 s unbedeutende Abweichungen der berechneten Aerosolkonzentrationen in den Zonen PSS1 und AVC1 auf (Abb. 5-7). Auch in den abgelagerten Aerosolmassen sind die Unterschiede gering und nach 5 s gibt es praktisch keine Unterschiede mehr (Abb. 5-8).

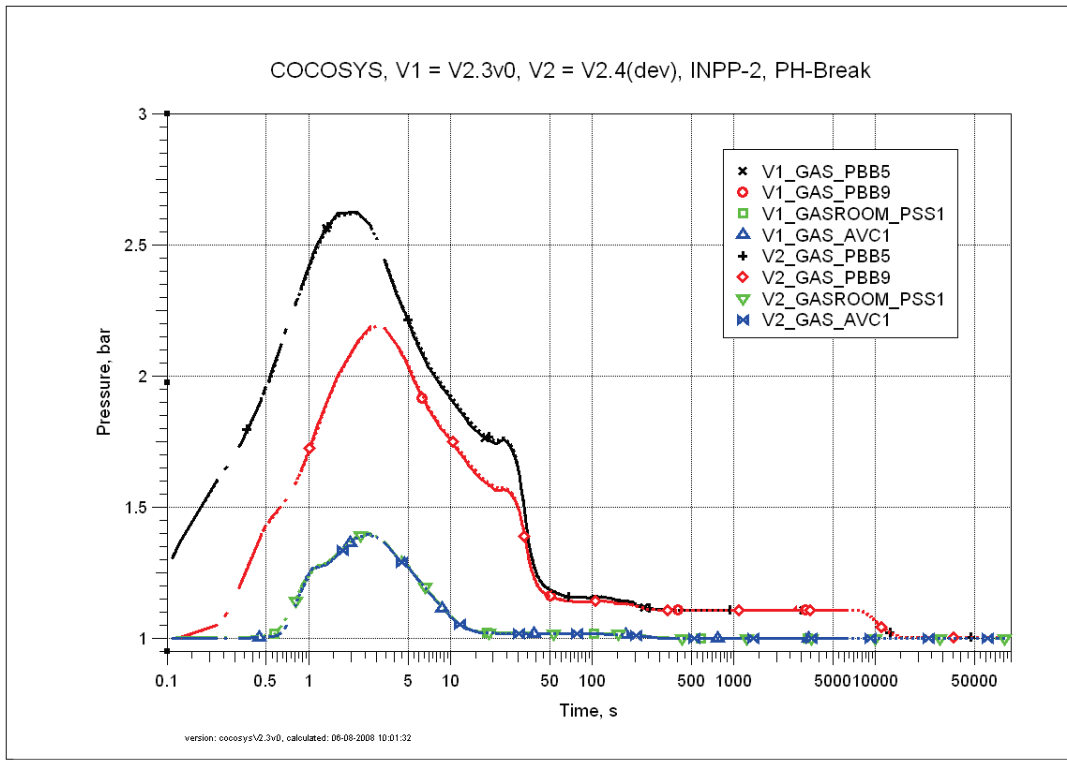


Abb. 5-5 KW Ignalina-2, Druckverlauf, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)

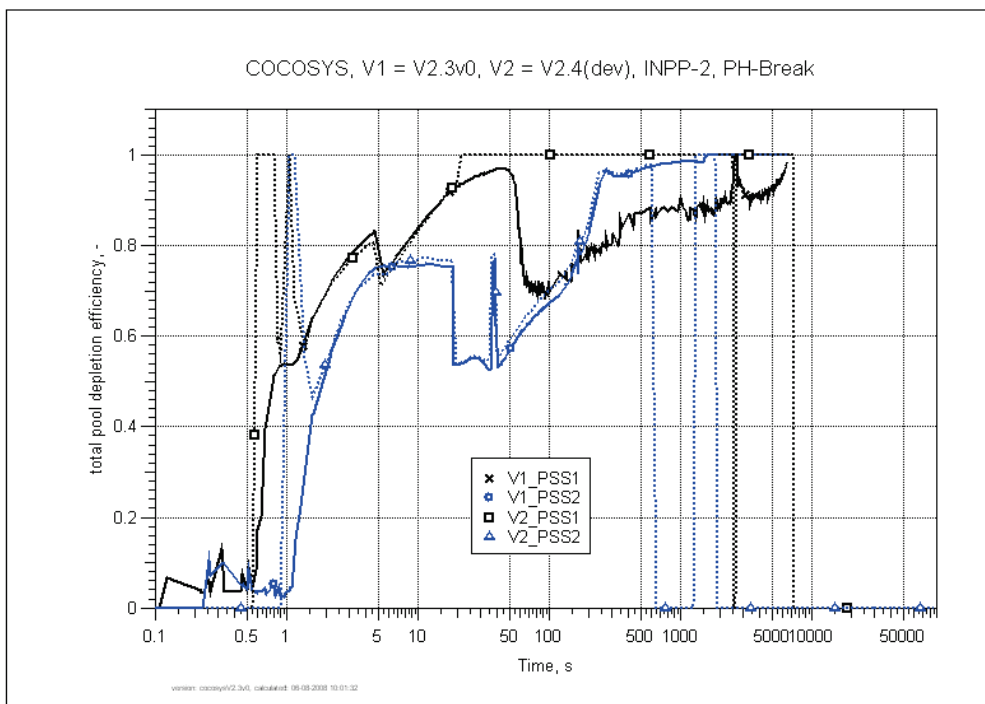


Abb. 5-6 KKW Ignalina-2, Effizienz der Aerosolrückhaltung, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)

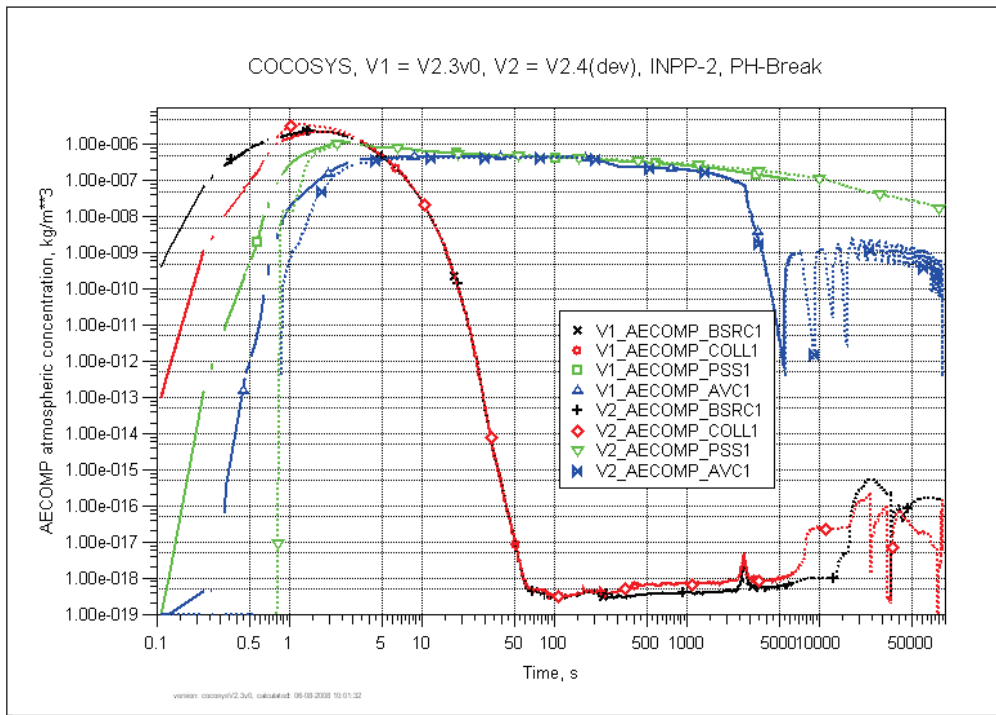


Abb. 5-7 KKW Ignalina-2, Aerosolkonzentrationen, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)

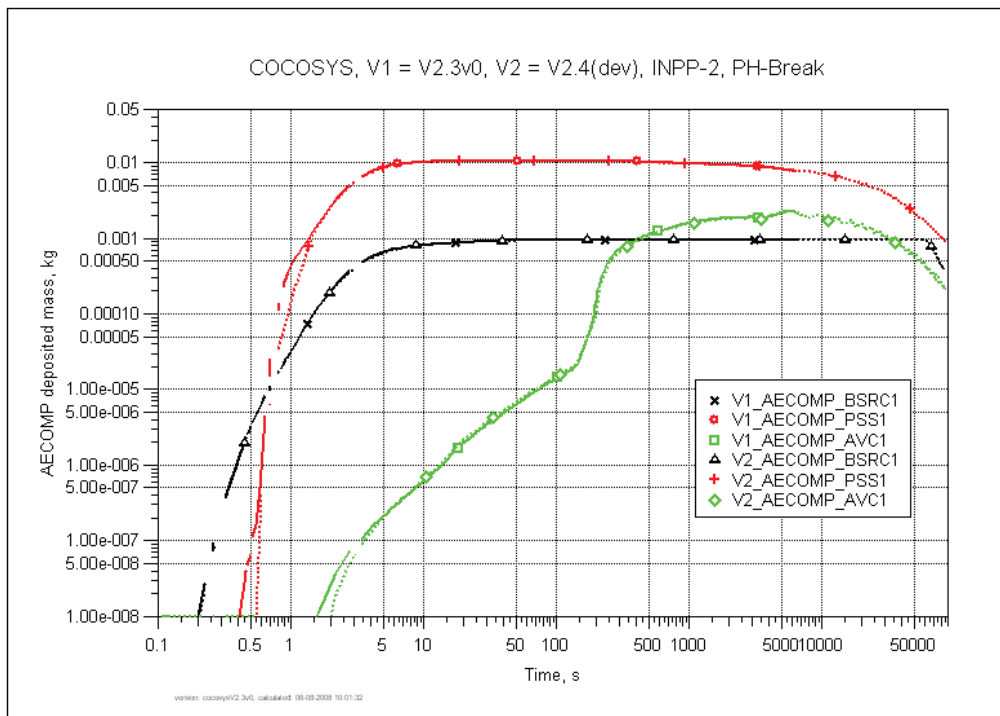


Abb. 5-8 KKW Ignalina-2, Aerosolablagerung in ausgewählten Zonen, Ergebnisse vor (V1 = V2.3v0) und nach den Modifikationen (V2 = V2.4dev)

Im Anschluss an die Programmänderungen wurden zu ausgewählten Fragestellungen Parameterstudien durchgeführt.

Hintergrund von Rechnungen zum Einfluss der Eingabegrößen DVENT (Durchmesser der Einspeiseöffnung) und NTYPE (Anzahl der parallelen Einspeiseöffnungen) war, dass für die Einspeiseelemente im Druckabbausystem von KKW mit RBMK-1500 oder WWER-440/W-213 mit schlitzförmiger Geometrie und einer Zackenkante keine verwertbaren Experimentaldaten zur Aerosolrückhaltung vorliegen, weder für eine Validierung des Modells noch für eine qualitative Aussage. Die berechnete Aerosolrückhaltung zeigte das erwartete Verhalten: Mit abnehmendem Blasendurchmesser und steigender Blasenanzahl wird die Aerosolrückhaltung besser.

Im Hinblick auf die Zusammensetzung der Trägerströmung für die Aerosole sind zwei Extremfälle von Interesse - eine reine Luftströmung sowie eine reine Dampfströmung. Letztere kann in der Langzeitphase von Störfällen auftreten oder beim Abblasen von Dampf in die Kondensationskammer. Die berechneten Effizienzen zeigten im Prinzip ein logisches Verhalten, d. h. gegenüber dem Standardfall mit einer Luft/Dampf-Zuströmung ist die Aerosolrückhaltung bei reiner Luftzuströmung geringer und bei nahezu reiner Dampfzuströmung größer. Allerdings ergab sich, dass bei nahezu reiner Dampfzuströmung und unterkühltem Pool der Dampf nicht vollständig kondensiert und damit weiterhin Blasen aufsteigen. Anstatt der für solche Bedingungen erwarteten Aerosolrückhaltung von 100 % wird von SPARC lediglich ca. 80 % Rückhaltung berechnet.

In Anwendungsrechnungen für RBMK-Anlagen wird für auslegungsüberschreitende Störfälle auch der Ausfall der Poolkühlung untersucht. Bei langzeitiger Dampfeinspeisung in das Druckabbausystem kann sich das Wasser ohne Verfügbarkeit der Kühlsysteme bis zur Sättigungstemperatur aufwärmen. Deshalb wurde am Testbeispiel zum KKW Ignalina-2 der Einfluss der Temperatur des Wassers im Druckabbausystem auf die Aerosolrückhaltung untersucht. Der Standardfall mit 35 °C Anfangstemperatur (v1) wird mit 60 °C (v2), 70 °C (v3) und 90 °C (v4) verglichen. Mit zunehmender Wassertemperatur nimmt die Kondensation des Dampfes in den aufsteigenden Blasen ab und die Aerosolrückhaltung wird geringer. Dieser Effekt ist verglichen mit anderen Randbedingungen allerdings gering und wirkt sich in der Testrechnung kaum auf das Aerosolverhalten aus. Rechnungen mit gesättigtem Pool laufen nun auch ohne Probleme, was ein Ergebnis der Änderung der Kriterien für den SPARC-Aufruf ist, d. h. bei Annäherung der Wassertemperatur an die Sättigung ($T_{\text{pool}} > T_{\text{sat}} - 3\text{K}$) wird SPARC nicht mehr

aufgerufen und die Rückhaltung auf Null gesetzt. Rechnungen mit gesättigten Wasservorlagen sind somit zwar prinzipiell möglich, aber ohne Aerosolrückhaltung.

5.3 Nachrechnung ausgewählter POSEIDON-Experimente

Wie oben dargestellt, sind eine Vielzahl von Änderungen in SPARC bzw. an der Schnittstelle zu SPARC durchgeführt wurden. Zur Überprüfung der Modelländerungen wurden vier ausgewählte Versuche an der POSEIDON-Anlage nachgerechnet und die Dekontaminationsfaktoren mit alten Ergebnissen aus der SPARC Validierung verglichen /ALL 99b, SCH 03/.

Die POSEIDON-Experimente wurden vom Paul Scherrer Institut im Zeitraum April 1995 bis März 1996 durchgeführt /GÜN 96/. Ziel dieser Versuche war es, die Rückhaltung von wasserunlöslichem Aerosol in einer heißen Wasservorlage in Abhängigkeit von der Eintauchtiefe, vom Massenstrom des Trägergases sowie seines Dampfgehaltes und der Aerosolgröße zu quantifizieren. Alle Experimente wurden unter zeitlich konstanten Bedingungen durchgeführt, so dass als Ergebnis jeweils ein Dekontaminationsfaktor für einen Parametersatz der Randbedingungen vorliegt.

Der Tank des POSEIDON-Versuchsstandes (siehe Schema in Abb. 5-9) hat einen Durchmesser von einem Meter und ist fünf Meter hoch. In den betrachteten Tests wurde eine Injektionsdüse mit 20 mm Durchmesser bei einer Eintauchtiefe von 0,3 m, 1 m, 2 m und 4 m gewählt. Die Wassertemperatur wurde im Bereich von 80 °C bis 85 °C, der Gasdruck im Einlass im Bereich von 1,1 bar bis 1,55 bar gewählt. Als Aerosol wurde unlösliches Zinndioxid SnO₂ verwendet. Der mittlere aerodynamische Durchmesser des Aerosols (AMMD) betrug am Einlass in die Wasservorlage etwa 3 µm, die Einspeiserate betrug 0,01 g/s.

Die Versuchsanlage wird in COCOSYS durch drei Kontrollvolumina abgebildet: das Eingangsvolumen oder Mischkammer R1, das Kontrollvolumen R2, das die Wasservorlage enthält, und das Umgebungsvolumen ENVIRON. Wesentlich ist in der Nachrechnung, dass die experimentellen Daten zur Wasservorlage richtig an das SPARC Modul übergeben werden. Eine detailliertere Abbildung der Versuchsanlage ist nicht erforderlich, da allein die Rückhaltung von Aerosolen in der Wasservorlage unter stationären Bedingungen untersucht wurde. Im Datensatz werden deshalb für die Zonen R1 und R2 das INTERFACE Modell und für die Verbindung V1 zwischen diesen Zonen das

INTF_JUN Modell verwendet. Dies ist die COCOSYS Schnittstelle zur Kopplung mit CFD-Codes. Die Zonenzustände und die Gasströmung in der Verbindung werden dabei über das Item "CFX_SIMULATION" vorgegeben. Sie sind dabei in den COCOSYS-Rechnungen über die gerechnete Problemzeit von 10 s konstant.

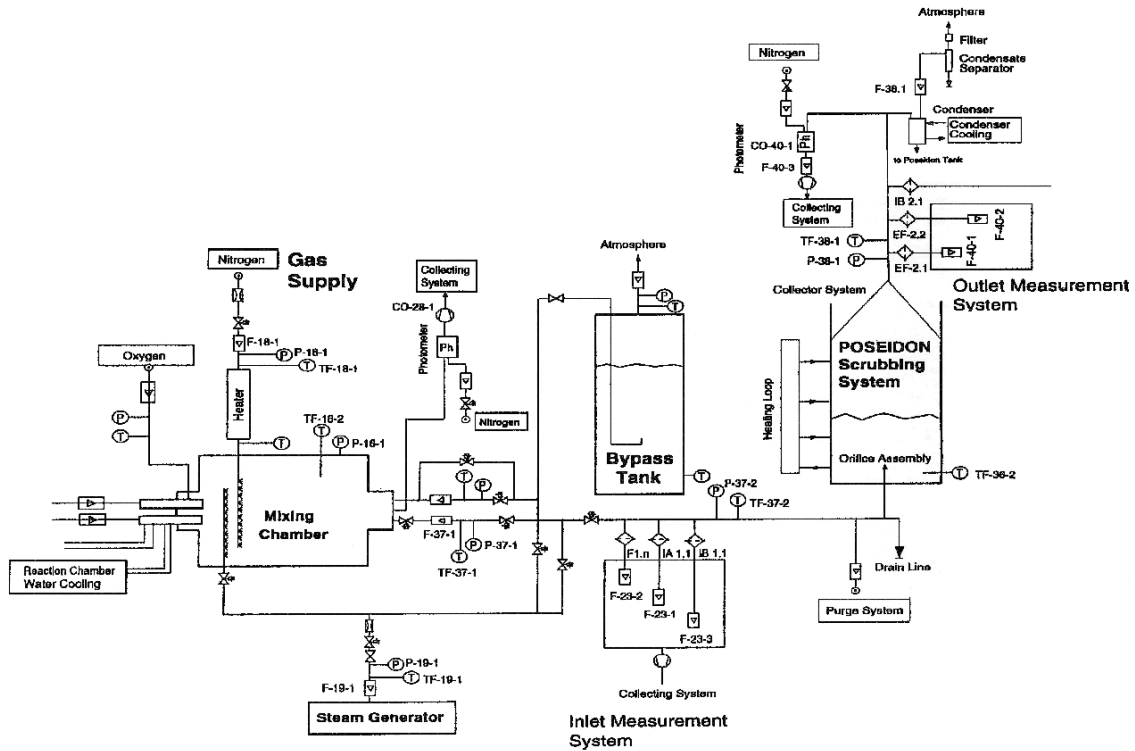


Abb. 5-9 Versuchsaufbau für die POSEIDON Pool Scrubbing Experimente /GÜN 96/

Die Aerosolkonzentration im Einlass der Wasservorlage ist für jeden Test ausgewiesen und lag im Bereich von $3 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$ bis $1 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$. Sie wird in der Rechnung jeweils als Eingabegröße YANF für die Mischkammer (Zone R1) vorgegeben. In den hier nachgerechneten Tests wurde ein "kleines" Aerosol mit einem „Mass Median Diameter“ (MMD) von $0,16 \mu\text{m}$ verwendet (COCOSYS benötigt als Eingabe den MMD, der aus dem experimentellen AMMD berechnet werden kann).

Für die Versuchsnachrechnungen standen COCOSYS-Datensätze zur Verfügung, die bereits 2003 zur Validierung von SPARC-B/98 in COCOSYS erstellt wurden. Weitere Einzelheiten zu den verwendeten Datensätzen sind in /SCH 03b/ zu finden, z. B. zur Charakterisierung der Wasservorlage (SPARC-Eingabedaten) oder den Eigenschaften des Aerosols SnO_2 und seiner gewählten Größenverteilung. Zu bemerken ist noch, dass im Trägergas anstatt Stickstoff Luft simuliert wird, da in der SPARC-Version von

2003 die Nutzung von AIR noch zwingend notwendig war. Trotz der oben erläuterten Modellerweiterung für Rechnungen ohne AIR wurde dies beibehalten.

Zur Überprüfung der Modelländerungen wurden die Versuche PA-09, PA-11, PA-15 und PA-20 nachgerechnet. Die durch SPARC ermittelten Dekontaminationsfaktoren DF (Spalte "GRS COCOSYS V2.4dev") sind in Tab. 5-1 den Ergebnissen aus der SPARC-Validierung gegenübergestellt (Spalte "GRS COCOSYS/SPARC-B/98mod", /SCH 03b/). Zum Vergleich sind außerdem verfügbare Ergebnisse aus Rechnungen mit anderen SPARC Versionen aufgelistet.

Tab. 5-1 Zusammenstellung der experimentellen und der mit verschiedenen SPARC Versionen berechneten Dekontaminationsfaktoren für vier POSEIDON Experimente

			Dekontaminationsfaktor (DF)					
			Experi- ment	NRC	GRS	Battelle	GRS	GRS
Experi- ment	Dampf anteil	Ein- tauch- tiefe		SPARC- 90	SPARC- 90	COCOSYS/ SPARC- B/98	COCOSYS/ SPARC- B/98mod	COCOSYS V2.4dev
	[%]	[m]	/DEH 96/	/OWC 91/	/ALL 99/	/FIS 98/	/SCH 03b/	
PA-09	55	2	9,72	5,12	9,94	1,36	2,58	2,69
PA-11	0	2	5,35	1,15	2,81	1,71	1,06	1,09
PA-15	70	1	4,86	8,16	17,61	1,26	2,84	2,89
PA-20	70	2	5,11	10,58	23,27	1,53	4,21	4,32
blau - berechneter DF kleiner als experimenteller Wert rot - berechneter DF größer als experimenteller Wert								

Die Abweichungen der Dekontaminationsfaktoren (DF) zwischen den neuen Rechnungen (letzte Spalte) und der Validierung von 2003 (vorletzte Spalte) sind gering (kleiner als 5 %), wobei die neuen DF generell etwas größer berechnet werden. Es wird vermutet, dass die Abweichungen in erster Linie auf die Umstellung von Single auf Double Precision im Quelltext sowie die leicht geänderten Randbedingungen (z. B. Verwendung der im THY Hauptmodul berechneten Wasserhöhe) zurückzuführen sind. Vergleicht man die berechneten mit den experimentellen Werten, sind diese Abweichungen vernachlässigbar.

Der Vergleich aller aufgelisteten SPARC Rechnungen zeigt eine recht große Streuung der berechneten DF. Auffällig ist, dass ab der Version SPARC-B/98, d. h. nach der Modifikation durch Battelle, generell kleinere DF ermittelt werden. Die in /ALL 99/ ge-

troffene Aussage *"Insbesondere im Vergleich zu der Vorgängerversion von SPARC-B ist eine wesentliche Modellverbesserung festzustellen."* kann so nicht mehr bestätigt werden. In /FIS 98/ wird dazu gesagt, dass nach den Modifikationen die Validierungsrechnungen eine konservative Unterschätzung der Dekontaminationsfaktoren zeigen. *"Ursache ist der Verzicht auf eine Anpassung von Modellparametern an experimentelle Abscheidungs-faktoren zugunsten der Verwendung von weitgehend mechanistischen Teilmodellen. Damit ist gewährleistet, dass eine Übertragung der Modelle auf Reaktorbedingungen nicht durch Skalierungsüberlegungen in Frage gestellt werden muss. Die Konservativität dürfte in der Regel auch die experimentellen Unsicherheiten abdecken."* Dies wird z. B. an den Experimenten PA-15 und PA-20 deutlich, für die nach den Änderungen von Battelle die berechneten DF auch kleiner als die experimentellen Werte berechnet werden.

5.4 Zusammenfassung

Im Rahmen der Arbeiten wurde die Schnittstelle zwischen dem DRASYS-Zonenmodell und SPARC verbessert und die Integration von SPARC in das COCOSYS-Gesamtsystem wurde erhöht. Da die Definition der Gaskomponente AIR nun nicht mehr zwingend notwendig ist, steigt die Anwendungsbreite von SPARC. Dadurch können jetzt z. B. Szenarien mit der gleichzeitigen Simulation einer Wasserstoffrekombination und der Rückhaltung von Aerosolen in Wasservorlagen simuliert werden. Die Modifikation der Kriterien für den Aufruf von SPARC vermeidet unnötige Programmabbrüche und erhöht damit die Stabilität von COCOSYS-Rechnungen unter Anwendung von SPARC. Daneben wurde der Quelltext von SPARC modernisiert (Umstellung auf FORTRAN95), was die Fehleranfälligkeit verringert und die Portabilität auf andere Compiler und Betriebssysteme erleichtert. Alle Programmänderungen in SPARC sowie an der Schnittstelle wurden in die Entwicklerversion COCOSYS V2.4dev implementiert. Die Modifikationen sollten von COCOSYS nach ASTEC übertragen werden. Dies wäre sinnvoll im Zusammenhang mit einem kompletten Update von SPARC, das sich in ASTEC noch auf dem COCOSYS Stand von 2003 befindet.

Der Einfluss der Programmänderungen auf das Aerosolverhalten ist gering. Dies ist darin begründet, dass die Änderungen sich im Wesentlichen auf die Kriterien für den Aufruf von SPARC unter Extremsituationen mit geringen Massen- und Aerosolströmen beziehen. Die Festlegung der Kriterien für den SPARC Aufruf, z. B. ob bis zu Aerosolmassenströmen von 10^{-23} kg/s oder "nur" bis zu 10^{-12} kg/s gerechnet wird, hat keine

praktischen Auswirkungen auf die Aerosolkonzentrationen, erhöht aber wesentlich die Robustheit des COCOSYS-Systems.

Parameterstudien zu speziellen Randbedingungen zeigen, dass es noch offene Fragen zum Verhalten des SPARC Modells gibt. Dies betrifft u. a. die Ergebnisse zur Aerosolrückhaltung bei reiner oder nahezu reiner Dampfzuströmung. Die Aerosolrückhaltung in einer gesättigten Wasservorlage kann derzeit nicht berechnet werden, weshalb in diesem Fall die Dekontamination auf Null gesetzt wird.

Zur Überprüfung der Modelländerungen wurden die POSEIDON-Versuche PA-09, PA-11, PA-15 und PA-20 nachgerechnet. Die Abweichungen der Dekontaminationsfaktoren zwischen den neuen Rechnungen und der COCOSYS Validierung von 2003 sind gering. Vergleicht man die berechneten mit den experimentellen Werten, sind die Abweichungen vernachlässigbar. In der jetzigen Version liefert SPARC generell konservative Dekontaminationsfaktoren. Eine weitere Verbesserung des Modells erscheint also angebracht. Dafür sind u. a. auch neue Versuche notwendig, die interessierende Randbedingungen wie siedende Wasservorlagen, reine Dampfströmungen und insbesondere lösliche Aerosole mit abdecken. Das SPARC-Modell ist bisher nicht für die Rückhaltung von wasserlöslichem Aerosol validiert, da hierzu keine adäquate, experimentelle Datenbasis vorliegt.

6 Lumped Parameter / CFD

6.1 Wasserstoffverbrennung

Für die detaillierte Modellierung von Wasserstoffverbrennungsvorgängen wurde aufgrund der hohen Dynamik dieser Prozesse ein CFD-Code (dreidimensionales Rechenprogramm) eingesetzt. Diesbezügliche Arbeiten begannen in der GRS mit dem Einsatz von CFX-4 vor einigen Jahren. Mit dieser Version gab es wegen des strukturierten Gitters Beschränkungen bei der Auflösung komplizierter Strukturen und Einbauten, wie sie in einem Sicherheitsbehälter vorkommen können.

Bereits die CFX-Version 5 enthielt viele Verbesserungen. Hervorzuheben ist dabei die Möglichkeit, unstrukturierte und hybride Gitter zu verwenden. Dadurch ist es mit vertretbarem Aufwand möglich, auch große komplexe Geometrien mit einem CFD-Gitter abzubilden. Zudem kommen bei neuen CFX-Versionen verbesserte numerische Lösungsverfahren zum Einsatz und es werden neue physikalische Modelle implementiert. Deshalb wird mittlerweile CFX-4 nicht mehr in der GRS verwendet. Bereits beim Übergang von der Version 4 nach 5 wurden umfangreiche Veränderungen im Code vorgenommen. So hat sich auch die Implementierung des „Eddy-Dissipation“-Verbrennungs-Modells verändert, so dass die für CFX-4 gefundenen Parametersätze für die H_2 -Verbrennung nicht mehr übernommen werden konnten. Mittlerweise ist die Nutzung des SST-Turbulenz-Modells Standard. Es hat diverse Vorteile gegenüber dem $k-\epsilon$ -Modell /CFX 07/. Der für CFX-4 bestimmte Parametersatz wurde unter Verwendung des RNG- $k-\epsilon$ -Modells angepasst. Da die empirischen Parametersätze des Eddy-Dissipation-Verbrennungs-Modells auch vom verwendeten Turbulenzmodell abhängen, macht der Übergang zum SST-Turbulenz-Modell eine neue Anpassung der Parametersätze ebenfalls notwendig. Z. Zt. kommt in der GRS die Version CFX-11 zum Einsatz.

Aus der Literatur ist bekannt, dass die Erweiterung des Eddy-Dissipation-Modells um den Said-Borghi Vorfaktor zu besseren Simulationsergebnissen führt /SAI 88/. Deshalb wurde von der GRS im Rahmen dieses Vorhabens das in CFX-11 implementierte Eddy-Dissipation-Modell um diesen Faktor erweitert und die Parameteranpassung für dieses modifizierte Modell durchgeführt (s. Abschnitt 6.2). Die Rechnungen mit dem erweiterten Modell zeigen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Dabei

ist mit den Experimenten HYCOM01 und HYCOM02 explizit auf die Versuchsbasis, die im Projekt HYCOM erstellt wurde, zurückgegriffen worden.

Im Gegensatz zur älteren Version CFX-4 brauchte der Faktor A in der Reaktionsgeschwindigkeit (siehe Abschnitt 6.2) nicht mehr an die H₂-Konzentration angepasst werden. Anhand der hier durchgeführten Versuchsnachrechnungen kann allerdings noch keine abschließende Bewertung durchgeführt werden. Im Rahmen des Vorhabens RS1181 (Qualifizierung von CFX für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitseinschluss) werden weitere Versuchsnachrechnungen auch mit anderen Geometrien durchgeführt. Zudem wird dort das neu in CFX-11 implementierte Burning-Velocity-Verbrennungsmodell erprobt und mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell verglichen.

In diesem Arbeitspunkt war es darüber hinaus vorgesehen, dass die aktuelle CFX-Version (derzeitig: CFX-11) in das CFD-Interface von COCOSYS integriert und eine gekoppelte Rechnung zwischen COCOSYS und CFX durchgeführt wird. Diese Arbeiten sind aber zurückgestellt worden, da die Kopplung zwischen 'lumped parameter'-Codes (COCOSYS) und CFD-Code (CFX) nicht unproblematisch ist. Im Rahmen der Arbeiten im Vorhaben RS1181 sollen zunächst mit der Abbildung eines KONVOI-Sicherheitsbehälters für CFX-11 Erfahrungen gesammelt werden und erste Vergleiche zu detaillierten COCOSYS-Rechnungen gezogen werden. Danach wird entschieden, wie bei der Kopplung weiter zu verfahren ist. Außerdem sollen Erfahrungen anderer bei der Anbindung von CFD Programmen an 'lumped parameter' codes gewonnen werden (u. a. auch bei GRS hinsichtlich der Kopplung ATHLET - CFX).

6.2 Wiederholungsrechnung zweier H₂-Verbrennungsversuche (aus HYCOM) mit CFX

6.2.1 Kurze Beschreibung des HYCOM01 Experiments

Die Experimente HYCOM01- und HYCOM02 wurden an der RUT-Versuchsanlage durchgeführt. Die Geometrie der Versuchsanlage /ALE 99/ bei diesen beiden Experimenten kann Abb. 6-1 entnommen werden. Der Druck wurde an verschiedenen Punkten gemessen. Bei den beiden hier untersuchten Versuchen sind die Druckverläufe an den verschiedenen Messstellen sehr ähnlich (Abb. 6-3), so dass für den Vergleich Experiment-Simulation meist nur eine Messstelle diskutiert wird. Die Anfangswasserstoff-

konzentration des homogenen Wasserstoff-Luft-Gemischs betrug ca. 10 % H₂ beim HYCOM01-Experiment und 11,5 % beim HYCOM02 Experiment. Der Anfangsdruck in beiden Versuchen betrug 1 bar und die Anfangstemperatur betrug ca. 18 °C.

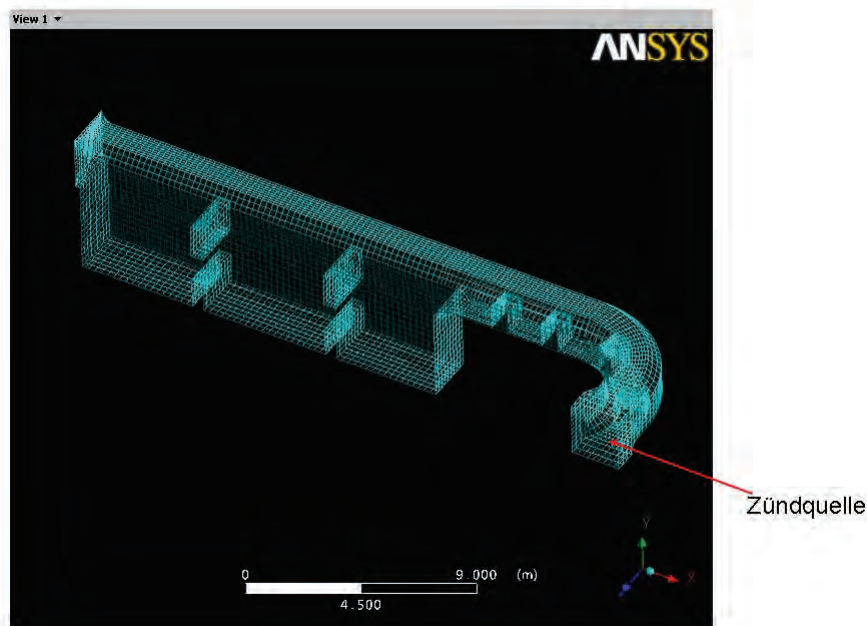


Abb. 6-1 Geometrie der Experimente HYCOM01 und HYCOM02; dargestellt ist ein grobes CFX-Gitter

6.2.2 Turbulenzmodelle für die Simulation der H₂-Verbrennung mit CFX

Bei den durchgeführten Simulationen mit CFX wurde die Turbulenz mit dem SST (Shear-Stress-Transport) -Modell /CFX 07/ simuliert. Zur Simulation der Wärmestrahlung wurde das Discrete-Transfer-Modell /CFX 07/ verwendet. Die Simulation des Verbrennungsvorgangs erfolgte mit dem um den Said-Borghi-Faktor erweiterten Eddy-Dissipation-Modell /SAI 88/.

Beim Eddy-Dissipation-Modell wird unterstellt, dass der Ablauf der chemischen Reaktion durch turbulente Mischungsvorgänge bestimmt wird. Hierbei wird angenommen, dass die Reaktionsgeschwindigkeiten nicht durch die schnelle chemische Kinetik sondern durch die vergleichsweise langsameren, turbulenten Mischungsvorgänge begrenzt werden. Daher können Prozesse, die durch die chemische Kinetik bestimmt sind – wie zum Beispiel die Zündung – mit diesem Modell nicht richtig modelliert werden. Wenn eine beschleunigte turbulente Flammenausbreitung vorliegt, kann dieses Modell aber zur Anwendung kommen.

Der Ansatz für die Reaktionsgeschwindigkeit R beim Eddy-Dissipation-Modell lautet:

$$R = f_{\text{borghi}} A \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{C_{\text{O}_2}}{0,5}, \frac{C_{\text{H}_2}}{1}\right)$$

$$f_{\text{borghi}} = 1 + \left(\frac{4,4}{1 + 3,2 \frac{\sqrt{k}}{v_{\text{lam}}}} \right)$$

k ist die turbulente kinetische Energie, ε die Dissipationsgeschwindigkeit, C sind die molaren Konzentrationen der Edukte H_2 und O_2 . A ist eine empirische Konstante, die von verschiedenen Parametern abhängig ist, z. B. von dem Brennstoff und dem verwendeten Turbulenzmodell. Die laminare Flammgeschwindigkeit v_{lam} wurde durch folgendes Polynom angenähert:

$$v_{\text{lam}} = 64,494x^5 + 37,898x^4 - 186,87x^3 + 100,28x^2 - 5,7839x - 0,0245$$

Die Variable x ist dabei der Molenbruch von H_2 im unverbrannten Gas. Diese Korrelation ist für Wasserstoff-Luft-Gemische bei $T = 298 \text{ K}$ und atmosphärischem Druck gültig /ARD 98/.

Die bei der Reaktion freigesetzte Wärme wird aus den Stoffdaten der Edukte und der Produkte von CFX automatisch berechnet.

Der Borghi Vorfaktor f_{borghi} bewirkt eine Beschleunigung der Reaktionsgeschwindigkeit. Er wird in Bereichen mit geringer turbulenter kinetischer Energie k zu einer Beschleunigung der Verbrennung um einen Faktor von maximal 5,4 führen. In Bereichen mit großer turbulenter kinetischer Energie nähert sich f_{borghi} 1. Der Borghi Faktor wird deshalb vor allem in der Anfangsphase zu einer Beschleunigung der Verbrennung führen.

Beim Eddy-Dissipation-Modell ist die Reaktionsrate nur von der Konzentration der Edukte und der Turbulenz abhängig. Die Temperatur geht nicht in die Gleichungen ein. Dies ist problematisch, weil bei Vermischung von Brennstoff und Sauerstoff sofort die Reaktion beginnt, sobald es zu einer turbulenten Strömung kommt. Eine Zündung ist dazu nicht nötig. Es besteht daher die Möglichkeit, eine Grenztemperatur T_{ext} zu definieren. Ist das Gas kälter als diese Temperatur, ist die Reaktionsrate Null. Damit kann

sichergestellt werden, dass es nur zu einer Reaktion kommt, wenn das Gas in Kontakt mit heißem Gas steht. In den hier durchgeführten Arbeiten wurde $T_{\text{ext}} = 400 \text{ K}$ gesetzt.

6.2.3 Anpassung des Modellparameters A im Eddy-Dissipation-Modell

Der Vorfaktor A ist keine physikalische Größe. Er muss an den jeweiligen Brennstoff und die Brennstoffkonzentration angepasst werden. Es ist auch bekannt, dass A teilweise von der jeweiligen Geometrie abhängen kann. Durch die Erweiterung des Eddy-Dissipation-Modells um den Borghi Vorfaktor f_{borghi} wurden generell zwar Abhängigkeiten verringert, aber nicht gänzlich beseitigt. Da in die Berechnung der Brenngeschwindigkeit die turbulente kinetische Energie und die Dissipation eingehen, ist es nicht verwunderlich, dass auch das Turbulenzmodell einen starken Einfluss auf die Wahl von A hat. Um A zu bestimmen, wurde der Versuch HYCOM01 mit dem erweiterten Eddy-Dissipation-Modell berechnet. Der so bestimmte Vorfaktor wurde ohne Modifikation auch für die Berechnung des HYCOM02-Experiments verwendet.

6.2.4 Modellierung der Zündung

In CFX-11 steht für das Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodell kein Zündmodell zur Verfügung. Bei der Initialisierung wurden einige Zellen in der Nähe der Zündquelle (Entfernung $\pm 0,2 \text{ m}$) auf eine hohe Temperatur ($T_{\text{ini}} = 1000 \text{ K}$) gesetzt. Dadurch wird in dieser Region eine Strömung und Turbulenz erzeugt und die Verbrennung des Gasgemisches wird in Gang gesetzt. Die exakte Größe der Zündregion und die Temperatur, mit der das Gas gezündet wird, sind willkürlich gewählt. Es muss allerdings gewährleistet sein, dass es nicht zu einem Verlöschen der Flamme kommt. Deshalb sollten mehrere Gitterpunkte im Zündvolumen liegen und die Zündtemperatur sollte deutlich über der Grenztemperatur T_{ext} des Eddy-Dissipation-Modells liegen.

Es ist auch denkbar, zusätzlich zu einer Temperaturerhöhung den H_2 -Gehalt zu verringern und dafür H_2O im Zündvolumen zu setzen (verbranntes Gemisch) und/oder die Turbulenz zu erhöhen. Je nach Initialisierung des Zündvolumens kommt die Verbrennung unterschiedlich schnell in Gang. Der Zeitpunkt, an dem die beschleunigte Flammenausbreitung einsetzt, kann dadurch variiert werden. Die resultierenden Flammengeschwindigkeiten und der Verlauf des Druckanstiegs werden hierdurch aber nicht beeinflusst. Bei den Nachrechnungen wurde darauf verzichtet, durch geschickte Wahl der Zündbedingungen die gleiche Lage des Druckmaximums in Simulation und Experiment

zu erreichen, da auf diese Weise eine Übertragung der Ergebnisse auf andere Experimente nicht zu erwarten wäre.

6.2.5 Zeitliche Diskretisierung und Konvergenz

Bei der Simulation der H₂-Verbrennung wurde ein adaptiver Zeitschritt verwendet. Der maximale Zeitschritt bei den Rechnungen lag bei 1,0E-2 bzw. 5,0E-3. Der minimale Zeitschritt lag bei 1,0E-4. Bei der Wahl des Zeitschritts ist darauf zu achten, dass, sobald eine beschleunigte turbulente Flammenausbreitung stattfindet, das Konvergenzkriterium (RMS-Residuum von 1,0E-4) bei jedem Zeitschritt eingehalten wird. Anderenfalls ist mit falschen Simulationsergebnissen zu rechnen.

6.2.6 Räumliche Diskretisierung

Für die durchgeführten Simulationen wurde ein strukturiertes Gitter mit 31.000 bzw. 130.000 Zellen verwendet. Beides sind relativ grobe Gitter, so dass mit einem Diskretisierungsfehler zu rechnen ist. Speziell der konvektive Wärmetransport in die Wände wird während des Verbrennungsvorgangs unterschätzt. Während der Verbrennung treten sehr hohe Geschwindigkeiten auf. Der Wärmetransport in die Wände wird beim SST-Turbulenzmodell mit Wandfunktionen berechnet, die eine ausreichend feine Diskretisierung in Wandnähe erfordern. Um die Vorgabe $y^+ < 300$ für das SST-Turbulenzmodell einhalten zu können, müssten sehr feine Diskretisierungen verwendet werden (in Wandnähe Schrittweiten deutlich kleiner als 1 mm).

Allerdings ist es nicht möglich, Parameterstudien mit so feinen Diskretisierungen durchzuführen, da schon bei den groben Gittern eine Simulation mehrere Tage dauert (4 CPUs auf einem Linux Cluster). Zudem wird auch bei der Simulation der H₂-Verbrennung in einem Containment ein ähnlich grobes CFD-Gitter verwendet werden müssen. Ein Vergleich des Druckanstiegs bei einer unterschiedlich feinen Diskretisierung zeigt, dass nur schwache Abhängigkeit besteht. Sollte aber eine viel feinere Diskretisierung gewählt werden, d. h. Schrittweiten in der Ordnung einiger Millimeter statt Schrittweiten in der Ordnung von 10 cm, so ist mit deutlicheren Abweichungen zu rechnen und eine Anpassung der Modellparameter im Eddy-Dissipation Modell kann notwendig werden.

6.2.7 Rechenergebnisse

Durch die Berücksichtigung der Wärmestrahlung mit dem Discrete-Transfer-Modell wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront etwas verlangsamt. Deshalb empfiehlt es sich, einen etwas größeren Faktor A zu wählen. Bei Anpassung an den HYCOM01-Versuch ergibt sich für $A = 21$ eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Mit diesem Parameter wird der Druckanstieg richtig im HYCOM01-Experiment berechnet. Betrachtet man die Flammenankunftszeiten ergibt sich für den Bereich $57 \text{ m} > x > 43 \text{ m}$ eine mittlere Ausbreitungsgeschwindigkeit von ca. 42 m/s . Sie liegt damit unter dem experimentellen Wert. Bei der Simulation des HYCOM02-Experiments mit denselben Modellen und Parametern ergibt sich ebenfalls eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und experimentellen Daten.

Anhand des HYCOM01-Experiments ($10 \% \text{ H}_2$) wurden die Modellparameter für das um den Said-Borghi Faktor erweiterte Eddy-Dissipation Modell bestimmt. Bei Verwendung des SST-Turbulenzmodells und dem Discrete-Transfer-Strahlungsmodell wurde als geeigneter Faktor $A = 21,0$ bestimmt. Mit diesem Parameter konnte der Druckverlauf sowohl für das HYCOM01- als auch das HYCOM02-Experiment zufrieden stellend simuliert werden. Zur weiteren Validierung ist die Nachrechnung weiterer Experimente mit modifizierter Geometrie und anderen H_2 -Konzentrationen notwendig. Bei der weiteren Validierung der Verbrennungsmodellierung sollten auch Versuche, bei denen Dampf zu Simulationsbeginn vorliegt, simuliert werden.

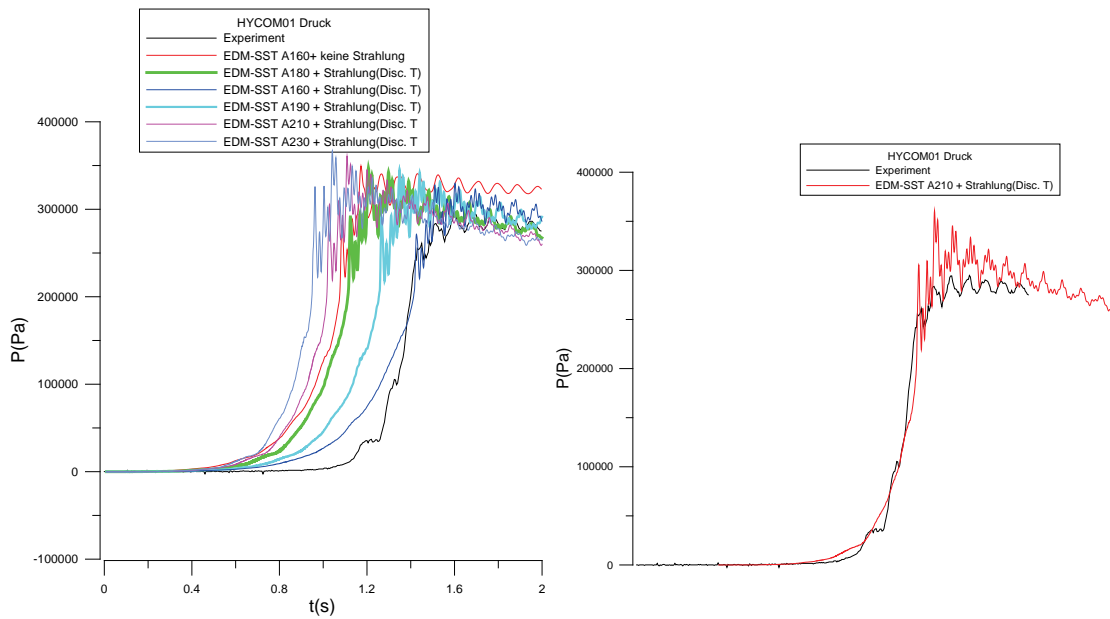


Abb. 6-2 Vergleich des Druckverlaufes für HYCOM01 zwischen Rechnung und Experiment in Abhängigkeit verschiedener A-Werte ($A = 16 \dots 23$, linke Seite) sowie für den Referenzwert $A = 21$ (rechte Seite).

In der rechten Abbildung wurde die Zeitachse der Simulation so verschoben, dass die Druckanstiege im Experiment und in der Simulation übereinander liegen

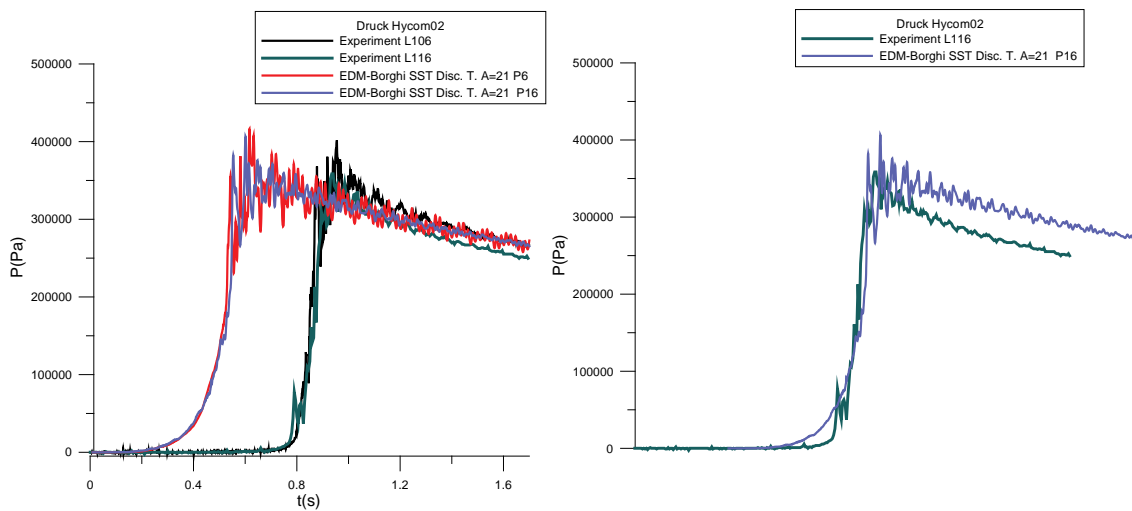


Abb. 6-3 Vergleich des Druckverlaufes für HYCOM02 zwischen Rechnung und Experiment. In der rechten Abbildung wurde die Zeitachse der Simulation so verschoben, dass die Druckanstiege im Experiment und in der Simulation übereinander liegen

7 Integralcode ASTEC

7.1 Weiterentwicklungsschritte

Der Entwicklungsbedarf für ASTEC leitet sich aus verschiedenen Quellen ab. Der langfristige Entwicklungsplan wird in den aus GRS und IRSN Mitgliedern paritätisch besetzten Kontroll- und Arbeitsgremien gemeinsam erarbeitet und definiert und basiert sowohl auf neuen Erkenntnissen aus Wissenschaft und Technik als auch auf eigenen Analysen der Entwickler. Insbesondere erwachsen aber aus den Arbeiten der ASTEC-Anwender innerhalb des Exzellenz-Netzwerkes der Europäischen Kommission (Severe Accident Research Network – SARNET) zusätzliche Anforderungen an die Entwickler, die nur in Ausnahmefällen vorab berücksichtigt werden können und in der Regel auch nicht im langfristigen Entwicklungsplan, der zumeist einen Zeitraum von mehreren Jahren beinhaltet, detailliert vorgesehen sind. Diese zusätzlichen, oftmals kurzfristigen Anforderungen ergeben sich auch aus der Bearbeitung und Analyse sogenannter MARCUS-Anfragen der Nutzer, wobei MARCUS eine internetbasierte Plattform zur Unterstützung der ASTEC Anwender darstellt.

Entsprechend dem langfristigen Entwicklungsplan sind bestimmte Entwicklungsabschnitte definiert, zu denen dann jeweils eine neue ASTEC-Version freigegeben und an die Anwender verteilt oder zum Herunterladen von der SARNET-Seite im Internet bereitgestellt wird. Zusätzlich können nach Bedarf bzw. bei größeren Änderungen im Programm, die eine Herausgabe einer neuen Version sinnvoll machen, sog. Revisionen definiert werden. Die genauen Randbedingungen sind neben anderen qualitätssichernden Maßnahmen in /DOR 07b/ festgehalten.

Mit dem Abschluss des Entwicklungsvorhabens in 2008 ist ein Überblick über die in diesem Rahmen freigegebenen ASTEC-Versionen hilfreich. Dies verdeutlicht gleichzeitig auch den hohen Entwicklungsbedarf und -status.

- Freigegebene Versionen ("Release") und Revisionen seit Beginn von SARNET bzw. etwas vor Projektbeginn:
 - Juni 2004 : ASTEC V1.1 rev0
 - Juli 2005 : ASTEC V1.2 rev0
 - Dez. 2005 : ASTEC V1.2 rev1
 - Dez. 2006 : ASTEC V1.3 rev0

- Aug. 2007 : ASTEC V1.3 rev1
- Dez. 2007 : ASTEC V1.3 rev2
- Freigegebene "Patch"-Versionen:
 - 2004 : 2 Patch Versionen für ASTEC V1.1 rev0
 - 2006 : 6 Patch Versionen für ASTEC V1.2 rev1
 - 2007 : 3 Patch Versionen für ASTEC V1.3 rev0

Entsprechend der ASTEC Qualitätssicherung wird eine "Patch"-Version nur unter besonderen Bedingungen erstellt und an solche Anwender ausgeliefert, deren spezielle Anforderungen eigens die Erstellung einer "Patch"-Version notwendig machen. Dies gilt z. B. für geringfügige Fehler, die nur bei dem betreffenden Anwender bzw. bei dem von ihm gerechneten Problem auftreten. Vorrangiges Ziel ist die rasche Beseitigung dieses Einzelfehlers. Jede "Patch"-Version enthält dabei die Modifikationen der entsprechenden Vorläufer "Patches". Während jedoch für jede Release oder Revision der komplette Validierungszyklus abgearbeitet wird, werden Patch-Versionen nur für das betreffende Problem, für die der Patch erstellt worden ist getestet, da der Validierungsaufwand sonst viel zu hoch wäre.

7.2 Modellerweiterungen

7.2.1 H₂-Verbrennungsvorgänge

7.2.1.1 Überblick über verfügbare H₂-Verbrennungsmodelle

Wasserstoffverbrennungsmodelle im ASTEC-Modul CPA

Das Thermohydraulik-Modul CPA in ASTEC beinhaltet derzeit die zwei Wasserstoffverbrennungsmodelle COMB und DECOR. Das Modell COMB ist abgeleitet aus dem JERICHO-Modul des früheren IRSN Integralcodes ESCADRE. Es handelt sich um ein zonenorientiertes Verbrennungsmodell, welches keine Flammenfrontenbewegung berechnen kann. Der Nutzer muss den Brennbeginn und die Brenndauer für das gesamte Containment oder für die einzelnen Zonen vorgeben. Das Modell berechnet die Energiefreisetzung aus der exothermen Verbrennungsreaktion. Die Energie- und Massenänderungen durch die Verbrennung werden in den Differentialgleichungen der Zonen-

modelle in CPA berücksichtigt. Dadurch ist eine fehlerkontrollierte Integration der Bilanzgleichungen gesichert. Das Modell DECOR ist eine spezielle Gleichgewichtszone, in welcher eine eindimensionale Wasserstoffverbrennung berechnet werden kann. Die Zone wird in einen unverbrannten und in einen verbrannten Bereich unterteilt. Beide Raumteile sind durch die Bewegung der Flamme miteinander gekoppelt. Die Geschwindigkeit der Flammenfront als auch deren Oberfläche werden durch Korrelationen beschrieben. Zusätzliche Eingaben sind erforderlich, um die Position der Verbindungen relativ zu den spezifizierten Brennachsen zu beschreiben. Ausführliche Beschreibungen zu den Modellen finden sich in /SER 04/ und /HEI 95/.

Externes Wasserstoffverbrennungsmodul PROCO

Das Modul PROCO in ASTEC entstand aus dem vorhandenen eigenständigen Programm PROCO. Dieses wurde für die Durchführung von PSA-2-Analysen entwickelt. Neben dem eigentlichen Wasserstoffverbrennungsmodell beinhaltet es noch Modelle zur Abschätzung von möglichen DDT-Abläufen (Deflagration to Detonation Transition). Das Wasserstoffverbrennungsmodell beruht auf einer 'lumped parameter'-Nodalisierung des zu modellierenden Volumens. Die einzelnen Zonen müssen durch würfelförmige Volumina dargestellt werden. Diese Einschränkung resultiert aus mehreren Gründen:

- Mögliche Blockaden werden aus dem Verhältnis von Verbindungsquerschnitt A_{jun} und dem für alle Richtungen gleichen Zonenquerschnitt $A_{Zone} = V^{2/3}$ berechnet.
- Die Korrelation für die Flammgeschwindigkeit wurde für eine Geometrie entwickelt, in der der Abstand zwischen zwei Hindernissen vergleichbar mit der Zonengeometrie ist.
- Das äquidistante Gitter ermöglicht eine Modellierung der sphärischen Progression der Flammenfront.

Die einzelnen Zonen werden durch Verbindungen mit definierter Querschnittsfläche verbunden. Das Verhältnis dieser Querschnittsfläche zum Zonenquerschnitt definiert auch mögliche Blockaden. Innerhalb einer Zone wird aus dem Druck, der Temperatur und dem Wasserstoff- und Dampfanteil eine laminare Brenngeschwindigkeit berechnet. In der ersten Verbrennungszone wird laminare Verbrennung angenommen. Der Verlauf der Verbrennung innerhalb einer Zone wird nicht simuliert. Stattdessen wird der Zustand der Zone nach der vollständigen Verbrennung ermittelt. Der Druck- und Tempe-

raturverlauf kann auf diese Weise mit hinreichender Genauigkeit bestimmt werden. Für alle weiteren Zonen wird eine turbulente Brenngeschwindigkeit berechnet. Diese beruht auf einer Korrelation von Peters /PET 97/. Voraussetzung für die Anwendung dieser Korrelation ist die Kenntnis der Turbulenzgeschwindigkeiten in der Umgebung der Flammenfront. Diese wird – mangels einer detaillierteren Modellierung der Turbulenz – mittels einer experimentell bestimmten Korrelation berechnet. Grundlage dafür sind die Experimente in der Versuchsanlage RUT des Kurchatov-Institutes. Die Genauigkeit der Flammenfrontberechnung hängt von der Gültigkeit der Korrelation für die turbulente Flammenfrontgeschwindigkeit und der vom Nutzer gewählten Nodalisierung ab.

Kopplung zwischen dem Modul PROCO und dem Modell COMB in CPA

In der derzeitig vorhandenen Kopplung von PROCO und CPA werden die von PROCO berechneten Zündzeitpunkte und Brenndauern an CPA übergeben. In der damit ablaufenden CPA-Rechnung haben die von CPA berechneten thermohydraulischen Vorgänge keinen Einfluss auf den zeitlichen Ablauf der Verbrennung. Dadurch ergeben sich Widersprüche zwischen den von CPA berechneten Gasgeschwindigkeiten und dem Transport der Flammenfront entsprechend den von PROCO definierten Zeiten. Unter Berücksichtigung der von CPA berechneten Gasgeschwindigkeiten sind signifikante Änderungen im Transport der Flammenfront zu erwarten.

Wasserstoffverbrennungsmodelle in vergleichbaren Containment-Codes

MELCOR. Das BUR-Paket im Programm MELCOR modelliert die Verbrennung in Kontrollvolumina (vom Nutzer definierte Zonen). Der Einfluss der Verbrennung von vorge-mischten Gasen auf die Massen- und Energiebilanz wird ohne Berechnung der Reaktionskinetik und der Flammenfortpflanzung berücksichtigt.

- Eine Verbrennung (ein "Burn") wird in einem Kontrollvolumen gestartet, wenn alle Bedingungen bezüglich X_{H_2O} und X_{O_2} erfüllt sind (LeChatelier Gleichung). Unterscheiden werden gesteuerte und spontane Verbrennungen.
- Der Parameter „Combustion Completeness“ wird vom Nutzer definiert.
- Die Brenndauer wird über die Flammengeschwindigkeit vom Nutzer definiert; die Verbrennungsrate wird aus der Brenndauer und dem Zeitschritt berechnet.
- Eine Zündung der Nachbarzonen kann nach einer vom Nutzer definierten Verzögerungszeit erfolgen. Die Flammenausbreitung orientiert sich an der Lage der benachbarten Zonen sowie den Gaskonzentrationen zum Zeitpunkt eines

möglichen Flammenübertrags. Ein konzentrationsabhängiges Kriterium wird für den Nutzer automatisch berechnet.

–

CONTAIN. CONTAIN berechnet die Verbrennung in einer definierten Zone mit seinem Deflagration-Modell. Dieses zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus:

- vorgemischte Verbrennung
- Flammengeschwindigkeit und Ausbrand entsprechend /WON 88/
- berücksichtigt nur eine langsame Verbrennung
- keine Berücksichtigung von Konzentrationsunterschieden vor und nach der Flammenfront
- nutzerdefinierte Brenngeschwindigkeit
- verschiedene Zündkriterien
- Flammenfortpflanzung in Nachbarzonen möglich
- nutzerdefinierte Verzögerung; Wert zwischen 0 und 1; definiert den Teil der Brenndauer in aktueller Brennzonen.

Vergleich mit dem Modell in CPA

Das Verbrennungsmodell COMB mit der zonenspezifischen Eingabe der Zündzeitpunkte und der Brenndauer entspricht im Wesentlichen den Modellen in MELCOR und CONTAIN. Mit der Bestimmung der Flammenfrontgeschwindigkeiten über den vorgeschalteten Modul PROCO gestattet es zusätzlich noch eine Abschätzung des zeitlichen und räumlichen Ablaufs der Verbrennung. Dieser Vorteil wird aber durch die folgenden Nachteile eingeschränkt:

- Die Notwendigkeit, eine zusätzliche PROCO-Nodalisierung anzugeben, welche durch die würfelförmigen Zonen aufwändig zu erstellen ist,
- mangelnde Verifikation der Korrelationen für andere Experimente als RUT,
- keine Berücksichtigung der wahren Gasströmung in CPA.

Ziel des jetzt vorliegenden Modells der Flammenfrontgeschwindigkeiten in CPA ist es, diese Nachteile aufzuheben.

7.2.1.2 Implementierung eines Flammenfrontmodells im CPA-Verbrennungsmodell

Modellbedingte Einschränkungen eines Wasserstoffverbrennungsmodells innerhalb einer 'lumped parameter'-Nodalisierung

Eine typische Wasserstoffverbrennung in einem Containment ist einerseits geprägt durch die Existenz einer Flammenfront und andererseits durch stark turbulente Vorgänge. Beide Phänomene sind im Rahmen eines 'lumped parameter' (LP)-Modells nur sehr begrenzt modellierbar. Die Zonen eines solchen Modells sind per Definition homogen. Eine Flammenfront führt aber zu einer Unterteilung einer Zone in einen unverbrannten und verbrannten Bereich. Die dabei vorliegende Flammenfront ist auch keine ebene Front. Das Fehlen von Modellen zur Berechnung der Turbulenzeigenschaften ist bedingt durch die vereinfachte Berechnung der Geschwindigkeiten in den 'lumped parameter'-Modellen. Eine direkte Berechnung der turbulenten Flammenfrontgeschwindigkeiten ist dadurch ausgeschlossen. Die Berechnung von Wasserstoffverbrennungen innerhalb eines LP-Modells ist somit nur sinnvoll, wenn man die Drücke und Temperaturen in den einzelnen Zonen als das wesentliche Ergebnis ansieht. Die Aussagekraft des Modells zum zeitlichen und räumlichen Verlauf der Flammenfront ist begrenzt. Insbesondere die Anfangsphase einer Verbrennung kann nicht modelliert werden. In diesem Fall beginnt die Verbrennung in einem kleinen Untervolumen und breitet sich, teilweise noch mit laminarer Verbrennung, in dem gesamten Volumen aus. Dieses zoneninterne Verhalten kann innerhalb des 'lumped parameter'-Konzepts nicht modelliert werden. Die Zone brennt immer homogen. Eine Flammenfront kann sich nur entlang der Verbindungen (Junctions) ausbreiten.

Ziel eines integrierten Modells

Bei der derzeitigen Kopplung von PROCO und CPA kann durch CPA keine wesentliche Erhöhung der Aussagekraft der Ergebnisse der PROCO-Rechnungen erreicht werden. Der Vorteil besteht in der genaueren Berechnung der thermohydraulischen Vorgänge mit dem CPA-Modul. Um diese Vorteile der thermohydraulischen Modellierung des Containments durch das CPA-Modul in vollen Umfang nutzen zu können, muss aber der Einfluss der Gasgeschwindigkeiten auf die Flammenfront mit berücksichtigt werden. Es ist somit sinnvoll, die Korrelation zur Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit innerhalb CPA unter Verwendung der aktuellen thermodynamischen Zustände anzuwenden.

Für die Berechnung der Flammenfrontgeschwindigkeit kann innerhalb von CPA der aktuelle Wert der Gasgeschwindigkeit in der entsprechenden 'Junction' verwendet werden. Da die Bewegung einer Flammenfront nicht durch eine volumenorientierte Diskretisierung erfasst werden kann, ist innerhalb des CPA-Moduls ein Flammenfrontverfolgungsmodell erforderlich. Dieses erfasst, im Gegensatz zu PROCOCO, auch zeitliche Änderungen der Flammgeschwindigkeit während der Bewegung zwischen den Zonen. Der eigentliche Verbrennungsvorgang wird weiterhin durch das bereits implementierte Verbrennungsmodell COMB berechnet.

Flammenfrontverfolgungsmodell

Die Ausbreitung der Flammenfront kann im Rahmen eines 'lumped parameter'-Modells nur entlang der vom Nutzer definierten Verbindungen zwischen den Zonen erfolgen. Da die Zone homogen ist und keine definierten Raumrichtungen in der Zone existieren, muss die Zündung einer Zone immer im Mittelpunkt der Zone angenommen werden.

Die Lage der Zonenränder ist entlang einer 'Junction' nicht definiert. Die Laufzeit der Flammenfront von einer Zone zu einer benachbarten Zone wird durch die vom Nutzer definierte Länge der Verbindung bestimmt. Die Gesamtheit aller Verbindungen definiert somit ein von den Zonengeometrien unabhängiges Wegenetz. Die Längen der Verbindungen sollten vom Nutzer derart gewählt werden, dass sie dem Abstand der Zonenmittelpunkte entsprechen. Die korrekte Definition der Verbindungslängen ist mitentscheidend für die Genauigkeit der Bestimmung der Flammenfrontpositionen.

Es verbleibt in jedem Fall eine zeitliche Differenz zwischen dem Überqueren der Zonengrenze durch die Flammenfront und dem Zünden der Zone, wenn die Flammenfront den Zonenmittelpunkt erreicht. Diese Differenz ist in dem versetzten Gitter für die Geschwindigkeits-, Massen- und Energiegleichung begründet. Eine Erhöhung der Genauigkeit ist nur durch eine feinere Diskretisierung erreichbar. Eine Definition von Zonengrenzen auf dem Wegenetz würde eine dreidimensionale Definition der Zonen erfordern und widerspricht damit dem Prinzip der 'lumped parameter'-Nodalisierung.

Ein weiteres Problem stellt die Definition der Flammenfrontgeschwindigkeit innerhalb einer Verbindung dar. Diese Geschwindigkeit hängt in starkem Maße von dem thermodynamischen Zustand und der Zusammensetzung des Gasgemisches vor der Flammenfront ab. Beim Überqueren einer Zonengrenze können sich diese Eigenschaften ändern. Innerhalb einer Verbindung existiert aber entsprechend der Definition des

'lumped parameter'-Modells nur eine Geschwindigkeit. Für die Eigenschaften des Mediums vor der Flammenfront können damit entweder ein Mittelwert der Eigenschaften der benachbarten Zonen oder die Eigenschaften in der Anfangs bzw. der Zielzone gewählt werden. Da sich während der Verbrennung der Zustand innerhalb dieser Zonen ändert, die Flammenfront aber weiterhin vor sich das unverbrannte Medium sieht, ist für die Berechnung der Flammenfronteigenschaften der Zustand der Zone mit dem größeren Wasserstoffgehalt zu wählen.

Die Bewegung der Flammenfront ist ein rein kinematisches Problem. Sie hat keinen direkten Einfluss auf die Thermodynamik in den Zonen. Das Flammenfrontverfolgungsmodell liefert deshalb auch nur Zündzeitpunkte. Diese wurden in dem gekoppelten Modell PROCOC-CPA bisher von PROCOC berechnet. Innerhalb des Flammenfrontverfolgungsmodells gibt es nur Wege und Geschwindigkeiten. Die Geschwindigkeiten setzen sich immer additiv aus der Gasgeschwindigkeit und der turbulenten Brenngeschwindigkeit zusammen, Durch die saubere Trennung von Flammenfrontmodell und zonenorientierter Thermodynamik ist eine vergleichbare numerische Stabilität wie in der derzeitigen Kopplung des CPA- und PROCOC-Moduls zu erwarten. Die Kopplung zwischen dem kinematischen Modell und dem volumenorientierten thermohydraulischen Zonenmodell erfolgt über die Verbrennungsrate. Diese berechnet sich aus der Flammenfrontgeschwindigkeit und dem Querschnitt der betreffenden 'Junction'. Falls von einer Zone mehrere 'Junction' ausgehen, ist die Summe aller Brennraten anzuwenden.

Ausbreitungsgeschwindigkeit innerhalb einer Zone

Das 'lumped parameter'-Konzept gestattet keine weitergehende Auflösung einer Zone, um den innerhalb dieser Zone ablaufenden Brennvorgang räumlich zu beschreiben. Eine Zone kann nur als Ganzes gezündet werden. Es ist aber nicht möglich, ausgehend von einem innerhalb der Zone definierten Zündort die Ausbreitung der Flammenfront in die verschiedenen Raumrichtungen zu beschreiben. Die einzige Beschreibung der Flammenwege von einer Zone zu einer anderen Zone ist durch die nutzerdefinierte Länge der zugehörigen Verbindungen gegeben. Diese sollte mit den geometrischen Abmessungen der benachbarten Zonen korrelieren.

Das Modell einer Flammenausbreitung muss diese für ein 'lumped parameter'-Konzept unvermeidlichen Einschränkungen berücksichtigen. Die Zündung einer Zone erfolgt deshalb grundsätzlich in der Mitte der Zone. Ausgehend von diesem Punkt läuft die Flammenfront entlang der durch die 'Junctions' definierten Richtungen zu den Mittel-

punkten der benachbarten Zonen. Diese Verbindungen beginnen und enden im Mittelpunkt einer Zone. Die Zündung der Nachbarzonen erfolgt somit wieder in der Mitte dieser Zonen. Die vom Nutzer definierte Länge dieser Verbindungen ist somit von entscheidendem Einfluss auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme.

Eine Berücksichtigung der unterschiedlichen Flammenfrontgeschwindigkeiten in horizontaler und vertikaler Richtung ist möglich. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme innerhalb einer Verbindung ist durch die Summe aus Flammengeschwindigkeit und Gasgeschwindigkeit gegeben. Ein Problem, welches aus dem 'lumped parameter'-Konzept folgt, ist der aktuelle Wasserstoffgehalt in der Zone. Definitionsgemäß ist eine Zone, bzw. die in ihr verteilten Gas, völlig homogen. Damit nimmt der Wasserstoffgehalt in der Zone während der Verbrennung ab. Die laminare Brenngeschwindigkeit ist aber von dem Wasserstoffgehalt abhängig. Im Extremfall könnte die Verbrennung bei hinreichend niedrigem Wasserstoffgehalt zum Erliegen kommen. In der Realität sieht die Flammenfront aber immer den vor der Flammenfront befindlichen Wasserstoff und dieser entspricht im Wesentlichen dem Wert vor Beginn der Verbrennung in der Zone.

Eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen, besteht in einer Aufteilung der Zone durch die Flammenfront in verschiedene Bereiche - unverbrannte und verbrannte. Das 'lumped parameter'-Modell stellt eine volumenorientierte Diskretisierung einer Transportgleichung mit konvektiven Termen und Quelltermen dar. Die Stabilität, Konvergenz und Konsistenz der Lösung dieser diskretisierten Gleichung ist nur gesichert, wenn bestimmte Bedingungen bei der Berechnung der Flüsse an den Rändern der einzelnen Volumina erfüllt werden.

Falls es sich um eine Transportgleichung für Masse oder Energie ohne Rückkopplung auf die Strömungsgeschwindigkeiten handelt, ist nur die Erhaltung dieser Größen zu berücksichtigen. Problematischer ist in jedem Fall die Kopplung von Variablen eines Lagrange-Modells mit den Variablen des 'lumped parameter'-Modells. Die Einführung eines Lagrange-Modells für die Bewegung der Flammenfront kann somit zu Stabilitätsproblemen bei der Lösung des gekoppelten Systems – 'lumped parameter' Gleichungen und Gleichungen des Lagrange-Modells – führen. Eine stabile Lösung besteht in der Verwendung des Wasserstoffanteils der Endzone. Die Umschaltung erfolgt somit nicht an der Zonengrenze. Diese ist im Datensatz auch nicht definiert. Diese Modellierung des Wasserstoffgehaltes "vor" der Flammenfront führt zu einem Fehler in der Berechnung der Flammenfrontgeschwindigkeit, welcher aber nur die entsprechend grobe

Nodalisierung des Systems widerspiegelt. Diese Lösung versagt in dem Fall, wo die Zielzone einen zu geringen Wasserstoffgehalt aufweist. In diesem Fall ist eine Variante mit der Anwendung des höchsten Wasserstoffgehaltes der beiden Randzonen günstiger. Damit wird verhindert, dass eine Zone welche über 'Junctions' nur zu Zonen mit niedrigem Wasserstoffgehalt angebunden ist, nicht gezündet werden kann. Derzeit sind beide Möglichkeiten implementiert.

Definition der Blockaden

Ein entscheidender Faktor für das Verhältnis von laminarer zu turbulenter Flammgeschwindigkeit ist der Blockadefaktor BI. Dieser beschreibt mit einem Wert zwischen 0 und 1 eine Verengung des Strömungsquerschnittes. In PROCO definiert sich dieser Faktor als Funktion des Verhältnisses von dem Strömungsquerschnitt einer Verbindung zu dem Strömungsquerschnitt in den Randzonen dieser Verbindung. Ein Blockadefaktor von Null stellt eine blockadefreie Verbindung dar. Eine solche Vorgehensweise setzt würfelförmige Zonen mit annähernd gleichen Seitenlängen voraus. Das liefert eine zwingende Nodalisierungsvorschrift für die Erstellung von Datensätzen für PROCO. Für CPA ist diese Vorgehensweise nicht möglich. Typische CPA Nodalisierungen beinhalten Zonen mit sehr unterschiedlichen Seitenverhältnissen. Diese sind erforderlich, um zum Beispiel die Gaskonzentrationen in randnahen Schichten zu erfassen. Auch die Modellierung von Plumes erfordert die Kopplung von geometrisch verschiedenen Formen. Die Bestimmung der Strömungsfläche innerhalb einer Zone als Quadrat der dritten Wurzel des Volumens

$$A_{\text{Zone}} = \sqrt[3]{V}^2$$

ist für Zonen mit unterschiedlich langen Seiten nicht möglich. Die Verbindung von zwei unterschiedlich großen Zonen liefert unabhängig von dem gewählten Querschnitt der dazwischen liegenden Verbindung einen Blockadefaktor größer Null. Die Nodalisierung für CPA erfordert somit die Definition der Blockadefaktoren BI durch den Nutzer. Abgesehen von speziellen Versuchsanordnungen sind große Teile des zu modellierenden Volumens blockadefrei. In diesem Fall ist die Vorgabe eines Blockadefaktors nur für einzelne blockierte Verbindungen durch den Nutzer sinnvoll. Für alle anderen Verbindungen wird automatisch Blockadefreiheit angenommen. Ein freies Volumen kann dadurch ohne zusätzliche Eingabedaten für die Blockaden nodalisiert werden. Im Fall von Versuchsanordnungen mit speziell eingebauten Blockaden gestattet die von der Ge-

staltung der einzelnen Zonen unabhängige Blockadeverteilung eine größere Freiheit bei der Nodalisierung. Diese kann zur genaueren Modellierung von anderen Prozessen genutzt werden.

Flammenfrontgeschwindigkeit

Die Flammenfrontgeschwindigkeit ist entscheidend für die Aussagekraft des hier vorgestellten Modells. Die in PROCOC und in DECOR verwendeten Korrelationen für die Berechnung der Turbulenzintensität sind für ein Flammenfrontmodell innerhalb CPA nicht geeignet. Das in PROCOC verwendete Modell von Peters /PET 97/ für die turbulente Brenngeschwindigkeit erfüllt alle Anforderungen und soll deshalb auch in dem Flammenfrontmodell in CPA eingesetzt werden. Die Berechnung der dafür erforderlichen Turbulenzintensität ist in einem 'lumped parameter'-Programm grundsätzlich nicht möglich. Es werden keine Scherspannungen berechnet und es gibt auch kein Turbulenzmodell, welches daraus Turbulenzintensitäten berechnen könnte. Somit bleibt nur ein parametrischer Ansatz, welcher die grundlegenden turbulenzauslösenden Faktoren beinhaltet. Die Parameter in diesem Ansatz müssen über Experimente angepasst werden. Die Korrelation für die Turbulenzintensität soll eine getrennte Behandlung der durch die Blockaden und die Gasströmung erzeugten und der durch die Flamme induzierten Anteile der Turbulenz ermöglichen. Sowohl DECOR als auch PROCOC verwenden für die Berechnung des Turbulenzanteils aus der Gasströmung eine monotone Funktion der Gasgeschwindigkeit. Bei einer Gasgeschwindigkeit $U_m = 0$ ist auch der zugehörige Anteil der Turbulenzintensität u' gleich Null. Beide Korrelationen haben die gleiche Struktur:

$$u' = C(\rho, \mu, Bl) U_m Re^n$$

Die Werte der Parameter sind fest vorgegeben und entsprechen der Geometrie einer speziellen Versuchsanlage. Eine direkte Verknüpfung der Turbulenzintensität u' mit der Reynolds-Zahl Re erscheint als die physikalisch sinnvollste Variante. Der turbulenz erzeugende Einfluss von Blockaden soll als Faktor e^{Bl} über eine getrennte Funktion erfasst werden. Damit ist diese Korrelation nicht so anpassungsfähig wie die Korrelation in PROCOC, in welcher die Gasgeschwindigkeit und der Blockadefaktor verknüpft sind. Die Bestimmung der Parameter wird aber erleichtert. Die folgende Korrelation ist derzeit in dem Modell implementiert:

$$u' = C U_m Re^n e^{Bl}$$

Wenn der Blockadefaktor Bl gleich Null ist, bleibt die Turbulenzintensität u' unverändert.

Implementierungsdetails

Die Berechnung der Flammenfrontgeschwindigkeit, die Integration dieser Geschwindigkeit und die Definition der Zündzeitpunkte für die einzelnen Zonen erfolgt in dem Unterprogramm FRONT. Dort werden auch die Brennraten in den Zonen ermittelt und in Brenndauern umgerechnet. Der Zündzeitpunkt und die Brenndauer werden an das Verbrennungsmodell COMB übergeben. Dieses rechnet damit in gleicher Weise wie bei einer nutzerdefinierten Verbrennung. Der Nutzer definiert im Datensatz den Zündzeitpunkt und den Ort der Zündung als Namen der Zone. Zusätzlich müssen die Blockaden in den 'Junctions' definiert werden. Standardmäßig wird keine Blockade angenommen. Vorhandene Blenden, Querschnittsverengungen etc. müssen durch den Nutzer in der Struktur CONNECTION definiert werden. Weitere Eingaben sind für das Flammenfrontmodell nicht erforderlich.

Für Untersuchungen zum Modell sind weitere Eingaben möglich. Diese überschreiben die Standardvorgaben. Die Parameter in der Korrelation zur Berechnung der Turbulenzintensität können in der Eingabestruktur COMB überschrieben werden. In dem COMB-Verbrennungsmodell ist die Eingabe der unteren Ausbrandgrenze erforderlich. Der Nutzer kann damit eine vollständige Verbrennung des Wasserstoffs erzwingen. Diese unrealistische Annahme kann für konservative Betrachtungen von Interesse sein. Unter Berücksichtigung der gemessenen restlichen Wasserstoffanteile im Experiment HX23 wurde die untere Ausbrandgrenze fest auf 2 Vol.-% Wasserstoff gesetzt.

In PROCO werden die Turbulenzintensitäten für jede 'Junction' neu auf der Grundlage der Blockadefunktion berechnet. Die an einer Blockade erzeugte Turbulenz ist dadurch in der nächsten 'Junction' auf demselben Strömungsweg nicht mehr vorhanden. Um diesen in PROCO auftretenden unrealistischen Abfall der Turbulenzintensität zu vermeiden, wird in diesem Fall ein gewichteter Mittelwert der Turbulenzintensität der beiden 'Junctions' verwendet. Sowohl die untere Ausbrandgrenze als auch der Abfall der Turbulenzintensität können im Rahmen einer weiteren Validierung angepasst werden. Eine Eingabe durch den Nutzer ist im Interesse der einfachen Bedienbarkeit derzeit nicht vorgesehen.

7.2.1.3 Austesten des Modells

Parameterschätzung

Die Korrelation zur Berechnung der Turbulenzintensität besitzt drei freie Parameter: C , n und ein neu eingeführter Vorfaktor von Bl in der oben genannten Korrelation für die Turbulenzintensität. Diese wurden mittels Validierungsrechnungen derart bestimmt, dass ein Satz von Parametern eine hinreichend genaue Nachrechnung von mehreren verschiedenen Experimenten ermöglicht. Dieser Satz von Parametern ist als Standard im Programm gesetzt. Eine Verbrennungsrechnung erfordert deshalb auch keine Eingabe dieser Parameter.

Falls für weitere Experimente eine Verbesserung des Modells oder der freien Parameter angestrebt wird, ist ein Überschreiben dieser Parameter im Datensatz möglich. Es ist in diesem Fall aber immer die Konsistenz der neuen Parameter mit den vorhandenen Experimenten zu berücksichtigen.

Ausgangspunkt der Bestimmung der drei Parameter für die Turbulenzintensität ist das RUT-Experiment. Die quasi eindimensionale Ausbreitung der Flammenfront und die Anordnung der Fotodioden entlang dieses Pfades gestatten einen einfachen Vergleich der Rechnung mit dem Experiment. Es zeigt sich, dass eine Vielzahl von Parameterkombinationen den Flammenfrontverlauf hinreichend genau wiedergibt. Nicht alle dieser Parameterkombinationen liefern aber gute Ergebnisse für die anderen Experimente. Die derzeit implementierten Werte liefern für die drei Experimente RUT, HDR und HX23 zufrieden stellende Ergebnisse. Die Nachrechnungen dieser Experimente werden in den folgenden drei Abschnitten dargestellt. Die zugehörigen Datensätze sind in der Archivierungs-Datenbank (CVS-Repository) von ASTEC 2.0 im Verzeichnis Validierung/front gespeichert und werden in der Version ASTEC 2.0 den Nutzern zur Verfügung stehen.

RUT Experiment HYCOM01

Die Daten zu den Anfangs- und Randbedingungen entstammen dem Bericht /SCH 99/. Abb. 7-1 zeigt ein Schema der Versuchsanlage für das Experiment HYCOM01. Abb. 7-2 zeigt die gewählte Nodalisierung für diesen Versuch.

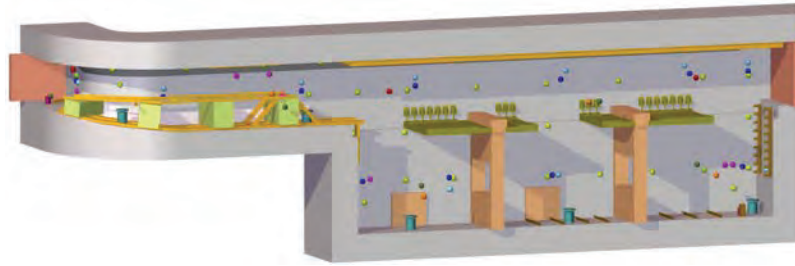


Abb. 7-1 RUT Versuchsanlage für den Versuch HYCOM01

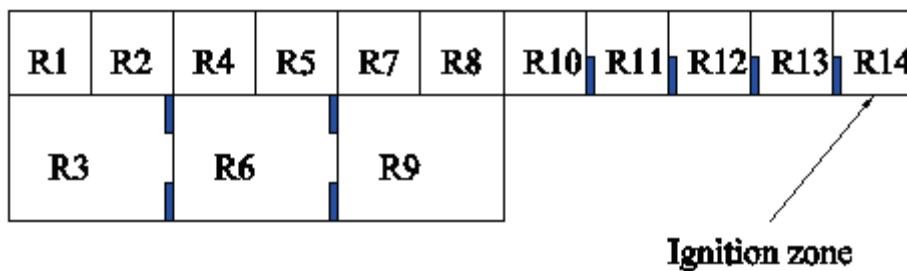


Abb. 7-2 Nodalisierung der RUT Versuchsanlage für den Versuch HYCOM01

In der Abb. 7-3 ist die Ausbreitung der Flammenfront entlang einer Linie im oberen Teil der Versuchsanordnung dargestellt. Die berechneten Kurven ergeben sich aus den Zündzeitpunkten der Zonen: R13, R12, R11, R10, R8, R7, R5, R4, R2 und R1. Die im Experiment gemessene Kurve wurde aus /SCH 99/ übernommen. Die Rechnung wurde mit den Standardparametern für die Korrelation der Turbulenzintensität durchgeführt. Durch Variation dieser Werte ist eine fast ideale Übereinstimmung mit dem Experiment erreichbar. Diese, dann an RUT angepassten Werte, liefern aber schlechtere Übereinstimmungen für die anderen hier betrachteten Experimente.

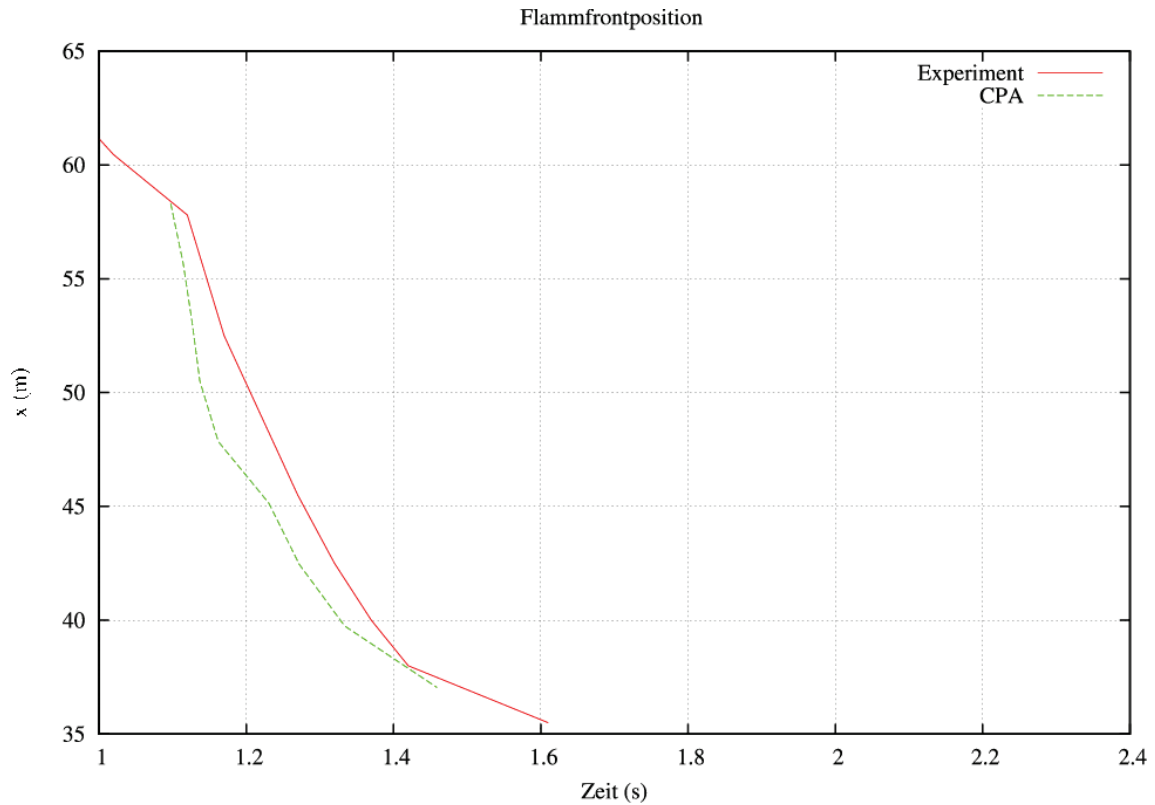


Abb. 7-3 Flammenfrontposition

HDR E12.3.2

Alle Angaben für dieses Experiment wurden aus dem Bericht /HEI 97/ zur Nachrechnung dieser Experimente mit dem Verbrennungsmodell DECOR entnommen. Der ausgewählte Versuch E12.3.2 beinhaltet eine Zündung am geschlossenen Raume und eine relativ langsame Verbrennung in diesem Raum. Die Öffnung zum nächsten Raum stellt eine Blockade dar und bewirkt eine turbulente Flammbeschleunigung. In Abb. 7-4 ist die Versuchsanordnung dargestellt. Der Zündraum wurde in vier Volumina unterteilt. In Abb. 7-5 sind die Druckverläufe dargestellt. Dabei zeigen sich die bereits oben dargestellten Probleme. Die laminar beginnende Verbrennung, welche zu Beginn nur ein kleines Volumen des Raumes betrifft, kann mit dem Flammenfrontmodell nicht simuliert werden. Im Zündraum findet sofort eine turbulente Verbrennung statt. Die Ergebnisse können somit erst ab dem Zeitpunkt der voll ausgebildeten Verbrennung im Experiment verglichen werden. Dieses Problem kann durch die Annahme einer laminaren Verbrennung in der Zündzone teilweise gelöst werden. Der zu hohe Druck am Ende der Verbrennung beruht im wesentlichen auf der zu hohen Ausbrandrate im Raum R1801.

Hier ist es erforderlich, die Zündbedingungen in Abhängigkeit von der Brennrichtung zu modifizieren. Diese Option ist bereits vorbereitet und kann bei entsprechend erweiterter Nodalisierung getestet werden.

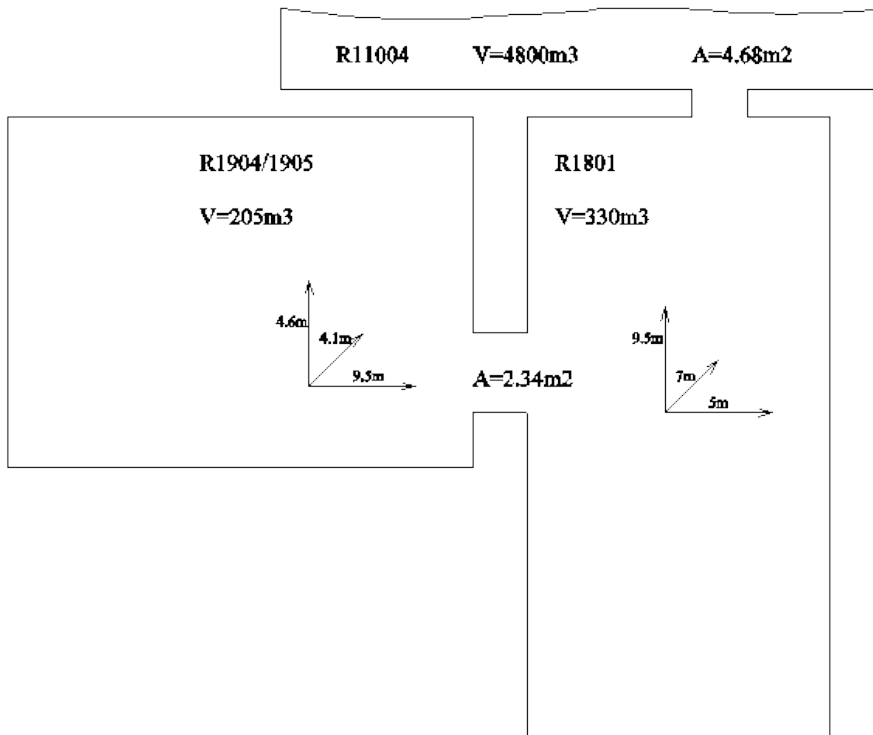


Abb. 7-4 HDR-Versuchsanlage für den Versuch E12.3.2

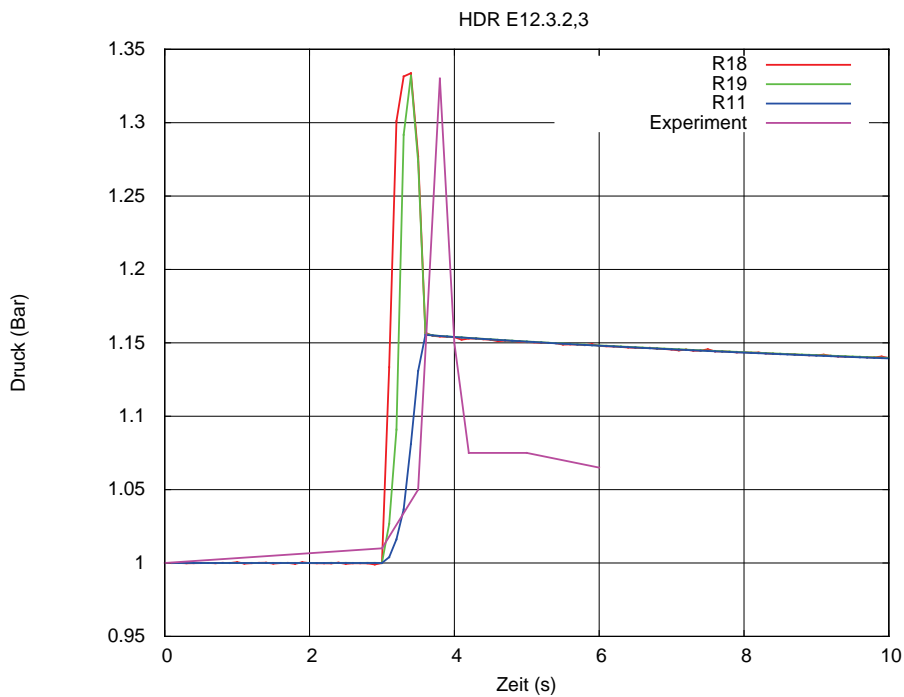


Abb. 7-5 Druckverlauf in HDR E12.3.2

Battelle Versuchscontainment Experiment HX23

Aus der Vielzahl der Wasserstoffverbrennungsexperimente im Battelle-Versuchscontainment wurde das Experiment HX23 ausgewählt. Dieses Experiment wurde bereits in einer vergleichenden Untersuchung /HEI 03b/ zur Validierung der Programme DECOR und PROCO verwendet. Abb. 7-6 zeigt die Nodalisierung. Die Zündung erfolgt im Raum 1B. Es wurden keine wärmeleitenden Strukturen modelliert. Der im Experiment auftretende Druckabfall nach Beendigung der Verbrennung wird deshalb nicht simuliert. Der Zündzeitpunkt in der Rechnung wurde gegenüber dem Experiment verschoben, um die Kurven besser unterscheiden zu können. Unabhängig vom Verbrennungsmodell ist die Druckdifferenz zwischen dem Entspannungsraum R9 und den Verbrennungsräumen stark von den Zeta-Werten für die Verbindung R9 bis R5 abhängig.

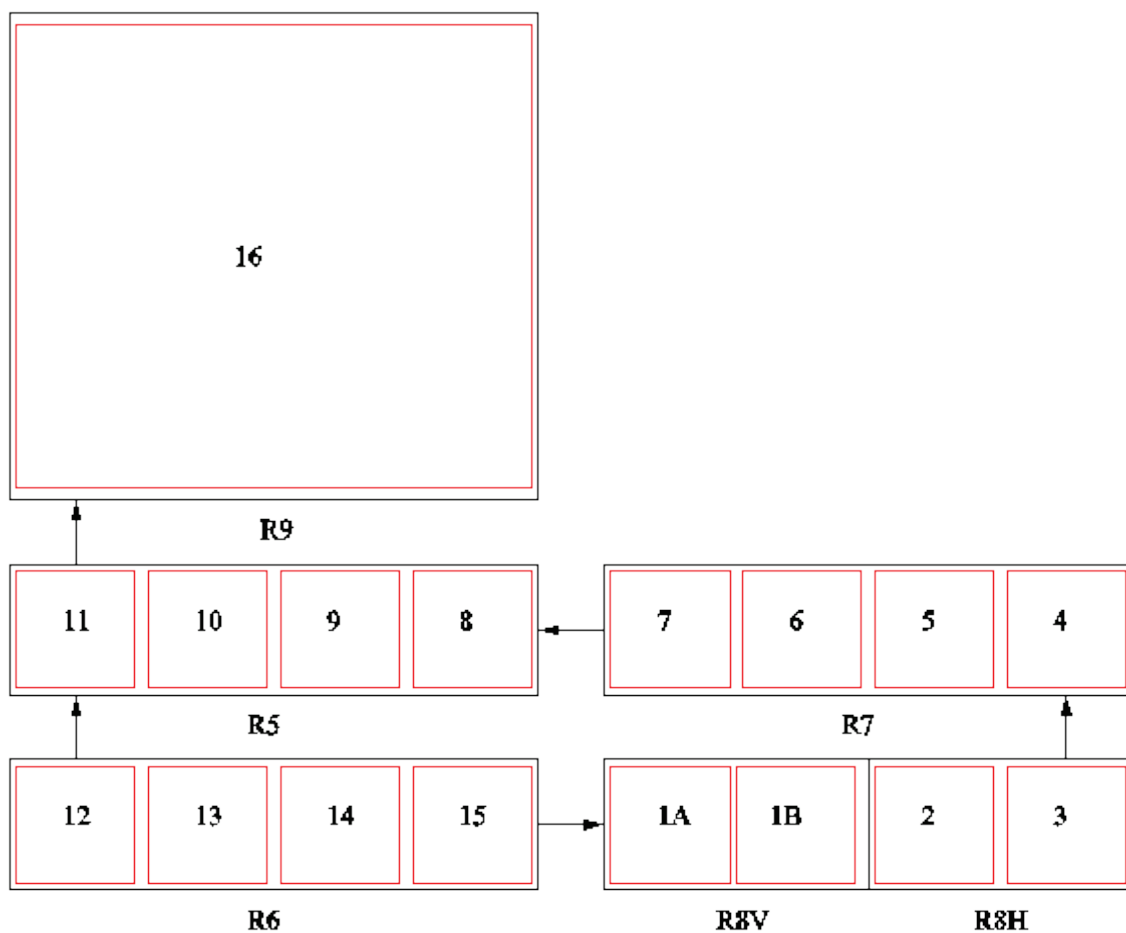


Abb. 7-6 Nodalisierung des Battelle Versuchscontainments für HX23

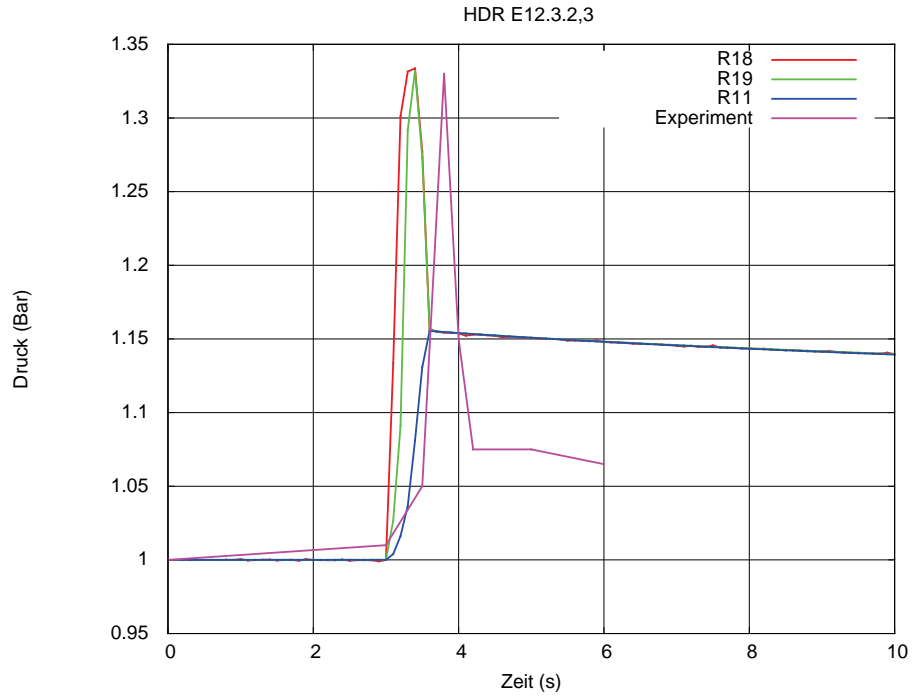


Abb. 7-7 Druck in allen Zonen

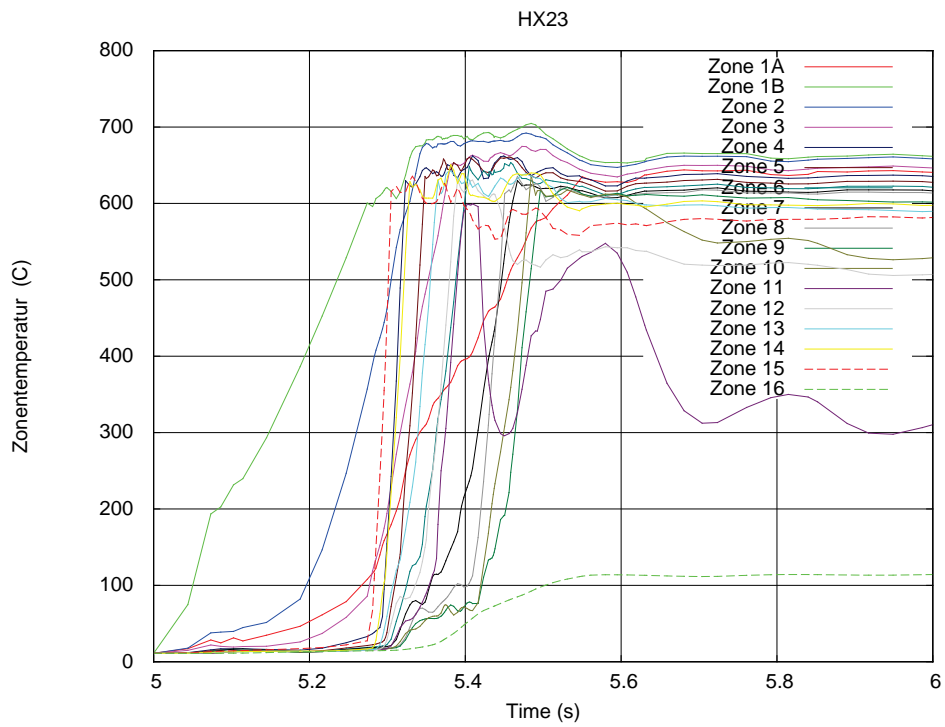


Abb. 7-8 Temperatur in allen Zonen

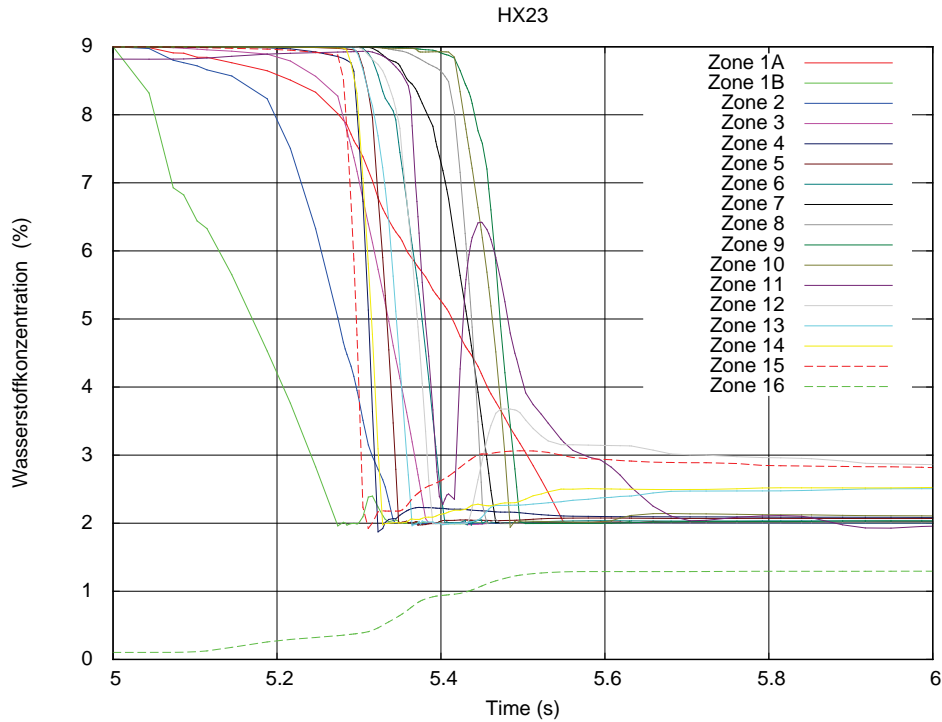


Abb. 7-9 Wasserstoffkonzentration in allen Zonen

Zusammenfassung und weiterführende Arbeiten

Die ursächliche Zielstellung des neuen Flammenfrontmodells wurde erreicht. Der Nutzer kann ohne zusätzliche Eingaben eine Wasserstoffverbrennung innerhalb von CPA, dem Thermohydraulikmodul in ASTEC für das Containment, berechnen. Das vorgestellte Modell gestattet die Simulation unterschiedlicher Experimente ohne Änderung der Modellparameter. Damit ist ein wesentlicher Schritt zu einem einheitlichen Verbrennungsmodell getan. Der für die Modellierung der Verbrennung notwendige Rechenaufwand liegt in der gleichen Größenordnung wie der Aufwand für die Thermodynamik des Systems. Die Parameter für die Berechnung der Turbulenzintensität wurden für die drei vorgestellten Experimente optimiert. Die Qualität der Simulation lässt sich durch Einbeziehen weiterer Parameter noch verbessern. Hierzu gehören das Abklingen der Turbulenz, die Ausbrandrate und die richtungsabhängige Fortpflanzung in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration. Eine weitergehende Optimierung sollte eine größere Anzahl von Experimenten mit einbeziehen. Hier ist die Vielzahl der gut dokumentierten Experimente an dem Battelle-Versuchscontainment von besonderem Interesse.

7.2.1.4 Einbau eines Sigma-Lambda-Kriteriums

Auf der Grundlage eines Algorithmus vom Kurchatov-Institut wurde das Sigma und Lambda Kriterium in ASTEC implementiert. Dem Nutzer steht damit für jede Zone ein Kriterium für die Flammenbeschleunigung und für den Übergang zur Detonation zur Verfügung. Die berechneten Werte werden in der SIGAL-Datenbank gespeichert und können geplottet werden.

7.2.2 CESAR-DIVA-Kopplung

Die Thermohydraulik des Reaktorkühlkreislaufs und teilweise des Reaktordruckbehälters werden mit dem ASTEC-Modul CESAR simuliert und die Kernaufheizung und Kernzerstörung mit dem Modul DIVA. Beide Module sind aufgrund der physikalischen Vorgänge eng miteinander zu koppeln. Insbesondere die bei der Berechnung eines kompletten Störfallszenarios notwendige "Umschaltung" vom Thermohydraulikmodul CESAR auf die gekoppelte Rechnung mit CESAR-DIVA zeigte deutliche Einschränkungen und Schwächen auf. Am Anfang einer solchen Störfallanalyse wird der gesamte Kühlkreislauf inklusive des RDB allein vom Modul CESAR simuliert. Erst mit Beginn der Kernfreilegung und den dann einsetzenden Oxidationsprozesse an den Hüllrohren und der damit verbundenen Aufheizung des Kerns, gefolgt von Kernzerstörung und Kernverlagerung, ist das Modul DIVA zu aktivieren. Diese Aktivierung wurde ursprünglich über ein Zeitkriterium, das vom Anwender zunächst durch Wiederholungsrechnungen des betrachteten Störfalls oder Experiments bestimmt werden muss, sichergestellt.

Dabei zeigte sich jedoch, dass die numerische Kopplung zwischen CESAR und DIVA einerseits und die Behandlung speziell von Phänomenen im Zweiphasengebiet des Kerns andererseits sowohl zu numerischen Problemen als auch zu physikalisch unrealistischen Zuständen führen konnte. So kann z. B. die Einspeisung der Druckspeicher ins obere Plenum und die Verlagerung von Wasser in die Kernregion, die zu einer Gegenströmung von abwärts fließendem Wasser und aufwärts gerichtetem Dampfstrom führt, selbst nicht korrekt wiedergegeben werden. Dies wiederum führte im Bezug auf die Thermohydraulik teilweise zu nicht realistischen Zuständen im Kern. So wird Wasser, das an der Kernoberkante z. B. aufgrund der Druckspeichereinspeisung ins obere Plenum verfügbar ist, als Folge der 0-dimensionalen Beschreibung automatisch in der Wasservorlage im unteren Plenum bzw. im unteren Bereich des Kerngebietes bilanziert.

Als eine erste, allerdings als vorläufig anzusehende Lösung zur Umgehung dieses speziellen Problems wurden mit Freigabe der Version 1.30 deshalb neue, verbesserte Kriterien eingeführt, die dem Anwender die Möglichkeit geben, die Umschaltung von CESAR auf CESAR-DIVA speziell an die Erfordernisse des jeweils betrachteten Störfalls anzupassen. Dies führt z. B. für den betrachteten Fall der Einspeisung der Druckspeicher ins obere Plenum dazu, dass die Umschaltung möglichst lange hinausgezögert wird. Entsprechende Kriterien können dabei vom Anwender definiert werden. Diese orientieren sich dabei an thermohydraulischen Zuständen im Kerngebiet, wie z. B. dem Dampfanteil im Kern oder auch den Hüllrohrtemperaturen. Damit können Szenarien wie das frühe Fluten eines Kerns, der noch keine Kernzerstörung aufweist, möglichst mit CESAR gerechnet werden, dessen Thermohydraulik-Modelle wesentlich umfangreicher sind. Für die späte Phase eines Störfallszenarios, das durch erhebliche Kernzerstörungsprozesse charakterisiert sein kann, ist das Wiederfluten eines solchen teilzerstörten Kerns jedoch aus den o. a. Gründen weiterhin nicht realistisch modellierbar.

Für die für Frühjahr 2009 geplante Version ASTEC V2.0 sind deshalb weitere, entscheidende Modifikationen seitens IRSN geplant, die teilweise aber erst nach deren Komplettierung in den dann folgenden Versionen V2.1 bzw. V2.2 greifen. Voraussetzung dafür ist jedoch eine wesentlich verbesserte Abbildung der Prozesse und Phänomene in der Kernzerstörungsphase. Dazu wird das bisher genutzte Modul DIVA durch das französische Programm ICARE2 ersetzt. Dieses bietet zunächst die Möglichkeit einer deutlich gesteigerten Modellgüte und insbesondere kann dann auch das Schmelzeverhalten im Kern selbst realistischer beschrieben werden. Diese Arbeiten stellen jedoch nur einen ersten Teilschritt dar.

In nachfolgenden Arbeiten ist derzeit geplant, die Kopplung von CESAR mit ICARE2, so wie sie bisher auch für die Kopplung CESAR-DIVA existiert, vollständig durch eine andere Strategie zu ersetzen. Erste Diskussionen dazu waren schon früh mit den Entwicklern des GRS-Programms ATHLET-CD geführt worden. Seitens der GRS war schon früh auf die Problematik der CESAR-DIVA Kopplung hingewiesen worden. Charakteristisch für diese Kopplung ist, dass mit Aktivierung des DIVA-Moduls die Thermohydraulik, die bis zu diesem Zeitpunkt komplett von CESAR berechnet wird, also Kühlkreislauf einschließlich Reaktordruckbehälter (RDB), ab diesem Zeitpunkt teilweise auch von DIVA gerechnet wird. Dies gilt für die Kernregion bis Kernoberkante sowie für das untere Plenum und Teile des Ringraums des RDB. CESAR selbst berechnet dann

nur noch den oberen Teil des RDB ab Kernoberkante und den Kühlkreislauf. Insbesondere die Druckiteration an den Schnittstellen der Module wurde als anfällig für numerische Instabilitäten eingeschätzt.

Alternative Methoden der Kopplung, wie sie z. B. erfolgreich für ATHLET-CD realisiert worden sind, wurden mit Rücksicht auf die dann möglicherweise enorm ansteigenden Rechenzeiten, die für einen Integralcode nicht akzeptierbar wären, zunächst nicht weiter verfolgt. Vor dem Hintergrund gestiegener Anforderungen der ASTEC-Anwender und insbesondere numerischer Probleme der derzeitigen Kopplung ist die schon diskutierte Kopplung in ATHLET-CD wieder aufgenommen worden. Dabei wird, wie auch bei ATHLET-CD, die Thermohydraulik im gesamten Kühlkreislauf einschließlich RDB auch in der Phase der Kernzerstörung gerechnet, während die Kernstrukturen selbst von ICARE2 bzw. vom CD-Teil von ATHLET gerechnet werden. Die Schnittstelle zwischen den Modulen liegt dann an der Strukturoberfläche der Kernmaterialien. Die damit verbundenen, sehr aufwändigen Arbeiten werden von Seiten des IRSN ab 2009 in Angriff genommen, mit einer ersten, internen Version ist für Ende 2009 zu rechnen. Für diese Arbeiten hat man sich auf eine enge Zusammenarbeit zwischen den ICARE2-Entwicklern bei IRSN und den ATHLET-CD-Entwicklern verständigt. Dabei fließen die langjährigen Erfahrungen aus der ATHLET-CD Entwicklung im Rahmen des jetzt vorgeschlagenen Projekts zur ATHLET-CD-Entwicklung sowie aus dem Entwicklungsvorhaben zu COCOSYS und ASTEC ein. Diese Arbeiten sind insbesondere auch aufgrund der spezifischen Eigenheiten eines SWR für die Erweiterung von ASTEC auf SWR notwendig.

Vor dem Hintergrund der derzeitigen, neuen Strategie seitens IRSN zur CESAR-ICARE2-Kopplung sind die Arbeiten zu diesem Unterpunkt daher obsolet geworden.

7.2.3 SWR-Modelle

Für die Simulation von speziell in Siedewasserreaktoren (SWR) auftretenden Phänomenen und Vorgängen sind u. U. Modellerweiterung im Containmentteil CPA erforderlich. Im Rahmen der ASTEC Entwicklung soll die Anwendbarkeit des Programms auf Kernkraftwerke mit Siedewasserreaktoren verbessert werden. Dies trifft auch für den Containmentteil CPA zu.

7.2.3.1 Optimierung der Modellierung von Kondensationsrohren

Unter diesem Arbeitspunkt sollte das schnell rechnende Modell zur vereinfachten Simulation der Kond.-Rohre des Druckabbausystems, das in COCOSYS entwickelt wurde, nach CPA übertragen werden. Im Folgenden wird das Modell kurz beschrieben und seine Validierung anhand der Nachrechnung des GKSS-M1-Experimentes aufgezeigt. Das Modell wurde in die Entwicklerversion implementiert und wird somit in der neuen Version ASTEC V2.0 verfügbar sein. Die Arbeiten sind im Detail in /ARN 07/ dargestellt.

Modell zur vereinfachten Simulation von Kond.-Rohren

Zur Abbildung von Druckabbausystemen steht in ASTEC-CPA das DRASYS-Zonenmodell zur Verfügung. Dieses Modell beschreibt im Detail die Kurzzeitvorgänge bei Freiblasen und Wasseraufwurf. Unter bestimmten Umständen kann dieses Modell insbesondere beim Vorliegen von nur geringen Druckdifferenzen über die Wasservorlage wesentlich die Integrationsschrittweite begrenzen und damit die Rechenzeit stark anheben. Andererseits sind in der Langzeitphase von schweren Störfällen die dynamischen Phänomene nicht mehr von Bedeutung. Dann bietet sich die Verwendung des neuen, schnell laufenden Modells für die Kondensationsrohre an.

Das neue Modell basiert auf dem Modell für eine Atmosphärenverbindung, die durch ein Ventil gesteuert wird (ATM_VALV) und in den FLUID-Zonenteil einer Nichtgleichgewichtszone eintaucht (INSERTION Option). Dabei wird die Verbindung nur dann geöffnet, wenn die wirkende Druckdifferenz größer als die Eintauchtiefe ist. Das Modellprinzip ist in Abb. 7-10 dargestellt.

Dampf, der über die Verbindung in das Wasser einströmt, wird vollständig kondensiert. Die nichtkondensierbaren Gase werden in die Atmosphäre darüber freigesetzt, wobei vorausgesetzt ist, dass sie die Wassertemperatur erreicht haben. Der Massen- und Energieaustausch an der Wasseroberfläche (z. B. Verdampfung des Wassers bei Annäherung an die Sättigungstemperatur) wird durch die vorhandenen Modelle im Nichtgleichgewichtsmodell berechnet. Im Unterschied zum DRASYS-Zonenmodell wird hier auch das Abfallen des Wasserstandes unter das Ende des Kondensationsrohres berücksichtigt. Das Durchbrechen des Gasstromes beginnt, sobald die Eintauchtiefe kleiner wird als der Rohrradius. Bis zum völligen Freilegen wird eine lineare Erhöhung des

durchbrechenden Gasanteils angenommen, d. h. die Kondensation des Dampfanteils nimmt ab.

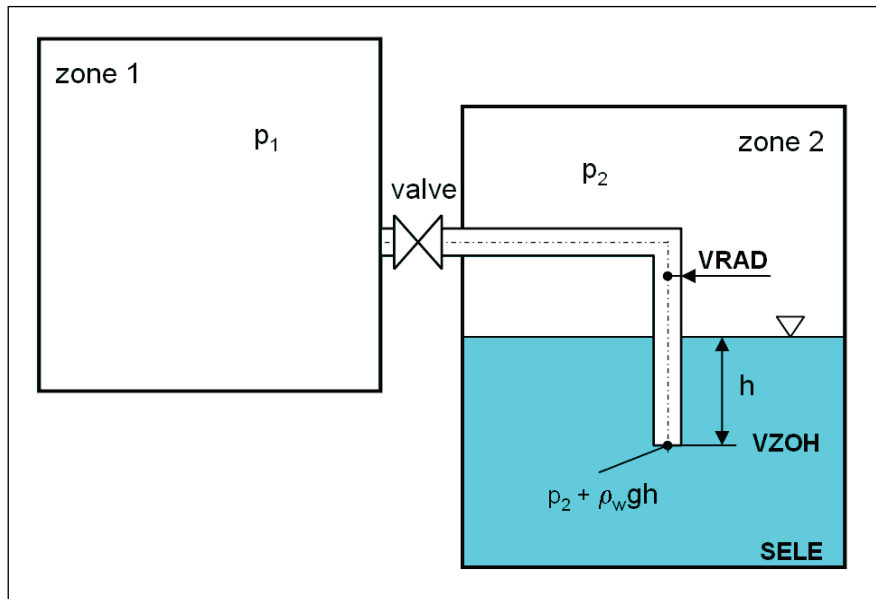


Abb. 7-10 Schema der Kondensationsrohrsimulation durch ATM_VALV Verbindung plus INSERTION Option

Neben der normalen Zonendefinition und den Daten für ein ATM_VALV sind folgende Informationen erforderlich:

- VZOH -absolute Höhe (m) des unteren Ende des Kondensationsrohres,
- VINS -Hysterese-Druckdifferenz (Pa) für Öffnen und Schließen der Verbindung,
- VRAD -Radius eines Kondensationsrohres (m),
- VALV -Name des Ventils zur Kontrolle der Verbindung.

Das Modell wird aktiviert, wenn der Nutzer im Eingabedatensatz den Wert VZOH angibt.

Der Wert VZOH wird verwendet, um den hydrostatischen Druck des eingetauchten Rohres entsprechend dem aktuellen Wasserstand in der Zone zu ermitteln: $\rho_w g h$. Die Verbindung öffnet, wenn die Druckdifferenz über die Wasservorlage größer ist. Um ein wiederholtes Öffnen und Schließen bei Druckdifferenzen nahe der Eintauchtiefe zu verhindern, wird eine Hysterese verwendet, d.h.:

Öffnen: $\Delta p = (p_1 - p_2 - \rho_w g h) > 0,1 \cdot VINS$

Schließen: $\Delta p < -0,5 \cdot VINS$.

Im Bereich der Druckdifferenz [0...VINS] wird die wirksame Verbindungsfläche linear zwischen Null und der geometrischen Fläche erhöht: $A = A_{\text{geo}} (\Delta p / \text{VINS} + 0,001)$. Weitere Randbedingungen und Modellgrenzen sind in /ARN 07/ dokumentiert.

Die Verbindung kann zusätzlich und unabhängig vom Wasserstand durch das Ventil über EVENTS von ASTEC gesteuert werden.

Modellvalidierung anhand des GKSS-M1-Experimentes

Zur Validierung des Modells konnte auf entsprechende Arbeiten für COCOSYS zurückgegriffen werden /NOW 07/. Der COCOSYS-Datensatz wurde auf ASTEC-CPA umgesetzt und die Validierungsrechnung wiederholt. Der Datensatz wurde in das ASTEC-Versionsverwaltungssystem (CVS) eingespeist und ist damit allgemein verfügbar.

Der Datensatz bildet den GKSS Mehrrohr-Versuchsstand vereinfacht durch 3 Zonen inklusive einer Umgebungszone ab (Abb. 7-11). Die ATM_VALV Verbindung J1 zwischen der Bruchzone R2-BREAK und der Wasservorlage D1-PSS taucht dabei als Kondensationsrohr in den FLUID-Zonenteil ein.

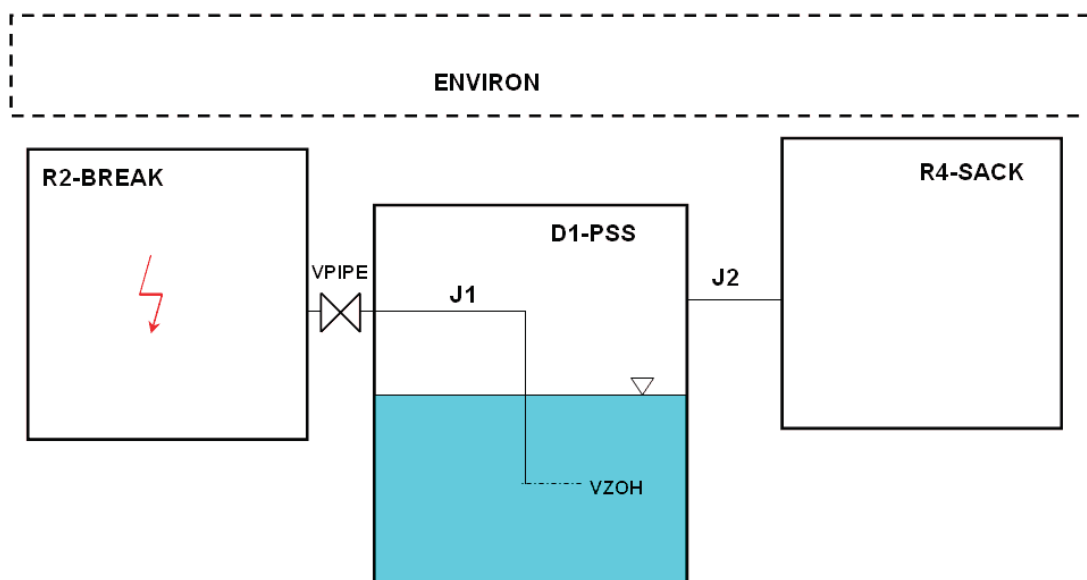


Abb. 7-11 GKSS M1, Nodalisierung mit 4 Zonen

Das Experiment M1 simuliert dabei ein Dampfleck über den Zeitbereich von 400 s. Durch den freigesetzten Dampf steigt in Zone R2-BREAK der Druck. Nach Überschreiten des Druckes entsprechend der Eintauchtiefe des Kondensationsrohres strömt das

Gasgemisch in die Wasservorlage, der Dampf kondensiert und erwärmt den Pool, die Luft wird in den Expansionsraum R4-SACK gedrückt.

Exemplarisch sind einige Rechenergebnisse in Abb. 7-12 bis Abb. 7-14 dargestellt. Den Ergebnissen von ASTEC-CPA (rote Kurven) sind dabei die COCOSYS-Rechnungen (blaue Kurven) sowie verfügbare experimentelle Daten (schwarze Kurven) gegenüber gestellt. Die COCOSYS- und ASTEC-Ergebnisse sind im Prinzip identisch, was die korrekte Implementierung des Modells in ASTEC demonstriert. Für tiefer gehende Diskussionen der Validierungsergebnisse wird auf /NOW 07/ verwiesen.

Der glatte Verlauf des berechneten Massenstromes in Verbindung J3 (Abb. 7-14) ermöglicht eine relative große Integrationsschrittweite und damit kurze Rechenzeiten. Ein Messwert zur Bewertung liegt hierfür nicht vor.

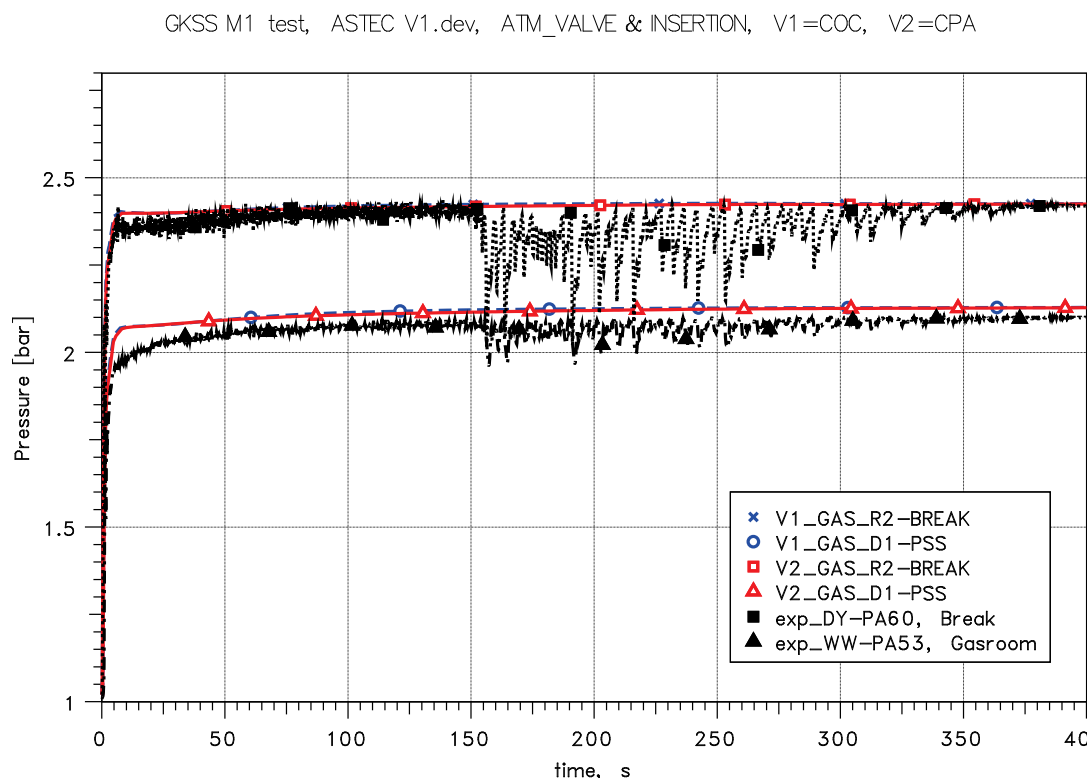


Abb. 7-12 GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Druck in Zonen R2-Break und D1-PSS

GKSS M1 test, ASTEC V1.dev, ATM_VALVE & INSERTION, V1=COC, V2=CPA

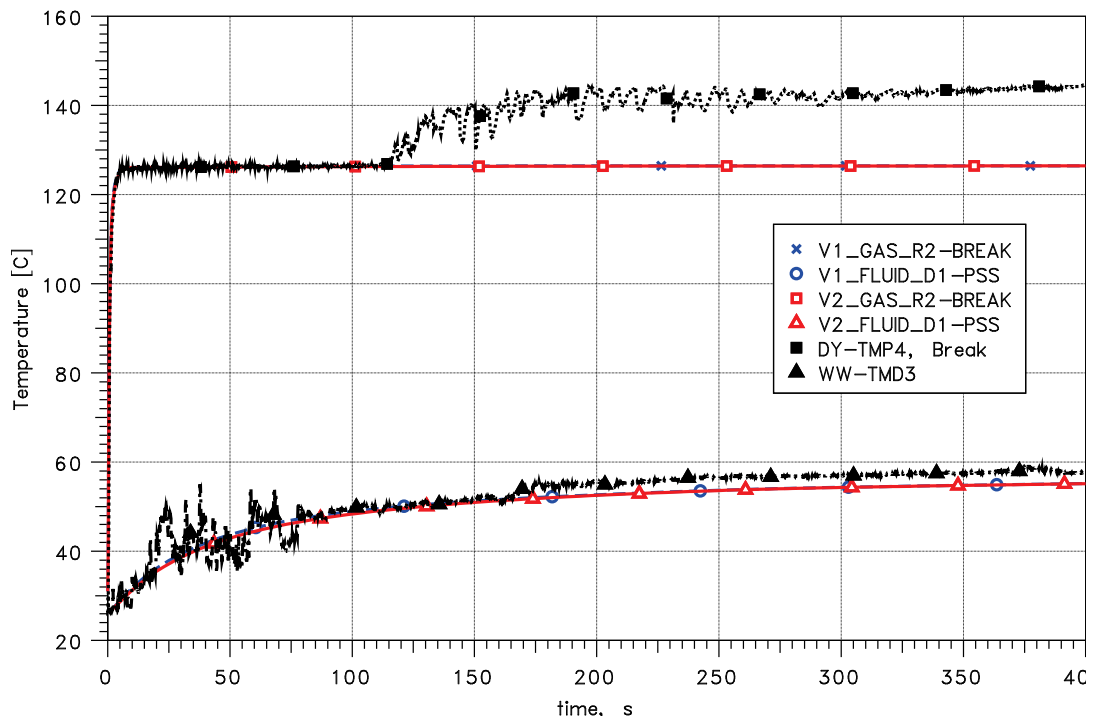


Abb. 7-13 GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Atmosphären-temperaturen in R2-Break und D1-PSS

GKSS M1 test, ASTEC V1.dev, ATM_VALVE & INSERTION, V1=COC, V2=CPA

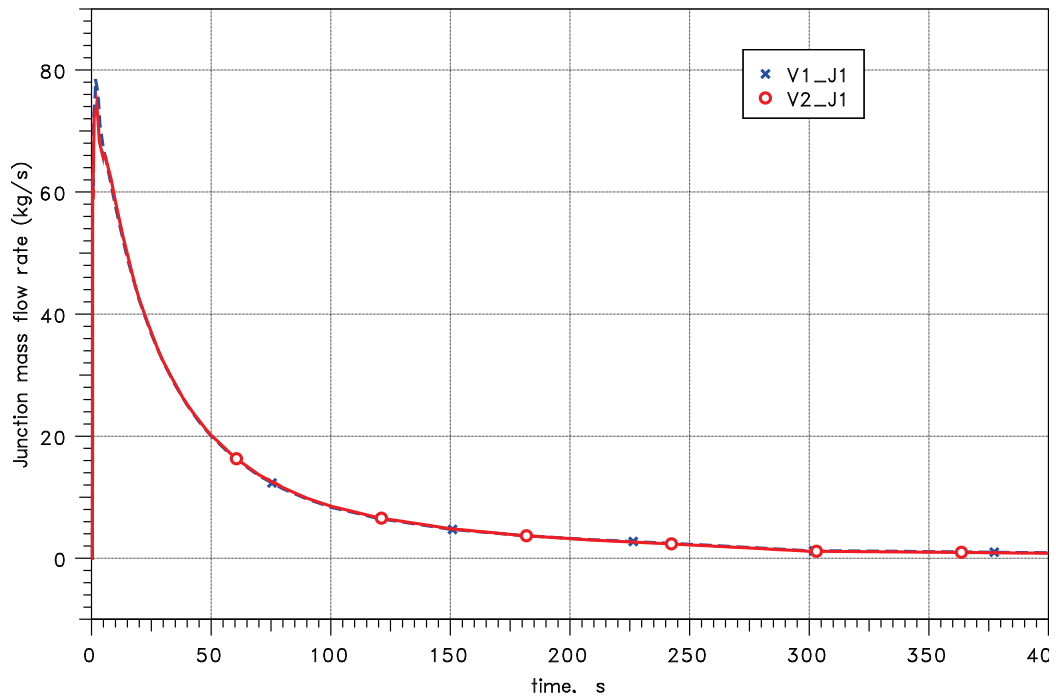


Abb. 7-14 GKSS M1, COCOSYS (Variante V1) und ASTEC (V2), Massenstrom in Verbindung J1

Im Rahmen der Arbeiten wurde darüber hinaus überprüft, dass die Modelländerungen keine unerwünschten Nebeneffekte hervorrufen. Dies wurde anhand eines ASTEC-Validierungsfalles sowie einer Anlagenrechnung überprüft und in /ARN 07/ dokumentiert.

7.2.3.2 Prioritäten weiterer SWR-Modellerweiterungen

Aus den bisherigen Arbeiten zur Erweiterbarkeit von ASTEC auf SWR lassen sich folgende Schlüsse für die zukünftige Vorgehensweise ableiten. Die Anwendung des Containmentmoduls CPA auf SWR-Containments konnte mit einer ersten Testrechnung für einen SWR vom Typ 69 nachgewiesen werden. Notwendige Modellverbesserungen oder -entwicklungen sind derzeit unter anderem für die Iodchemie denkbar, da die Temperaturen im SWR-Containment deutlich über solchen bei DWR liegen können. Diese Arbeiten werden aber hauptverantwortlich von IRSN als Entwickler des entsprechenden Moduls (IODE) durchgeführt. Aufgrund der großen Erfahrung der GRS auf diesem Gebiet wird eine Einbindung aber sinnvoll sein. Dies wurde auch durch die im Rahmen von SARNET durchgeführte gemeinschaftliche Analyse der Iodchemie beim Versuch PHEBUS-FPT1 anhand eines Vergleichs des IODE-Moduls in ASTEC mit den AIM-Modellen in COCOSYS eindrucksvoll unterstrichen. Weitere Arbeiten sind für CPA für die Berechnung der Spaltproduktrückhaltung durch sog. "Pool Scrubbing" im Druckabbausystem identifiziert worden. Das dabei verwendete Modell SPARC-B zeigt insgesamt zu konservative Ergebnisse, die einer Überprüfung bedürfen.

Das Hauptaugenmerk der Entwicklung wird aber auf der Modellierung des Kühlkreislaufs sowie der Phase der Kernzerstörung bei einem SWR liegen. Aufbauend auf der im nachfolgenden Abschnitt beschriebenen Analyse der Anwendbarkeit von CESAR auf die thermohydraulischen Eigenheiten eines SWR, soll dann die Kopplung von CESAR und CPA vorangetrieben werden. Dies würde erste Rechnungen zu Auslegungsstörfällen ermöglichen.

Des Weiteren sollen erste Ansätze für die Erweiterung der ASTEC-Kernmodelle auf SWR-Komponenten analysiert werden. Mit Blick auf die Entwicklungsstrategie seitens IRSN zur CESAR-ICARE2-Kopplung und die Einbindung der ATHLET-CD-Entwicklung und der Erfahrung der GRS in diesen Arbeiten werden von der GRS Algorithmen von ATHLET-CD-Modellen für die anschließende Implementierung dieser durch IRSN in ASTEC bereitgestellt werden.

7.2.3.3 CESAR für SWR

Die Thermohydraulik des Reaktorkühlkreislaufrs wird in ASTEC mit Hilfe des Moduls CESAR simuliert. Bisher wurde CESAR nur auf den Reaktorkühlkreislauf eines DWR angewendet. Im Zuge der anstehenden Aufgabe, ASTEC insgesamt so zu ertüchtigen, dass der Code auch für die Störfallsimulation von SWR genutzt werden kann, ist zuvor das Modul CPA für die Thermohydraulik in einem SWR-Sicherheitsbehälter exemplarisch angewandt worden. Hierbei haben sich erwartungsgemäß keine grundlegenden Probleme ergeben. In dem hier durchgeführten Schritt wurde CESAR dahingehend geprüft, welche Modifikationen und/oder Neuentwicklungen von Detailmodellen erforderlich sind, um mit CESAR den Reaktorkühlkreislauf eines SWR (Abb. 7-15) verlässlich abbilden zu können.

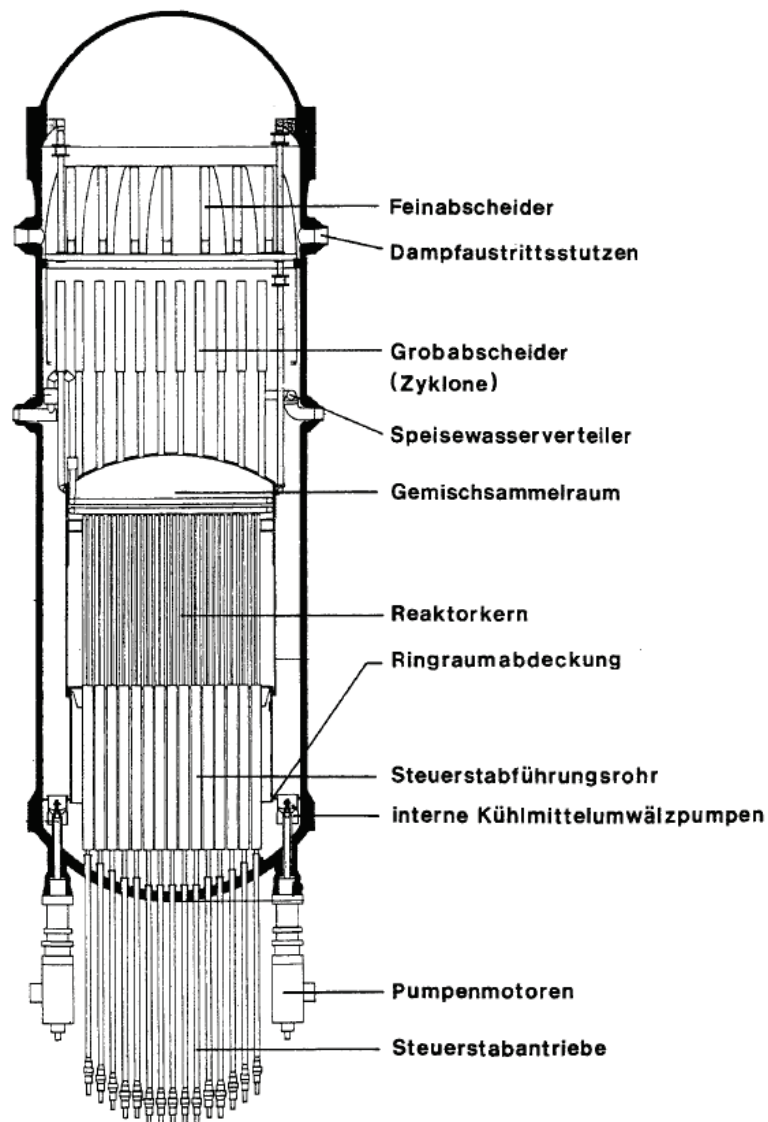


Abb. 7-15: Schnittdarstellung des Reaktor-druckbehälters eines SWR

Ausgehend von einem MELCOR Datensatz für einen SWR der Baulinie 69 /SON 06/ wurde zunächst ein vereinfachter Datensatz für CESAR entwickelt. In Abb. 7-16 sind die wichtigsten geometrischen Daten dieses Datensatzes dargestellt. Abb. 7-17 zeigt die daraus abgeleitete Struktur der CESAR-Nodalisierung. Mit dieser Nodalisierung wurden die beiden charakteristischen Merkmale des SWR Primärkreislaufes erfasst:

- definierte Zirkulationsrate über Kern und Downcomer und
- nahezu vollständige Separation im Separator.

Als Anfangs- und Randbedingungen wurden die folgenden SWR-69 typischen Werte gewählt:

- Leistung (thermisch): 2,42 GW
- Dampfmassenstrom: 1377,0 kg/s
- Druck im Dom: 7,0 MPa
- interne Zirkulation: 10500 kg/s
- Pumpenförderhöhe: 1,95 MPa

In den Abb. 7-18 und Abb. 7-19 sind der Dampfmassenstrom zur Turbine und der interne Zirkulationsmassenstrom dargestellt. Man erkennt, dass nach einer anfänglichen Einschwingphase ein stationärer Dampfmassenstrom vorliegt. Die interne Zirkulation erreicht die erforderlichen Werte ohne eine zusätzliche Regelung. In Abb. 7-20 sind die Dampfvolumentanteile in den einzelnen Zonen dargestellt. Die angewandten Modelle für die Verbindung zum Dom führen zu einer vollständigen Separation. Der Volumendampfgehalt im Dom ist nahezu gleich 1.

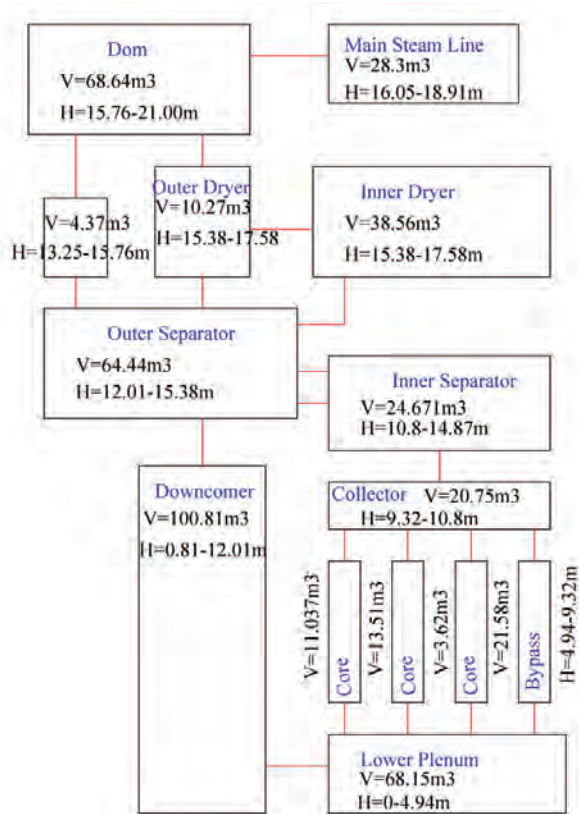


Abb. 7-16 Vereinfachter CESAR-Datensatz für einen SWR

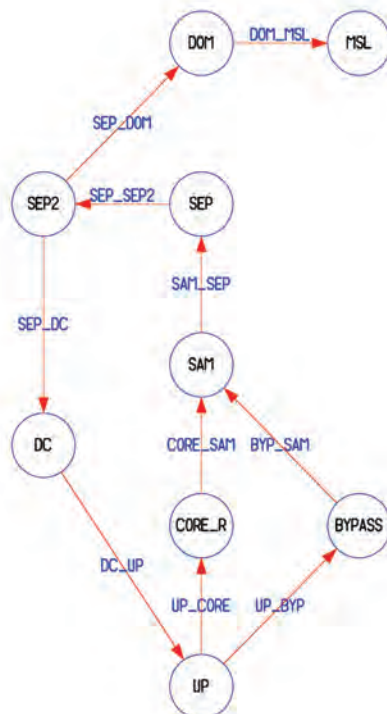


Abb. 7-17 Struktur der CESAR-Nodalisation für einen SWR

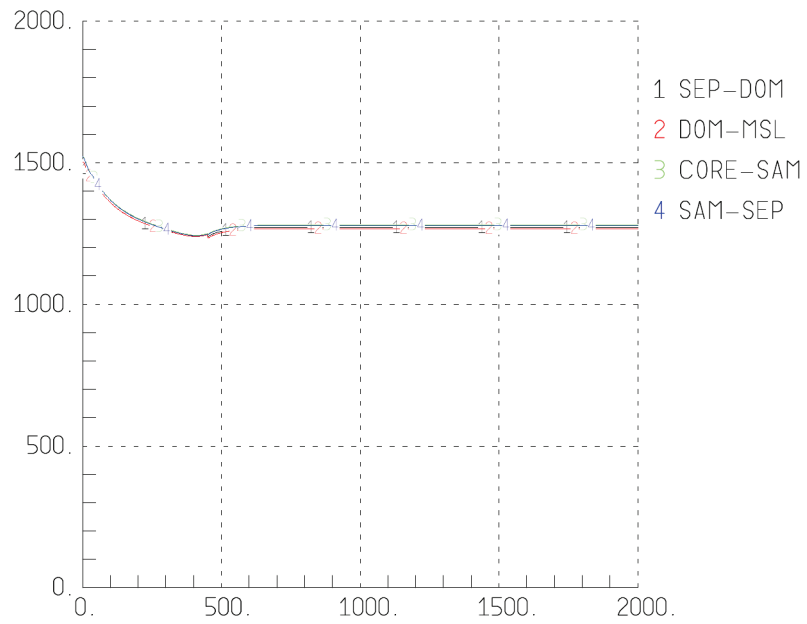


Abb. 7-18 Dampfmassenstrom (kg/s) zur Turbine als Funktion der Zeit (s)

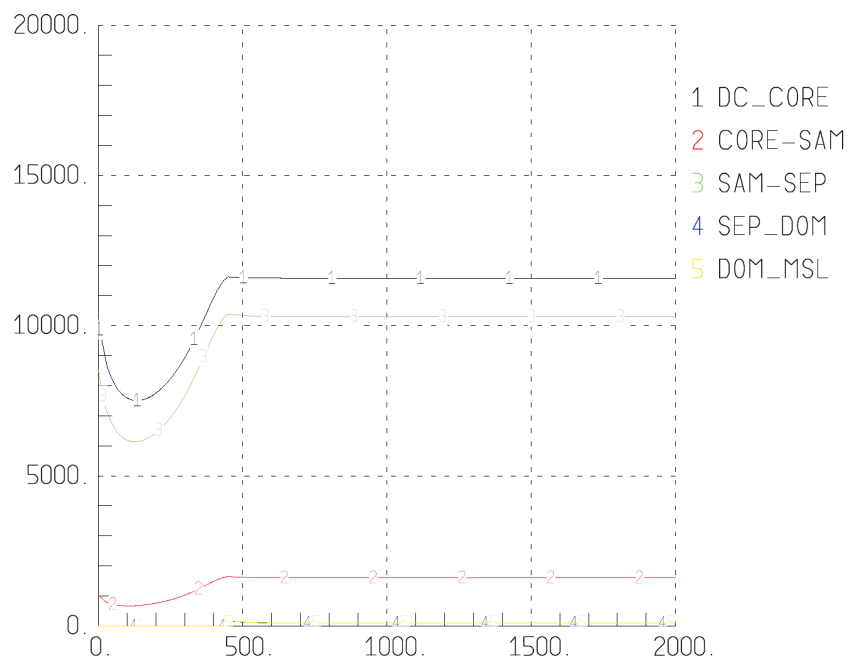


Abb. 7-19 Interner Zirkulationsmassenstrom (kg/s) als Funktion der Zeit (s)

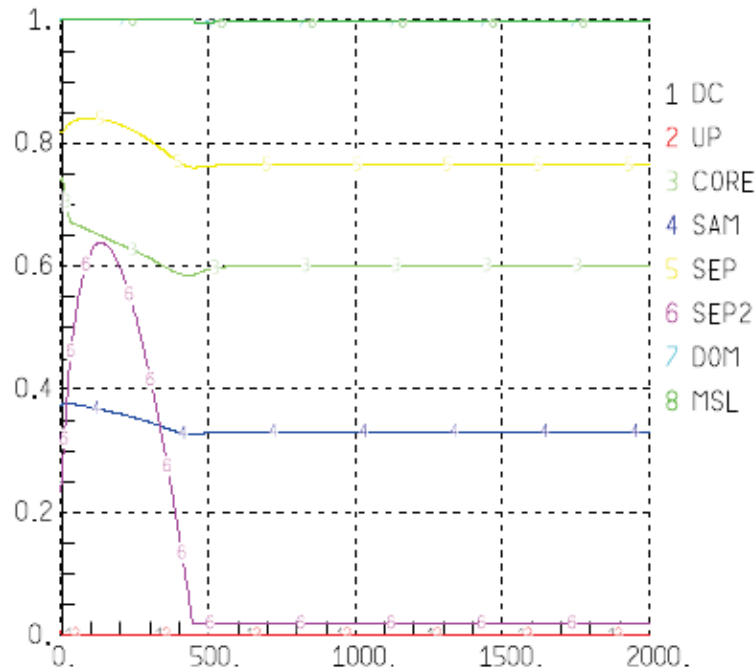


Abb. 7-20 Dampf volumenanteile in den einzelnen Zonen als Funktion der Zeit (s)

Die mit diesem einfachen Modell erreichten Ergebnisse zeigen die grundsätzliche Fähigkeit von CESAR, einen SWR-Reaktorkreislauf zu modellieren. Auf dieser Grundlage ist erschein eine Entwicklung von speziellen SWR-Modellen für CESAR nicht erforderlich. Die nächste Aufgabe ist die Erstellung eines detaillierten Datensatzes und die Durchführung von Vergleichsrechnungen mit ATHLET. Im Ergebnis dieser Arbeiten sind unter Umständen noch Entwicklungsarbeiten erforderlich.

7.2.4 Arbeiten zur Konzeption des zukünftigen DCH-Modell in ASTEC

Gemeinsam mit IRSN ist der Bericht "Objectives and Requirements for ASTEC V2" erstellt worden /DOR 07/. U. a. beabsichtigt die GRS, sich bezüglich der zukünftigen Version ASTEC-V2 mit Verbesserungen der Modellierung für DCH (Direct Containment Heating) zu beteiligen. Ein diesbezügliches Konzept wurde erstellt und mit IRSN eingehend diskutiert. Das erarbeitete Konzept für Modellverbesserungen zum DCH stellt zusammen mit den anderen Themen H₂-Verbrennung, RDB-Versagen und ATLAS für LINUX-Nutzer die Basis für die im nächsten Schritt gemeinsam mit IRSN für ASTEC-V2 zu erstellende Spezifikation dar.

Wichtigste Grundlage für eine erfolgreiche Modellierung der Phänomene bei DCH ist die korrekte Wiedergabe des integralen Austrags von Schmelzmasse aus der Reak-

torgrube während des Ausblasens von Dampf aus dem RDB, sowie der Verteilung der Schmelze auf die verschiedenen Räume im Containment. Darüber hinaus gilt es, die Wechselwirkung der luftgetragenen Schmelzetropfen mit der Atmosphäre in den verschiedenen Räumen (Wärmeübergang, chemische Reaktionen) korrekt zu beschreiben. Der Rolle der Wasserstoffverbrennung kommt dabei eine entscheidende Bedeutung zu. Diese Prozesse laufen größtenteils in einem sehr kurzen Zeitbereich ab und tragen zu einem kurzzeitigen Druckaufbau im Sicherheitsbehälter bei. Die Rechen-codes sollen den erzielten Maximaldruck im Sicherheitsbehälter ausreichend genau wiedergeben können.

Das in COCOSYS verfügbare DCH-Modul ist dahingehend auf der Basis von Experimenten für die Anlagen der deutschen KONVOI- sowie der französischen P'4-Baureihe mit je zwei blinden Rechnungen (für die Experimente DISCO-KH01 und KH02 sowie FH01 und FH03) überprüft worden. Dieser Vergleich dient zur Ermittlung der Prognosefähigkeit des DCH-Modells in COCOSYS im Hinblick auf mögliche Verbesserungen des DCH-Modells in ASTEC.

Die experimentellen Daten für die KONVOI-Geometrie stammen aus neu beim FZK durchgeführten Versuchen, die im direkten Informationsaustausch zwischen GRS und FZK angeregt und ausgelegt worden sind. Die Daten zur französischen P'4-Baureihe sind der GRS innerhalb von SARNET für blinde Rechnungen zur Verfügung gestellt worden.

Die erzielten Ergebnisse in den blinden Rechnungen sind überraschend gut: Wichtige Größen wie der maximale Druckanstieg (Abb. 7-21) sowie die Verteilung der aus der Reaktorgrube ausgetragenen Schmelze auf die Anlagenräume (Tab. 7-1, Tab. 7-2) sind mit akzeptabler Genauigkeit prognostiziert worden. Bei diesen Rechnungen kam trotz unterschiedlicher Geometrie der Anlage ein identischer Eingabedatensatz für die offenen Modellparameter (z. B. für das Entrainment) zum Einsatz. Der aktuelle Forschungsstand (Experimente und Theorie) im Hinblick auf die ASTEC-Modellentwicklung für DCH wurde für eine gemeinsame Veröffentlichung in SARNET aufbereitet /SPE 08/.

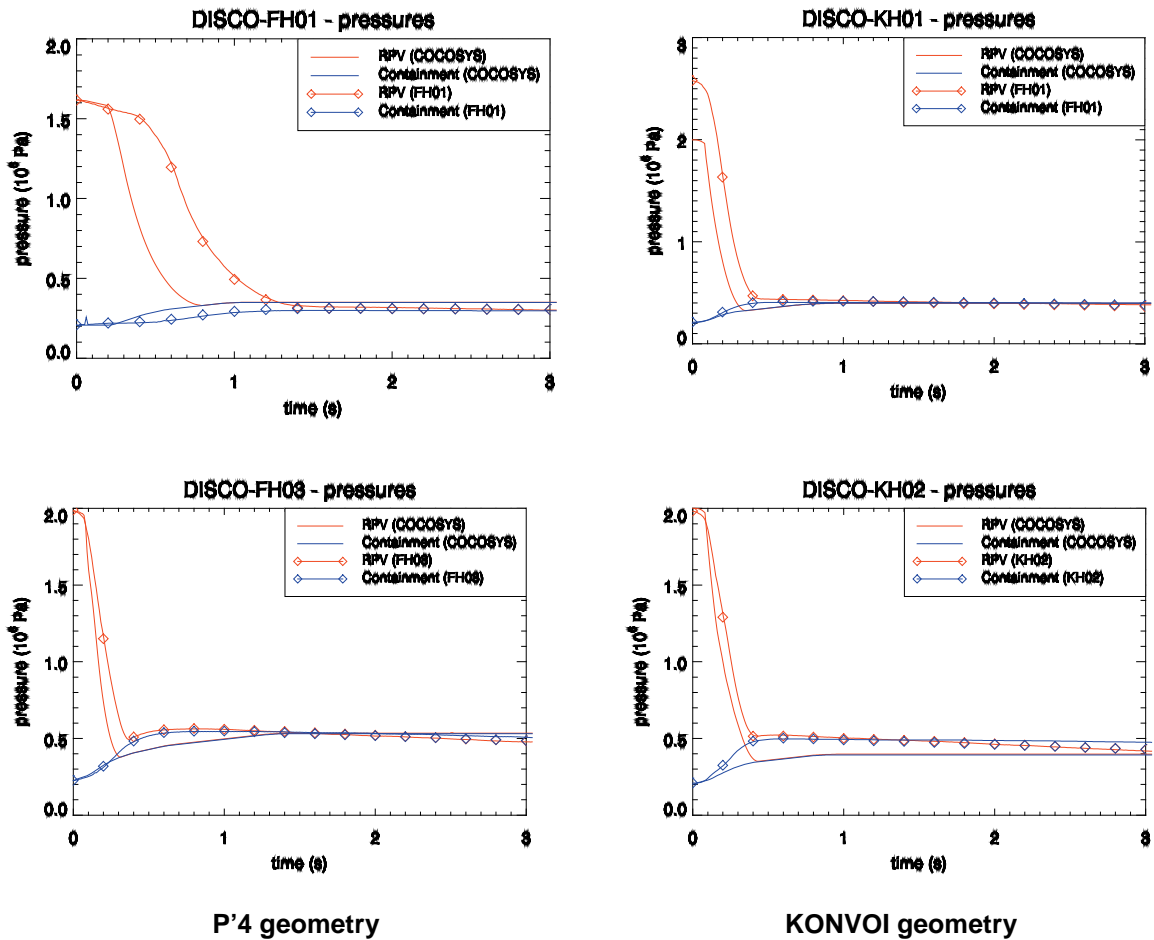


Abb. 7-21 Blinde Rechenergebnisse mit COCOSYS für die Drücke in RDB und Containment im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen

Tab. 7-1 Vergleich der blinden COCOSYS-Ergebnisse mit den Experimenten FH01 und FH03 für die franz. P'4-Baureihe

Größe		FH01 (COCOSYS)		FH01 (Experiment)		FH03 (COCOSYS)		FH03 (Experiment)	
Blowthrough Zeitpunkt (s)		0.19		0.34		0.08		0.05	
Ende des Blowdown (s)		0.78		1.50		0.31		0.38	
Maximaler Containment Druck (M Pa)		0.37		0.31		0.55		0.56	
Menge an produziertem FeO (mol)		12.6		-		13.8		-	
Menge an produziertem H ₂ (mol)		13.6		40		15.4		44	
Menge an verbranntem H ₂ (mol)		15.7		28		47.8		83	
Schmelzmasse (kg %) abgelagert in	Grube	4.31	40	4.91	46	2.95	27	4.59	45
	Bodenzugang	2.55	23	2.63	25	2.97	27	1.74	17
	Subcompartment	1.98	18	1.71	16	2.54	23	2.42	24
	Containment	2.03	19	1.40	13	2.40	22	1.52	15

Tab. 7-2 Vergleich der blinden COCOSYS-Ergebnisse mit den Experimenten KH01 und KH03 für die KONVOI-Baureihe

Größe		KH01 (COCOSYS)		KH01 (Experiment)		KH02 (COCOSYS)		KH02 (Experiment)	
Blowthrough Zeitpunkt (s)		0.08		0.05		0.08		0.06	
Ende des Blowdown (s)		0.35		0.45		0.43		0.42	
Maximaler Containment Druck (M Pa)		0.45		0.42		0.41		0.50	
Menge an produziertem FeO (mol)		7.1		-		7.0		-	
Menge an produziertem H ₂ (mol)		3.7		37		7.5		33	
Menge an verbranntem H ₂ (mol)		47.3		53		29.9		69	
Schmelzemasse (kg %) abgelagert in	Grube	3.44	32	1.41	14	4.51	42	4.56	48
	Subcompartment1	4.53	42	4.26	44	5.52	51	4.60	48
	Subcompartment 2	2.12	20	3.32	34	0.02	0	0.15	1
	Containment	0.67	6	0.79	8	0.72	7	0.24	3

Allerdings sind auch einige Ungenauigkeiten registriert worden. Probleme bestehen z. B. bei der Berechnung des zweiphasigen Austrags von Schmelze und Dampf aus dem RDB. Dies hat eine enorme Spitze für die Gasgeschwindigkeit in der Reaktorgrube zur Folge, wodurch sich der Zeitraum für den Austrag von Schmelze aus der Grube in der Rechnung auf diese schmale Spitze eingrenzt und nahezu instantan erfolgt. Die Modellparameter sind aber letztlich so gewählt, dass, selbst wenn der so eingeeengte Zeitraum für den Austrag von Schmelze unrealistisch schmal erscheinen sollte, integral eine realistische Menge an Schmelzeaustrag für die Experimente berechnet wird.

Für das zukünftige DCH-Modell erscheint eine direkte Übernahme des aktuellen COCOSYS-Modells zunächst aufgrund der guten Ergebnisse in den blinden Rechnungen attraktiv. Die Erfordernisse von ASTEC als Integral-Code lassen aber die numerisch aufwändige Behandlung des luftgetragenen Schmelzetransports sowie der Ablagerung, wie in COCOSYS ausgeführt, vermutlich nicht zu. Aufgrund der Ungenauigkeiten, die in COCOSYS speziell hinsichtlich der Dynamik des Austrags von Schmelze bestehen, sollen in Zukunft auch in COCOSYS noch Modellverbesserungen durchgeführt werden. Hier ist in Zusammenarbeit mit IRSN und auch im SARNET-Rahmen geplant, COCOSYS als Testbett für alternative korrelative Ansätze zur Darstellung des Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube zu nutzen und die so gewonnenen Erkenntnisse in die zukünftige ASTEC-Entwicklung einfließen zu lassen. Korrelative Ansätze können zusätzlich durch Analysen von IRSN mit dem CFD-Code MC3D abgesichert werden, wie die in /SPE 08/ beschriebenen Arbeiten zu MC3D zeigen.

7.2.5 'Prototyping' der Schmelzeausbreitung in ASTEC

In SARNET ist von französischer Seite (CEA) eine Arbeitsgruppe zur Erarbeitung eines vereinfachten analytischen Ansatzes für die Abschätzung der Effizienz eines Schmelzeausbreitungsmodells in ASTEC angeregt worden. Der an der Universität Stockholm erarbeitete Ansatz /DIN 00/, der hierfür zunächst als Grundlage vorgeschlagen war, ist in seiner vorliegenden Form bislang noch umstritten. Aus Sicht der GRS ist der Schmelzeausbreitungscode LAVA aber unstrittig ein geeignetes Werkzeug, um die Effizienz einer Schmelzeausbreitung im Grenzfall (d. h. bei einer stark herunter gekühlten Schmelze und kleinen Massenströmen) sicher aufzuzeigen. Dies war zuvor eindrucksvoll in der "blinden" Benchmark-Rechnung des ECOKATS-Versuchs im Rahmen des EU-Projekts ECOSTAR (5. EU-Rahmenprogramm) demonstriert worden.

Um die Analyse solcher Grenzfälle in ASTEC zu untersuchen, ist daher eine Einbindung von LAVA in ASTEC vorgesehen. Andererseits muss ein schnell laufendes Kriterium entwickelt werden, welches imstande ist, die Effizienz der Schmelzeausbreitung für alle Bedingungen abzuschätzen und Grenzfälle für die Anwendung von LAVA in ASTEC aufzeigen zu können.

LAVA-'Prototyping'

In einem ersten Schritt wurde das derzeitige 'stand alone'-Programm LAVA in ASTEC bis zur Erreichung der prinzipiellen Ablauffähigkeit ('prototyping') als neues Modul integriert und getestet. Dazu wurde die Dateneingabe für LAVA auf die SIGAL-Struktur umgestellt. Eine Kopplung ist derzeit nur mit dem Containment Modul CPA realisiert (Abb. 7-22). Die Ergebnisse von Testrechnungen wurden im Rahmen eines TRG-Treffens mit IRSN vorgestellt. Mit der in ASTEC eingebundenen LAVA-Version konnten die 'stand alone'-Ergebnisse reproduziert werden. In Übereinstimmung mit IRSN wurde die Implementierung in die Version ASTEC 2.0 beschlossen.

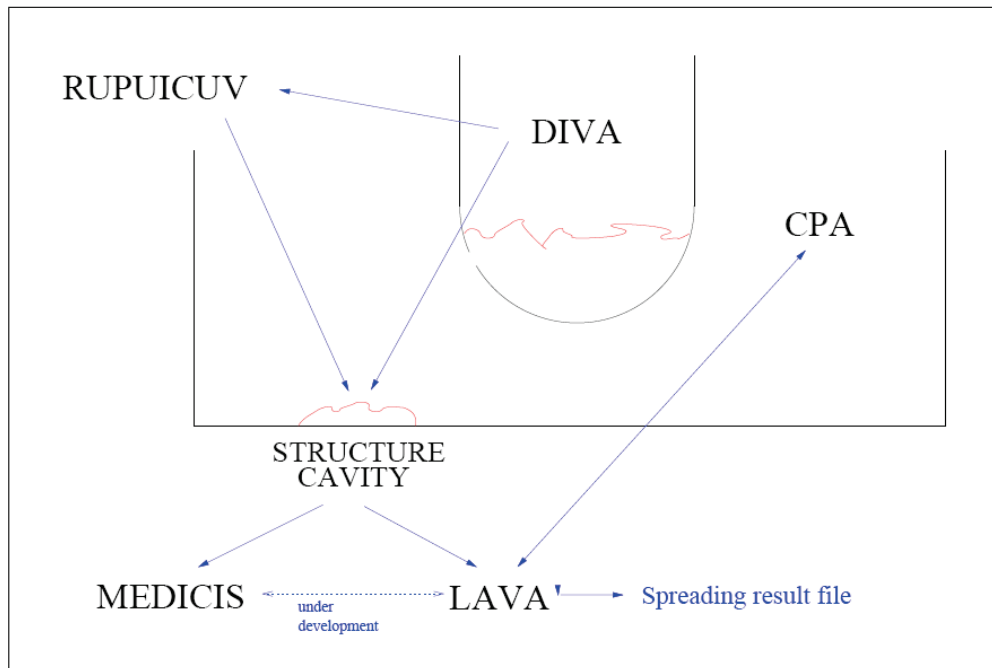


Abb. 7-22 Anbindung von LAVA an ASTEC (schematisch)

Erstellung eines schnellen analytischen Ansatzes zur Abschätzung der Ausbreitungseffizienz der Schmelze in ASTEC

In einem zweiten Schritt ist auf der Basis von verfügbaren theoretischen Ansätzen ein analytisches Kriterium zur Abschätzung der Ausbreitungseffizienz der Schmelze entwickelt worden, das in Abstimmung mit IRSN in ASTEC eingebracht wird. Das Kriterium soll (speziell im Hinblick auf die Anwendung beim EPR) Grenzfälle aufzeigen, bei denen die Ausbreitung der Schmelze kritisch für das Sicherheitskonzept werden kann und für die der Einsatz eines detaillierten Codes (d. h. LAVA) in ASTEC zur Überprüfung von Grenzbedingungen unbedingt nötig ist. Das entwickelte Kriterium beruht auf einem Wettbewerb zwischen fortschreitender Ausbreitung (angenähert durch Ähnlichkeitslösungen für isotherme Ausbreitungen) und Erstarrung (basierend auf der Abstrahlung an der Oberfläche) und erbringt nach erster Überprüfung an vielen Ausbreitungsexperimenten eine ausreichende Näherung an die experimentellen Ausbreitungsergebnisse.

Die Ausbreitung der Schmelze wird für die jeweilig betrachtete, idealisierte Situation durch Verwendung der zugehörigen analytischen Lösungen für Ausbreitung bei konstanter Temperatur der Schmelze angenähert. Unterschieden werden die Situationen

- Ausbreitung in einen Kanal,
- Ausbreitung in eine Fläche (axialsymmetrisch),
- Ausbreitung unter Einfluss von Gravitation und Trägheit,
- Ausbreitung unter Einfluss von Gravitation und Reibung,
- Ausbreitung bei konstantem Volumenstrom und
- Ausbreitung eines konstanten Volumens.

Gleichzeitig wird der Aufbau einer Kruste an der Ausbreitungsfront berechnet. Bei Überschreiten eines kritischen Verhältnisses zwischen Krustendicke an der Front und mittlerer Dicke der Schmelze im Ausbreitungsraum (Kanal oder Fläche) von 50 % wird ein Abstoppen der Ausbreitung durch lokale Abkühlung der Schmelze prognostiziert. (Beispiel: Abb. 7-23 und Abb. 7-24 für das 1D-Experiment ECOKATS-V1).

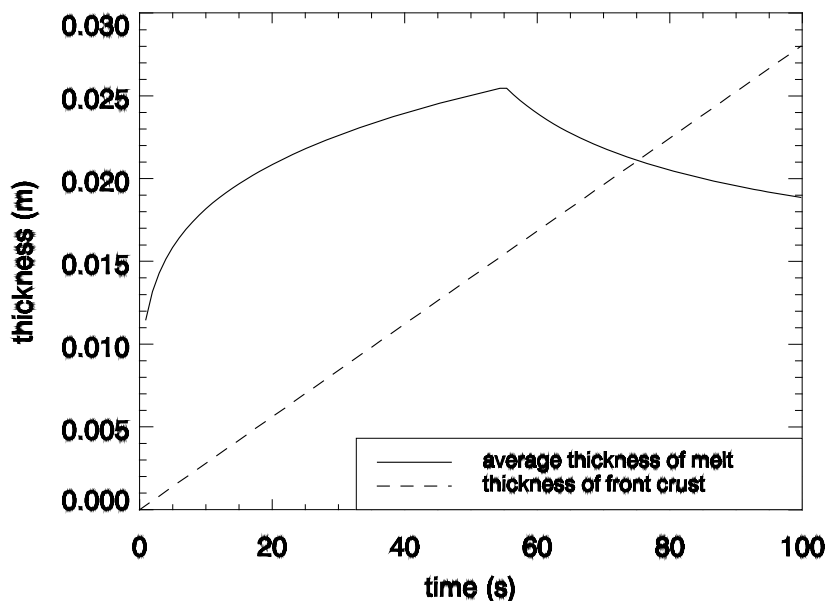


Abb. 7-23 Vergleich von mittlerer Dicke der Schmelze mit der im analytischen Ansatz berechneten Krustendicke für das Experiment ECOKATS-V1

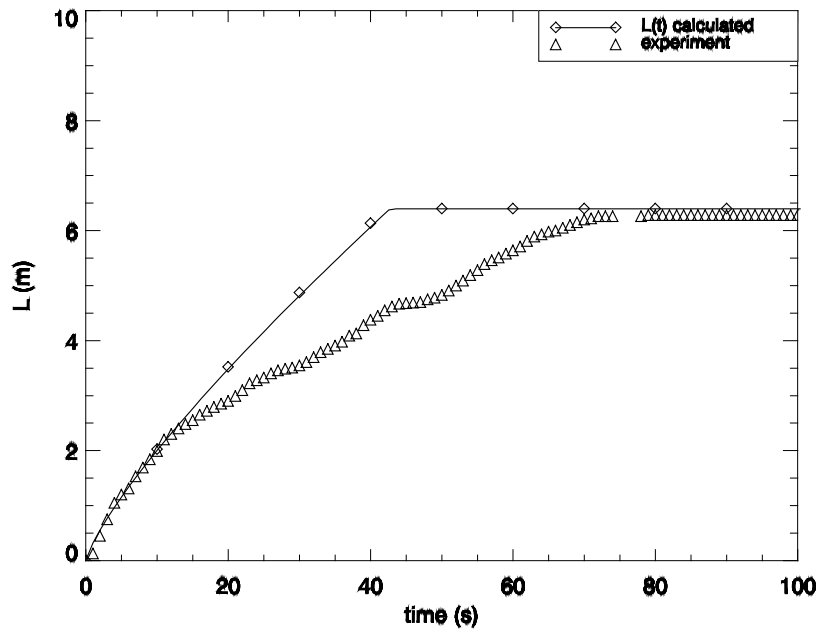


Abb. 7-24 Vergleich der Annäherung mit dem analytischen Kriterium für die Bewegung der Ausbreitungsfrent beim Experiment ECOKATS-V1

Der Übergang zwischen den jeweiligen Ausbreitungsbedingungen wird hierbei korrekt im Gegensatz zum Ansatz von Dinh et al. berücksichtigt. Die Lösung für die Ausbreitung auf einer Fläche verlangt streng genommen axialsymmetrische Symmetrie, wurde aber durch geeignete Modifikation des Volumens bzw. des Volumenstroms auf die Anwendung der Ausbreitung in einen Winkel erweitert, sodass realistische Geometrien wie z. B. die Ausbreitungsfläche beim EPR, berücksichtigt werden können.

Für die hier betrachteten Experimente zeigen die Ergebnisse mit dem beschriebenen Ansatz einen relativen Fehler wie in Tab. 7-3 ausgewiesen. Dieser Fehler ist so definiert, dass er auf das Rechenergebnis angerechnet werden muss, um das experimentelle Ausbreitungsergebnis abdecken zu können. Der relative Fehler ist maximal 40 %, was im Bereich der Fehler liegt, die im blinden Benchmark zu ECOKATS-1 (Abb. 7-25) für die detaillierten Ausbreitungscode ermittelt wurden /SPE 04/. Die Dokumentation zu dem entwickelten Ansatz /SPE 08b/ ist zur Diskussion in die SARNET-Gruppe eingebracht worden. Nach Diskussion mit IRSN ist vereinbart worden, dass der Ansatz in vereinfachter Form in ASTEC von IRSN umgesetzt wird.

Tab. 7-3 Relative Fehler für die Prognose des Ausbreitungsergebnisses mit dem analytischen Kriterium in verschiedenen Experimenten

Experiment	Rechnung	rel. Fehler	Experiment
ECOKATS-V1	L = 6.4 m	-1.6 %	L = 6.3 m
COMAS-EU2b	L = 6.21	- 25 %	L = 4.63 m
VULCANO-VEU7	L = 0.46 m	+ 2.2 %	L = 0.47 m
KATS-14	L = 7.97 m	- 9 %	L = 7.25 m
COMAS-5a	L = 7.76 m	- 40 %	L = 4.69 m
KATS-12	L = 12.67 m	- 7.6 %	L = 11.70 m
KATS-17	A = 3.26 m ²	- 4.0 %	A = 3.13 m ²
KATS-16	A = 1.07 m ²	- 5.6 %	A = 1.01 m ²
ECOKATS-1	A = 4.10 m ²	+ 19 %	A = 4.88 m ²

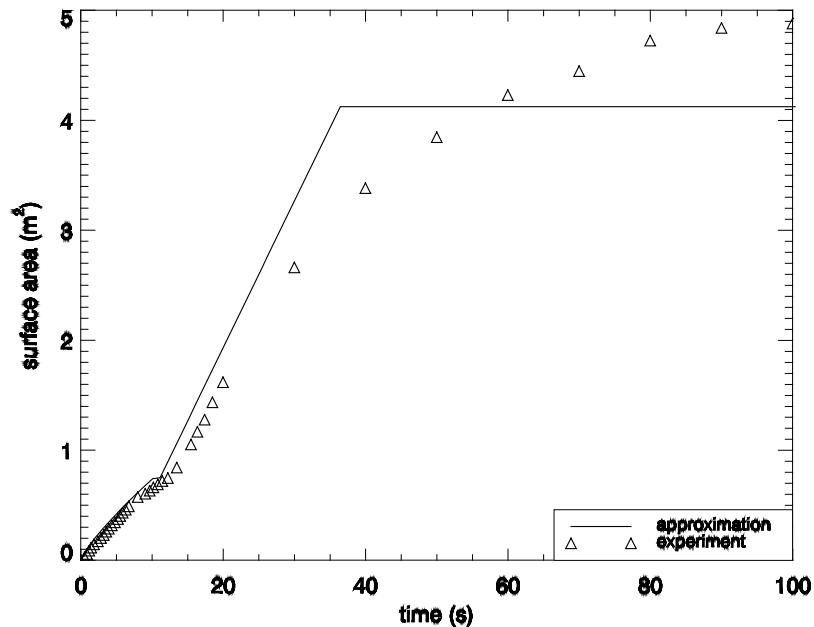


Abb. 7-25 Vergleich der Annäherung mit dem analytischen Kriterium für die von der Schmelze bedeckte Fläche beim Experiment ECOKATS-1

7.3 Verbesserung der Code-Infrastruktur

7.3.1 Erweiterung des ASTEC Post Processings

Ein besonders wichtiges Ziel war, die Kopplung von ASTEC mit dem von der GRS entwickelten Visualisierungsprogramm ATLAS, das bereits zur Ergebnisdarstellung von

ATHLET, COCOSYS und MELCOR angewendet wird, zu verbessern bzw. zu erweitern.

Entsprechend des modularen Aufbaus von ASTEC sind zu diesem Arbeitspunkt neben den bereits verfügbaren Daten des Primärkreislaufs (CESAR-Modul) sowie des Containments (CPA-Modul) auch die Daten des DIVA-Moduls für ATLAS verfügbar gemacht worden. Bei der Aufbereitung der Daten einer ASTEC Rechnung für die Weiterverarbeitung in ATLAS besteht die Schwierigkeit, dass für Module, die nicht zu Beginn der Rechnung aktiv sind - dazu zählt im Allgemeinen auch das DIVA-Modul - entsprechend der dynamischen Datenverwaltung in ASTEC zunächst keine Datenfelder in der ASTEC-Datenbasis erzeugt werden. Dies geschieht erst mit Aktivierung des jeweiligen Moduls. Für die Anbindung an ATLAS ist die Generierung und Verfügbarkeit entsprechender Datenfelder und die Liste aller während des Programmlaufs verwendeter Parameter aber zwingend notwendig von Beginn an sicherzustellen. Daraus ergibt sich die Forderung, direkt bei Rechnungsbeginn entsprechende Felder und Datenstrukturen zu erzeugen und extern in ein für ATLAS lesbares Datenformat abzulegen. Da zu Beginn der Rechnung im Allgemeinen nicht bekannt ist, welche Daten mit der Aktivierung von DIVA erzeugt werden und wie sie in der ASTEC Datenbasis abgelegt werden, war eine Analyse der ASTEC-eigenen Datenstruktur notwendig, die mit erheblichem Aufwand verbunden war. Intensive Tests wurden durchgeführt, um die teilweise komplexe Prozedur des Auslesens der Daten aus der ASTEC-eigenen Datenbasis zu überprüfen. Neben der Bereitstellung der Daten zur Weiterverarbeitung in ATLAS wurde auch mit der Generierung spezieller Graphikdateien zur dynamischen Darstellung der Rechnungsdaten begonnen.

Wie eingangs gesagt ist die Kopplung von ASTEC mit ATLAS auf die Daten des DIVA-Moduls erweitert worden. Die dafür benötigten Prozeduren sind als Quellcodemodifikationen in ASTEC übertragen und erfolgreich getestet worden. Mit den erstellten Grafiken kann neben den Daten des Primärkreislaufs und des Containments auch die Phase der Kernzerstörung als dynamisiertes Bild in ATLAS dargestellt werden. Insbesondere ist dabei als Vorteil gegenüber den bisher für ASTEC verfügbaren Visualisierungen zu nennen, dass sehr viel mehr Informationen vom Nutzer abgefragt und dargestellt werden können, wobei die Benutzerfreundlichkeit teilweise deutlich gesteigert ist. So können zeitliche Verläufe von Rechnungsdaten (Druck, Temperatur, Massenanteile etc.) durch Auswahl in einer Liste und einfaches "Anklicken" mit der Maus grafisch angezeigt werden.

Die geplante Weitergabe von ATLAS innerhalb von SARNET musste verschoben werden, da sich die Freigabe der überarbeiteten ASTEC-Version 1.3.2 aufgrund erheblicher Probleme hinsichtlich der Rechenstabilität deutlich verzögerte und erst gegen Ende Dezember 2007 freigegeben wurde. Notwendige Tests zur Kopplung von ATLAS an ASTEC konnten deshalb nicht abschließend durchgeführt werden. Dennoch wurden die Arbeiten zur Kopplung fortgeführt und Testläufe mit der zur Verfügung stehenden inoffiziellen ASTEC-Version durchgeführt. Des Weiteren wurde die bisher nur im 'post processing' Modus verfügbare Version, die eine Darstellung und Auswertung erst nach Abschluss einer Rechnung ermöglichte, dahingehend erweitert, dass auch schon während der Rechnung die ASTEC-Daten für ATLAS verfügbar sind. Auch hierfür sind entsprechende Quellcodemodifikationen in ASTEC vorgenommen und erste Tests durchgeführt worden. Dazu war es unter anderem auch erforderlich, statt des bisher verwendeten Lahey[®]-Compilers einen der Firma INTEL[®] zu verwenden. Umfangreiche Arbeiten waren hier notwendig, um die Übersetzungsprozeduren anzupassen. Insbesondere der Verwendung verschiedener Programmiersprachen – C für CESAR und FORTRAN für die anderen Module – erforderte einen erhöhten Anpassungsbedarf. Eine mit dem INTEL[®]-Compiler lauffähige Version konnte erstellt werden. Testrechnungen zeigen nahezu identische Ergebnisse. Geringe Abweichungen, die aber den generellen Trend nicht beeinflussen, lassen sich bei dem Übergang von einem Compiler auf einen einer anderen Firma nicht ausschließen. Dies ist auf die unterschiedliche Fließkommabehandlung zurückzuführen.

7.3.1.1 Bilder für Kühlkreislauf

Für die konsequente Nutzung von ATLAS für ASTEC ist die Verfügbarkeit bzw. vorgelegt die Erstellung von entsprechenden Grafiken für wichtige Anlagenteile und Störfallphasen sinnvoll und notwendig. Dazu zählen Grafiken für den Kühlkreislauf, für das Containment und für den RDB in der Phase der Kernzerstörung. Mittels dieser Übersichtsbilder ist es dem Anwender möglich, rasch einen Überblick über wesentliche Anlagenparameter und Phänomene (z. B. Kernzerstörung, H₂-Verteilung) zu bekommen. Zusätzlich lassen sich Einflüsse unterschiedlicher Nodalisierungen qualitativ beurteilen und Inkonsistenzen aufdecken (z. B. fehlende oder falsch definierte Strömungsverbindungen). Erste Bilder wurden für KONVOI-DWR und WWER-DWR für den Kühlkreislauf und das Containment erstellt. Für KONVOI konnte dabei von dem Umstand Nutzen gezogen werden, dass entsprechende Grafiken schon aus der Anwendung von

ATLAS mit MELCOR zur Verfügung standen. Diese mussten dann an die ASTEC eigenen Struktur der Datenverfügbarkeit angepasst werden.

Vor dem Hintergrund der Anbindung an ASTEC und eine Einführung und Platzierung ins Europäische Exzellenznetzwerkes SARNET (ab 2009 Nachfolgenetzwerk SARNET-2) ist die GRS mit der Forderung konfrontiert, eine gewisse Anzahl an Basisgrafiken zur Verfügung zu stellen. Dies betrifft neben den hier schon erwähnten DWR vom Typ KONVOI und WWER-1000 auch solche vom TYP WWER-440, und solche französischer Bauart (PWR-900 und PWR-1300). Die Grafiken orientieren sich dabei an denjenigen ASTEC-Eingabedateien, die auch im Rahmen einer Freigabe von ASTEC als Beispieldatensätze für Anlagenrechnungen mitgeliefert werden.

Nachfolgend (Abb. 7-26 bis Abb. 7-29) sind Grafiken für die derzeit behandelten Reaktoren vom Typ KONVOI und WWER-1000 dargestellt. Dies sind im Einzelnen Grafiken für den Kühlkreislauf von KONVOI und WWER-1000 Reaktoren sowie solchen für das entsprechende Containment. Des Weiteren ist für einen WWER-1000/V-320 Reaktor eine Grafik für den RDB und der Kernstrukturen erstellt worden.

Insbesondere wurde dabei von der Möglichkeit von ATLAS profitiert, innerhalb eines Bildes mehrere unterschiedliche Parameter abzurufen bzw. dem Anwender die Möglichkeit der Auswahl charakteristischer Daten zu geben. So sind für den Kühlkreislauf Druck im Primärkreis, Wasser- bzw. -Dampf Temperatur und die Wasserstoffmasse in den jeweiligen der Nodalisierung zugrunde liegenden Einzelvolumina abruf- und darstellbar. Des Weiteren sind die Füllstände von Dampferzeugern, Druckhalter und Flutbehältern dynamisiert worden, wobei die entsprechenden Daten natürlich auch für ein zeitliches Füllstandsverlaufdiagramm zur Verfügung stehen. Als weitere Information stehen dann auch Basisinformationen der Sequenz zur Verfügung, dies beinhaltet die aktuelle Zeit seit Rechnungsbeginn sowie die aktuelle thermische Leistung einschließlich der Nachzerfallsleistung. Charakteristische Zeiten wie Zeitpunkt der Schnellabschaltung, Zeitpunkt der ersten Freisetzung von Spaltprodukten sowie der Zeitpunkt des Starts des Kernzerstörungsmoduls DIVA werden außerdem dem Anwender angezeigt. Diese teilweise auch doppelte Darstellung von Informationen hat aber auch den Zweck, neue Nutzer von ATLAS mit den vielfältigen Möglichkeiten vertraut zu machen und verschiedene Darstellungsmöglichkeiten aufzuzeigen. Solche Bilder sind von enormer Wichtigkeit, da sie die Basis für Schulungsunterlagen bilden können.

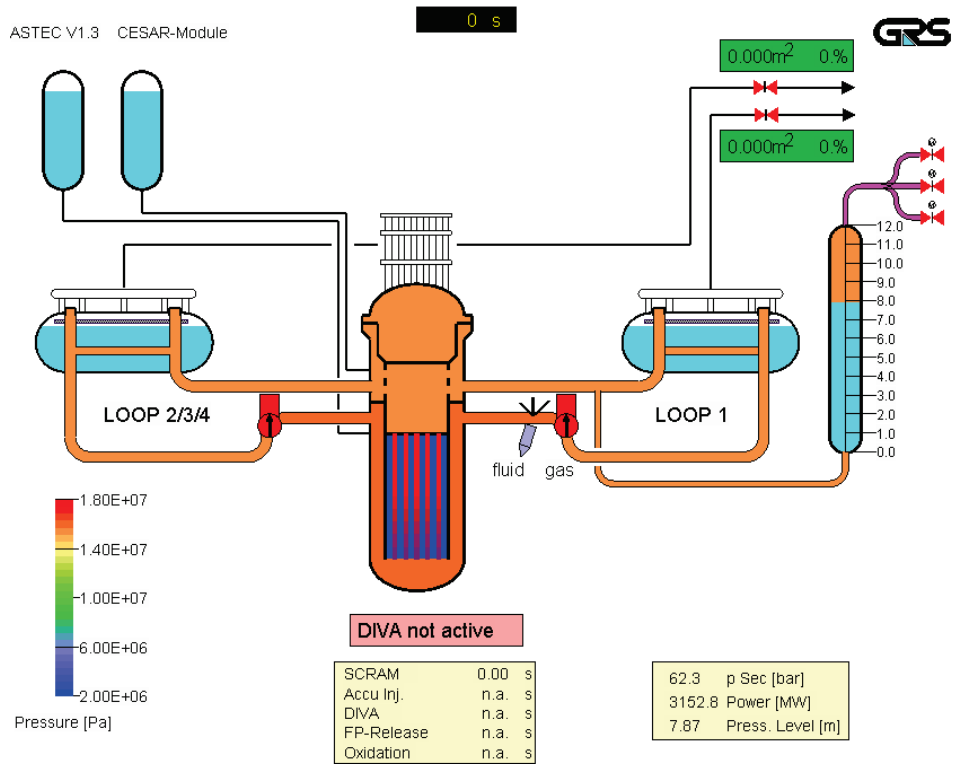


Abb. 7-26 ATLAS-Visualisierung des Druckes im Primarkreislauf eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor

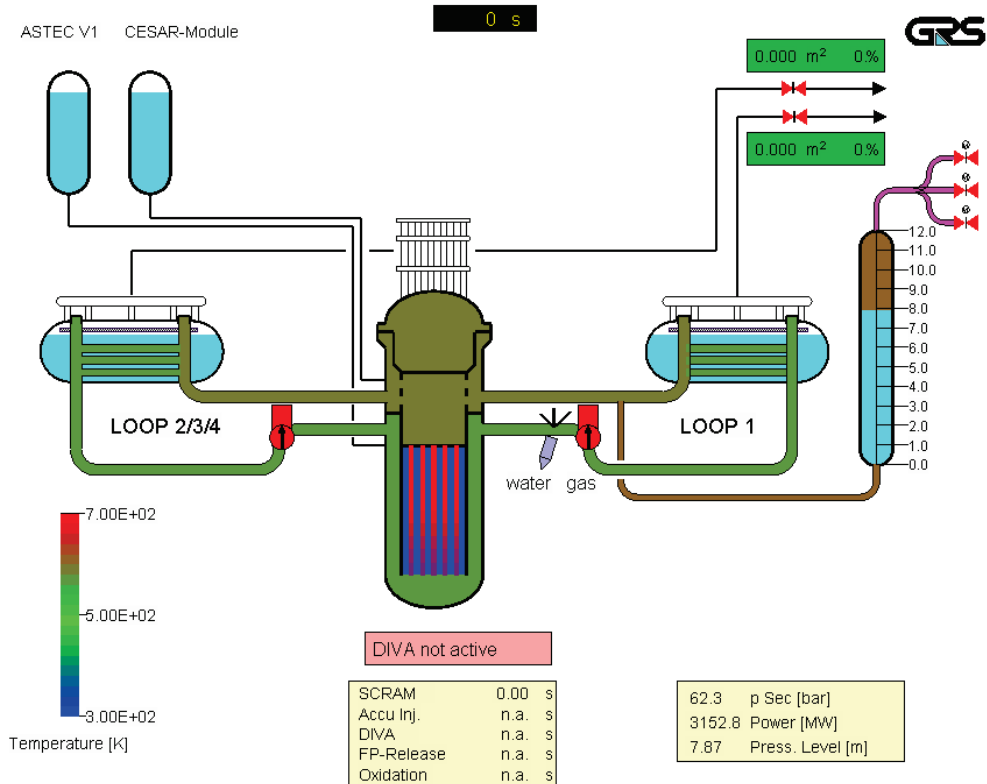


Abb. 7-27 ATLAS-Visualisierung der Temperatur im Primarkreislauf eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor

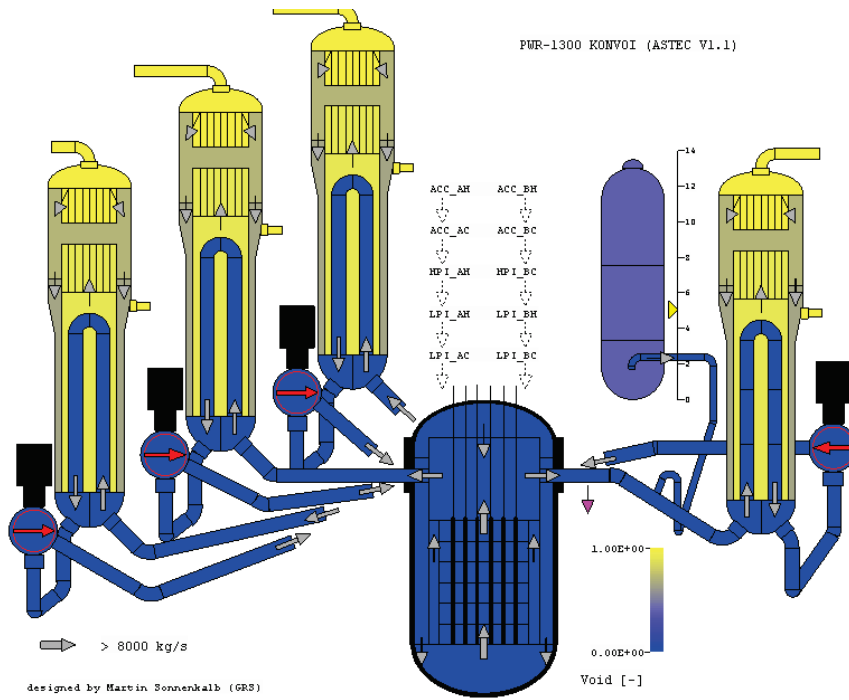


Abb. 7-28 ATLAS-Visualisierung des Dampfgehaltes im Kühlkreislauf eines KONVOI 1300 MWe DWR

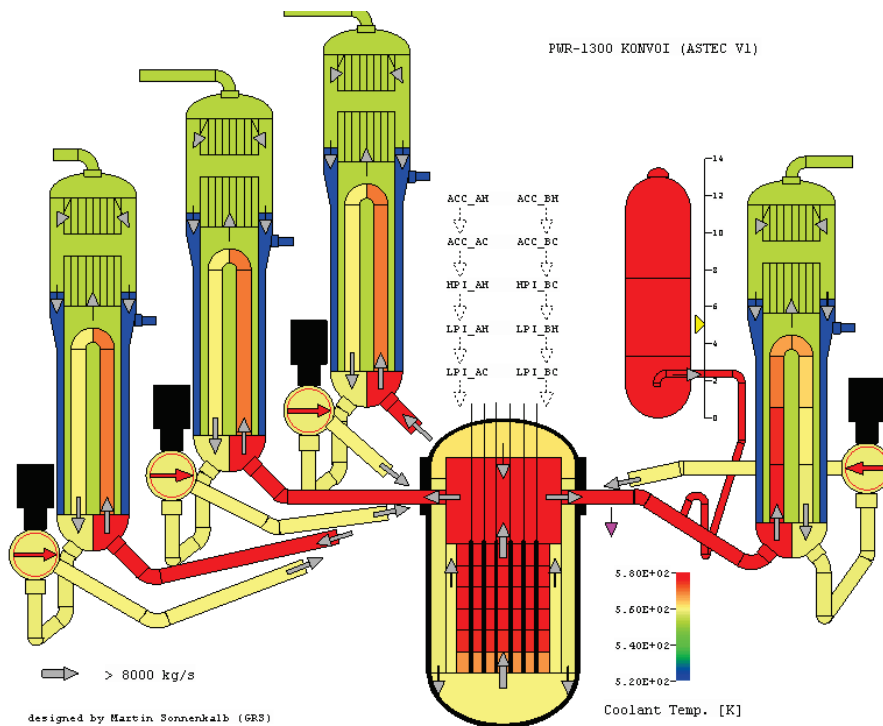


Abb. 7-29 ATLAS-Visualisierung der Kühlmitteltemperatur im Kühlkreislauf eines KONVOI 1300 MWe DWR

7.3.1.2 Kopplung ASTEC-ATLAS: DIVA-Einbindung

Neben der Darstellung wesentlicher Phänomene im Kühlkreislauf eines Reaktors ist besonders auch die Phase der Kernzerstörung für die Auswertung und qualitative Bewertung des Unfallablaufs von Bedeutung. Dafür ist beispielhaft derjenige Teil des RDBs, der durch das Modul DIVA modelliert wird, als ATLAS Bild erstellt worden. Solche Grafiken haben eine Größe von einigen tausend Zeilen. In Abb. 7-30 bis Abb. 7-32 sind der RDB, die Kernumfassung sowie die Brennstabregionen bestehend aus dem Brennstabmaterial und dem Zirkaloy-Hüllrohr dargestellt. Jeder Brennstab stellt dabei entsprechend der Modellierung in ASTEC eine gewisse Anzahl an realen Brennstäben dar. Zusätzlich ist der Wasserstand im RDB dargestellt. Die Farbdarstellung orientiert sich dabei an der Temperaturskala in der linken unteren Ecke des Bildes. Als Zusatzinfo ist zudem die aktuelle Zeit seit Rechnungsbeginn in Sekunden sowie, falls vorhanden, die Zusammensetzung des Schmelzepools im unteren Plenum angegeben. Mit fortschreitender Kernaufheizung und -zerstörung, wird Material zunächst innerhalb des Kerns und schließlich ins untere Plenum verlagert. Die damit verbundene Aufheizung des RDB-Wand ist ebenfalls farblich codiert dargestellt.

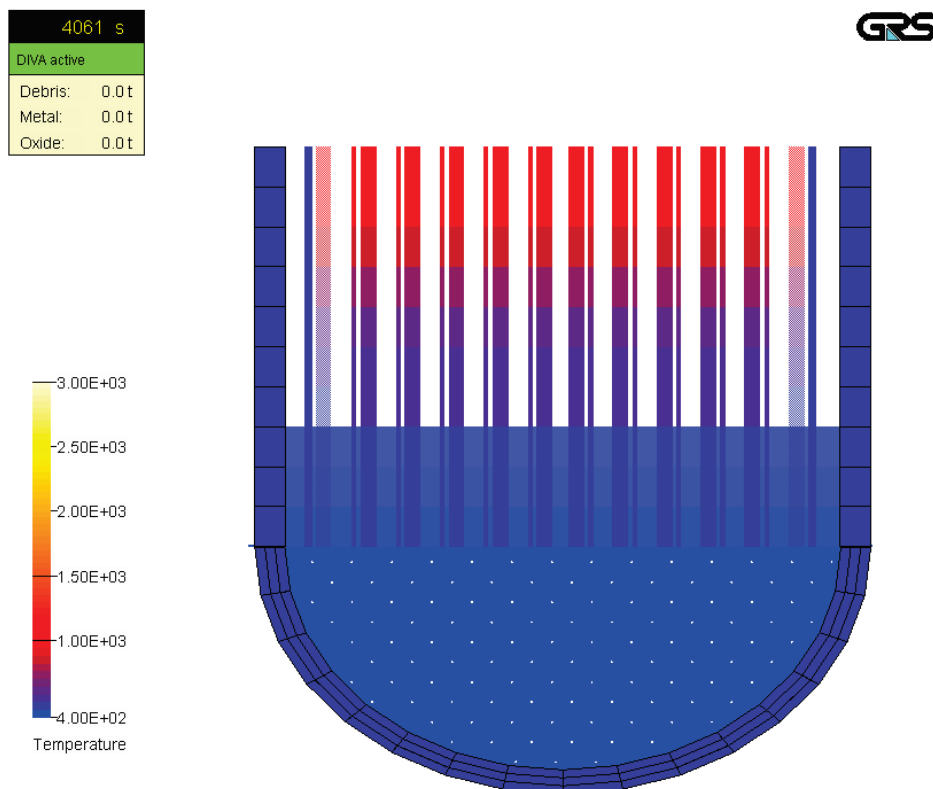


Abb. 7-30 Visualisierung der Kernkonfiguration einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER-1000/-V320 Reaktor (t = 8104 s)

8104 s
DIVA active
Debris: 0.7 t
Metal: 3.5 t
Oxide: 0.2 t

GRS

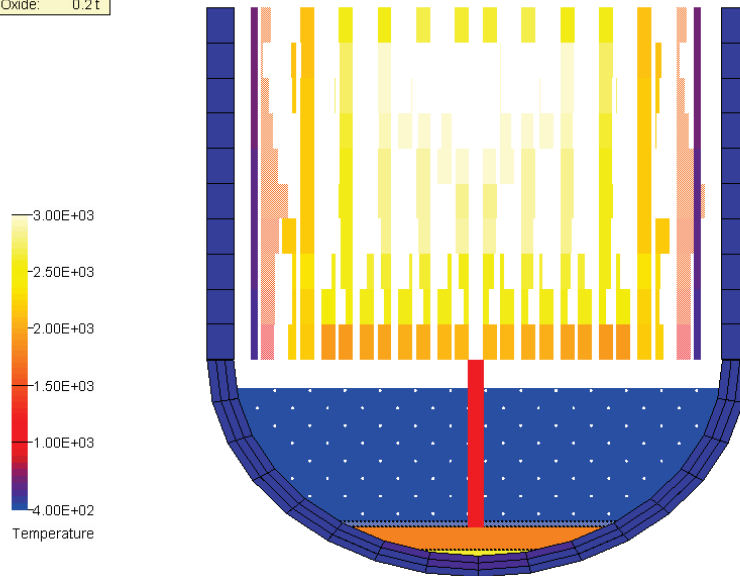


Abb. 7-31 Visualisierung der Kernzerstörung einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER-1000/-V320 Reaktor (t = 8104 s)

13543 s
DIVA activated
Debris: 3.7 t
Metal: 28.0 t
Oxide: 41.1 t

GRS

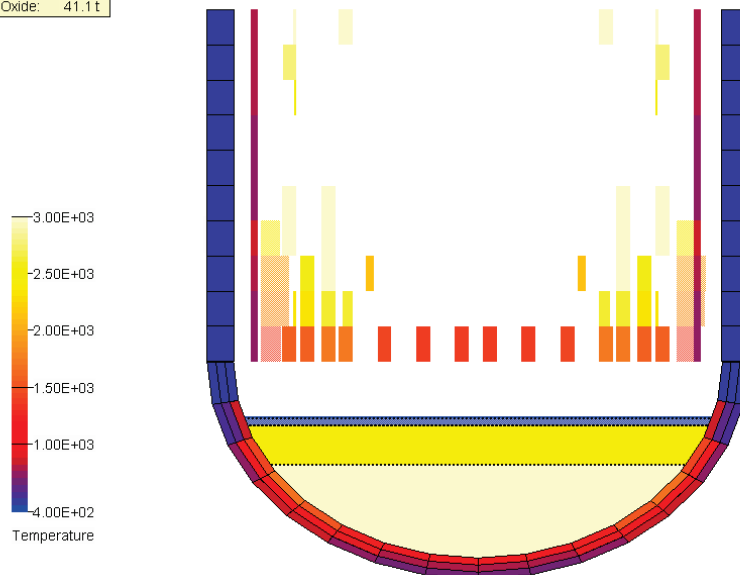


Abb. 7-32 Visualisierung der Kernzerstörung einschließlich des Wasserinventars und der Temperaturen für einen DWR mit WWER-1000/-V320 Reaktor (t = 13543 s)

7.3.1.3 Containment-Graphiken

Zur Vervollständigung der Übersichtsgrafiken ist die Darstellung der Phänomene im Containment sinnvoll und notwendig. Gerade hier liegt auch der besondere Vorteil einer solchen Darstellung gegenüber einfachen zeitlichen Verlaufskurven. So können komplexe thermohydraulische Wechselwirkungen (Strömungsprozesse, Schichtung etc.) wesentlich einfacher erkannt, analysiert und bewertet werden.

Neben der bereits im Vorläufervorhaben erstellten Grafik für ein Containment eines DWR vom Typ KONVOI ist nun auch ein entsprechendes Bild für einen DWR mit WWER-1000 Reaktor erstellt worden. Damit stehen für eine KONVOI- und eine WWER-1000-Anlage erste Versionen von Basisgrafiken zur Verfügung.

Nachfolgend sind zwei Schnittbilder für ein Containment eines DWR mit WWER-1000-Reaktor dargestellt (Abb. 7-33, Abb. 7-34). Der Aufbau nutzt dabei die einzigartige Fähigkeit von ATLAS, in einer Grafik mehr als einen Parameter darzustellen. Die Auswahl erfolgt dann durch einfaches Aufrufen eines Menüs, das alle zuvor zu der Grafik definierten Parameter auflistet. Gerade auch diese Möglichkeit prädestiniert ATLAS für eine Anwendung im Rahmen des Integral-Codes, wie dies auch schon für MELCOR seit längerer Zeit der Fall ist. Diese Optionen, die allerdings eine gute Kenntnis um die Bearbeitung und Erstellung solcher Grafiken voraussetzen, lassen eine Bereitstellung von Beispielgrafiken für ASTEC-Basisdatensätze als sinnvoll und für eine internationale Akzeptanz als notwendig erscheinen. In den nachfolgenden Abbildungen sind aus den in der Grafik vorgesehenen und in den Grafikdateien implementierten Parametern nur der Dampfanteil und die Atmosphärentemperatur dargestellt. Weitere Parameter sind dann die Wasserstoff-Volumenanteile sowie der Druck.

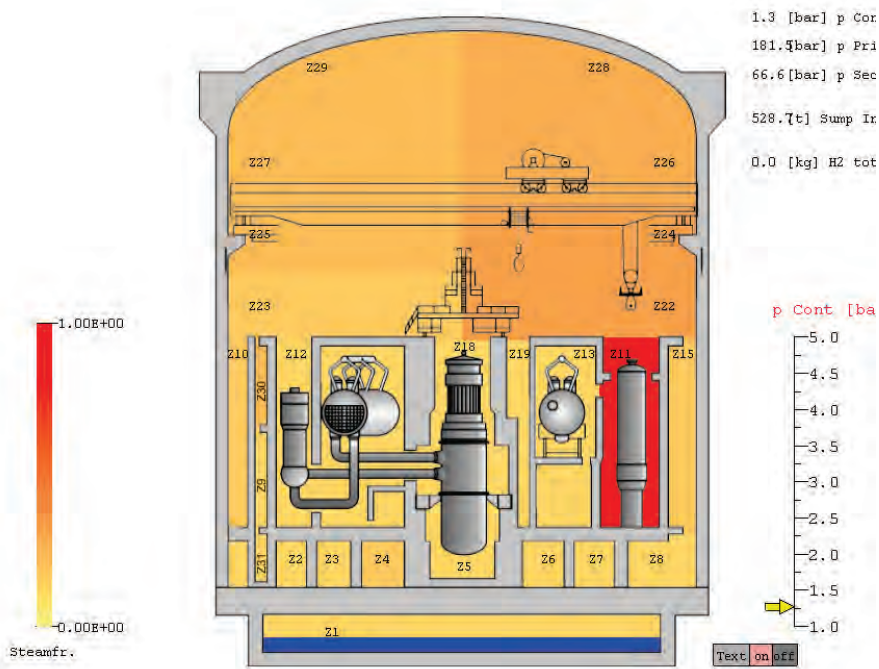


Abb. 7-33 ATLAS-Visualisierung des Dampfanteils in der Atmosphäre des Containments eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktors

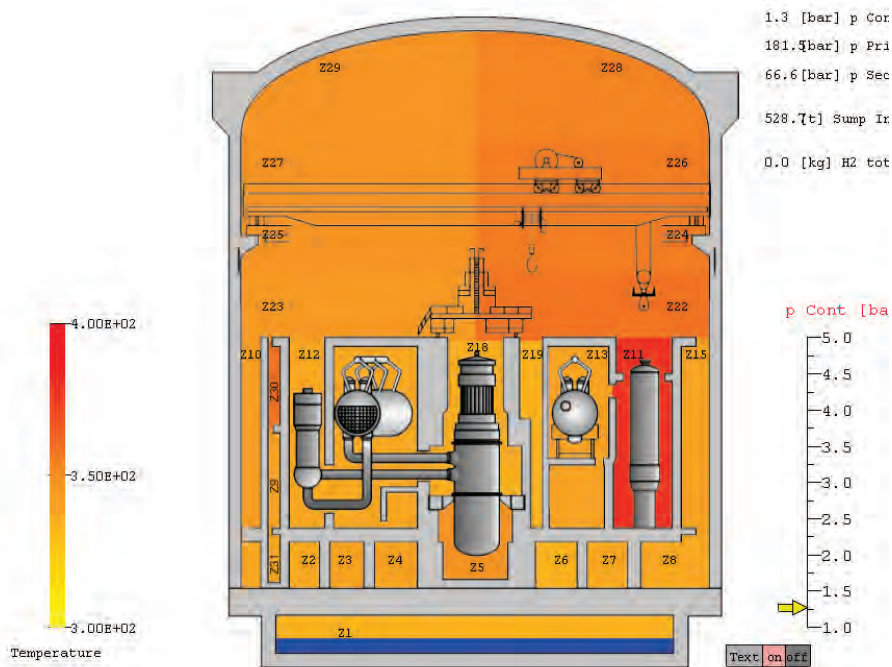


Abb. 7-34 ATLAS-Visualisierung der Atmosphärentemperatur im Containment eines DWR mit WWER-1000/V-320 Reaktor

7.3.1.4 Dokumentation zur Handhabung

Die Dokumentation speziell zur Anwendung in Kombination mit ASTEC ist noch nicht abgeschlossen worden, da noch nicht Daten aus allen Modulen für die Verarbeitung innerhalb von ATLAS zur Verfügung stehen. Neben der Dokumentation zur Handhabung von ATLAS sind insbesondere die Themen zu dokumentieren, die speziell die ASTEC-ATLAS-Kopplung betreffen (z. B. die entsprechenden Beschreibungen für den ASTEC Eingabedatensatz).

7.3.1.5 ATLAS-Training

Zur Vorbereitung auf die ATLAS-Schulung für externe ASTEC-ATLAS-Nutzer wurde zunächst mit den ATLAS-Entwicklern in Garching eine interne und andererseits eine anwendungsbezogene Schulung in Köln durchgeführt. Eine erste Anwendungsschulung speziell für ATLAS für externe ASTEC-Anwender wurde dann in der Zeit vom 29. Nov. bis 1. Dez. 2006 im Rahmen eines 3-tägigen Seminars bei der GRS in Garching abgehalten. Insgesamt besuchten 26 Teilnehmer das Seminar, 17 Teilnehmer von externen Institutionen, davon 12 Teilnehmer von Partnerorganisation aus SARNET. Die übrigen externen Teilnehmer kamen von Institutionen, die an einem Codetransfer von ASTEC und damit auch des Visualisierungstools ATLAS interessiert sind. Insgesamt nahmen 13 ausländische Experten teil. Nach einer allgemeinen Einführung zu den Möglichkeiten von ATLAS in Verbindung mit ASTEC wurde ATLAS in der ASTEC-Umgebung auf den Schulungscomputern bzw. mitgebrachten Notebooks unter Anleitung installiert, bevor die geführten Übungen begonnen werden konnten. Zunächst wurden die Möglichkeiten des ATLAS-spezifischen APG-Editors und die prinzipielle Vorgehensweise bei der Dynamisierung von Bildern präsentiert und erläutert. An den beiden darauf folgenden Tagen wurden die verschiedenen Möglichkeiten erklärt und jeweils in praktischen Übungen – soweit möglich selbständig – ausgeführt.

Das Seminar ist durchaus als erfolgreich anzusehen, da bei den meisten Teilnehmern grundsätzliches Interesse an einer Nutzung von ATLAS geweckt werden konnte, teilweise hatten die Anwender auch schon Erfahrung bei der Anwendung anderer GRS-Programme (ATHLET, COCOSYS), für die die ATLAS-Kopplung schon länger verfügbar ist. Allerdings setzt eine nennenswerte Anwendung von ATLAS im Rahmen von ASTEC voraus, dass sämtliche Hauptmodule von ASTEC, also nicht nur CESAR und

CPA, sondern auch DIVA, SOPHAEROS, IODE und MEDICIS an ATLAS angebunden sind.

7.3.2 Harmonisierung der Codebeschreibung

ASTEC mit seinen verschiedenen Modulen und Untermodellen waren in der Vergangenheit nur teilweise ausführlicher beschrieben. Zu den ausführlicher beschriebenen Modulen gehörte auch CPA. Zu einer vollständigen Beschreibung gehört

- eine ausführliche Beschreibung der Eingabeparameter (User Manual)
- eine Beschreibung der physikalischen Modelle mit den verwendeten Gleichungen (Referenz Manual)
- eine Beschreibung der durchgeführten Validierungsrechnungen mit den Vergleichsergebnissen (Validierungsbericht)
- Empfehlungen für den Nutzer von CPA (User Guidelines; Nodalierungsregeln, Hinweise für bestimmte Modellanwendungen etc.)

Neben der Eingabebeschreibung in Berichtsform existierte von Beginn an ein Online-Manual im HTML-Format mit einer Auflistung der in den Modulen und Untermodulen erforderlichen Eingabeparameter teilweise mit Kurzerläuterungen und der erforderlichen physikalischen Einheit des Parameters.

Diese inhomogene Beschreibung des Rechenprogramms ASTEC wurde wiederholt von den Benutzern kritisiert und vom ASTEC-Team zum Anlass einer vollständigen Revision genommen. Für das Containment-Modul CPA, für das die GRS hauptverantwortlich ist, lagen seit 1999/2000 ausführliche Beschreibungen in verschiedenen Berichten vor, was sich aus der Historie der Entwicklung des CPA-Moduls und seiner Untermodelle ergab. Dies sind das CPA-User Manual /BES 00/, das CPA Referenzmanual für die Thermohydraulik /KLE 01/, das Referenzmanual für den CPA-Aerosolteil AFP /WEB 99/, der Ergänzungsbericht zum Spaltprodukttransportmodell FIPHOST /ARN 99/, der technische Bericht über Implementierung und Validierung der Korrelationen zu Simulation der Rekombinatoren in ASTEC /ARN 03/, das Usermanual von PROCOCO /LUT 06/, dem H₂-Verbrennungsmodell von IRSN für schnelle, turbulente Deflagrationen, und die IRSN-

Berichte zu PROCO /PAI 06, SER 05/ und dem H₂-Verbrennungsmodell COMB /SER 04/. Mit der fortschreitenden Entwicklung von ASTEC kamen zusätzliche Modelle hinzu bzw. wurden auch von IRSN Änderungen an CPA-Modellen vorgenommen, die zum Teil Auswirkungen auf die bestehenden Eingabeparameter hatten oder wodurch neue Parameter eingeführt worden waren. Hier sind z. B. das von IRSN implementierte Sprühmodell CSS, die Aerosol/Iod-Abwaschmodelle, der Einbau der schnelllaufenden Korrelationen zur Rekombinatorsimulation, neue Wasserstoffverbrennungsmodelle, die vereinfachte Kondensationsrohrmodellierung für SWR (Insertion Option) und die Erweiterungen der Druckabbausystemsimulation für spezielle Systeme in RBMK Reaktoren zu nennen.

Nach Diskussionen mit dem IRSN-Team wurde einvernehmlich festgelegt, die CPA-Modulbeschreibung wie folgt zu gliedern:

- Online-Manual im HTML-Format (nur elektronisch) mit Kurzerläuterung der Bedeutung der Eingabeparameter
- CPA-User-Manual
enthält eine detaillierte Beschreibung und Bedeutung der Eingabeparameter, ihre Bedeutung im Zusammenhang mit dem diesbezüglichen Modell (Kurzbeschreibung des Modells), um den Einfluss dieser Eingabegrößen erkennen zu können, darüberhinaus Eingabebeispiele und Beispiele für Print- bzw. Plotdaten-Ausgaben des Moduls.
- CPA Description of Physical Modells (Reference Manual)
Detaillierte Modellbeschreibung mit Modellgleichungen
- CPA User Guidelines
dieser Teil enthält Nodalisierungsvorschriften und Empfehlungen grundsätzlicher Art und Empfehlungen für spezielle Modellanwendungen (evtl in einem zusammenfassenden ASTEC Bericht)

7.3.2.1 CPA User manual (Eingabebeschreibung)

Das seit September 2000 vorliegende CPA User Manual ‚Containment Thermalhydraulics and Aerosol- and Fission Product Behaviour‘ /BES 00/ bedurfte neben den notwendigen Ergänzungen einer völligen Neustrukturierung, die nach **Objektdaten** wie Geometriedaten der Räume/Zonen in einem Containment,

Verbindungsdaten, Wandstrukturdaten und **Eingabedaten für technische System und Komponenten** unterscheidet und gliedert. Für technische Systeme sollen die Eingabedaten, die über verschiedene Eingabestrukturen verteilt sind, im jeweiligen Kapitel zusammen beschrieben werden, auch wenn dabei nochmals zonenbezogene oder verbindungsbezogene Eingaben erläutert werden müssen. Diese Neuordnung brachte eingehende Diskussionen mit sich, unter welchen Kapiteln die einzelnen Eingabeparameter von der Logik her aufzuführen sind. Diese Neustrukturierung erfolgte auch nach Diskussion mit dem COCOSYS-Entwickler-Team, um hier Erfahrungen und Anforderungen aus den Diskussionen mit den COCOSYS Benutzern, Sinnfälligkeiten und Synergieeffekte aus der COCOSYS-Entwicklung für ASTEC zu nutzen. Die neue Gliederung ist im folgenden wiedergegeben:

Inhalt

1. INTRODUCTION

1.1 Main Objectives

1.2 New Features in current code versions

2 SHORT DESCRIPTION OF CPA

2.1 Thermalhydraulic part (THY)

2.2 Aerosols and fission product part (AFP)

3 GENERAL STRUCTURE of CPA input

4 MAIN CPA SPECIFIC Control Data (STRU MODU)

4.1 Thermalhydraulic model specific control data (STRU MODU??)

4.2 Aerosol and fission product model specific control data (STRU AERO)

5 Properties of Used Gases, Fluids, Aerosols and Fission products

(STRU COMP)

5.1 Gases and fluids

5.2 Aerosols

5.3 Fission product elements

6 OBJECT DATA

6.1 Compartment Simulation, geometry and initial conditions (STRU ZONE)7

6.1.1 Basic thermalhydraulic zone models

6.1.2 Pressure suppression zone model DRASYS

6.1.3 Additional input parameters for zones

6.2 Junction Data for atmospheric and water flow simulation (STRU CONN)

6.3 Wall structures and heat transfer data (STRU WALL)

7 Hydrogen deflagration simulation

7.1 Simple adiabatic isochoric combustion model COVI

7.2 Hydrogen combustion model with feedback on gas masses

7.3 Hydrogen deflagration zone model DECOR

7.4 Hydrogen combustion model for fast turbulent deflagration PROCO (stand alone and coupled calculation)

8 Engineered systems and installed components in containment

8.1 Atmospheric valve

8.2 Rupture disc

- 8.3 Flaps, doors with inertia
- 8.4 Catalytic recombiner
 - 8.4.1 Detailed modelling of recombiner
 - 8.4.2 Simplified modelling of recombiners (correlations)
- 8.5 Containment related pump systems
 - 8.5.1 Coolers
 - 8.5.2 Spray system related parameters
- 8.6 Ventilation systems and thermal recombiners
- 8.7 Measurement cooling device
- 8.8 Filters

9(Basic ??) aerosol and fission product data

- 9.1 The polydisperse aerosol model
- 9.2 The MGA condensation model
- 9.3 Interactions between thermalhydraulics and aerosols
- 9.4 Pool scrubbing model SPARC-B
- 9.5 Fission product model
 - 9.5.1 Fission product transport model FIPHOST
 - 9.5.2 Decay heat model

10 SOURCES TO CONTAINMENT

11 MASS AND ENERGY BALANCES IN CONTAINMENT

12 INTEGRATION METHODS

- 12.1 Integration methods in the THY part
- 12.2 Integration methods in the AFP part

13 EXTERNAL CONTROL CONDITION DATA (STRU SYSINT??)

14 OUTPUT DATA DESCRIPTION

- 14.1 General Hints
- 14.2 Generation of CPA specific Files for Print and Plot Output
- 14.3 Output Variables
- 14.4 Hints for Plotting and postprocessing

15 REFERENCES

Die Umarbeitung des User-Manuals wurde – wie oben dokumentiert – begonnen, ist aber wegen des Umfangs der Arbeiten noch nicht beendet, da gleichzeitig mit der Umstrukturierung, Erläuterungsergänzung und Eingliederung neuer Modelle die Vollständigkeit der aufgeführten Eingabeparameter im Manual und im Online-File zu prüfen ist. Insbesondere der Abgleich mit dem Online-File ist aus Konsistenzgründen wichtig. Als Endziel ist die Einführung von Hyperlinks vorgesehen, die bei Auswahl eines Eingabeparameters im Online-File nach Aktivierung des Hyperlinks direkt zur Detaillierung im User-Manual führen soll.

7.3.2.2 Aerosolmodellbeschreibung für ASTEC –CPA

Die Eingabedaten für die Aerosolsimulation werden auch im User-Manual für alle Eingabedaten beschrieben. Im alten, vorliegenden User-Manual sind allerdings noch sehr ausführliche Aerosolmodellbeschreibungen enthalten, die zum Teil in das Manual mit den physikalischen Modellbeschreibungen gehören. Für die Beschreibung der physikalischen Modelle existiert bisher ein separater ASTEC-Bericht, der noch viele Querverweise auf COCOSYS und FIPLOC enthält und in dem Eingabebeschreibung und Modellbeschreibung nur kapitelmäßig getrennt sind. Es ist vorgesehen, die Beschreibung der physikalischen Aerosolmodelle in einem ASTEC-CPA-Bericht „Reference Manual Teil 2“ in Ergänzung zum „Reference Manual Teil 1“ für CPA auszuführen, da dieses Dokument im Word-Format und nicht im Interleaf-Format vorliegt.

7.3.2.3 Benutzerempfehlungen

Für die Handhabung und Erstellung der Eingabewerte bestehen für eine Reihe von Eingabeparametern Benutzerempfehlungen. Insbesondere die Nodalisation, d. h. die Unterteilung des abzubildenden Gebäudes in Kontrollvolumina unterliegt Regeln, die von den Benutzern unbedingt einzuhalten sind, um falsche Ergebnisse zu vermeiden. Aber auch für andere Eingabegrößen wurden auf der Basis der langjährigen Anwendererfahrungen Empfehlungen zur Wahl der jeweiligen Größe beschrieben. Diese sollen nun überarbeitet und mit den Erfahrungen aus den Rechnungen zu den verschiedenen Internationalen Standard Problemen (ISP) und zu THAI-Versuchen ergänzt werden. Mit IRSN wurde abgestimmt, ein separates Dokument mit den Benutzerempfehlungen für alle ASTEC Module, nicht nur für CPA, zu schreiben. Damit müssen die bestehenden Guidelines und Empfehlungen für CPA aus dem alten Manual herausgenommen werden und ein erweitertes Kapitel für separate Guidelines geschrieben werden.

Im Folgenden ist die Gliederung der Empfehlungen wiedergegeben.

GUIDELINES and Recommendations

16 Nodalisation

- 16.1 General aspects
- 16.2 Plant related aspects
- 16.3 Model related aspects
- 16.4 Guidelines for nodalisation of specific phenomena
 - 16.4.1 Requirements for simulation of stratification

- 16.4.2 Plume/Jet simulation
- 16.4.3 Dome stratification
- 16.4.4 Dead end compartments
- 16.4.5 Sump simulation using the equilibrium zone model large water pools
- 16.4.6 Cavity nodalisation
- 16.5 Simulation of wall structures
- 16.6 General aspects
- 16.7 Heat transfer models
- 16.8 Flow resistance coefficients
- 16.9 Recommendations for use of aerosol models
- 16.10 Recommendations for CPA Restart
- 16.11 Trouble shooting with the help of ODE solver FEBE

Die Ausführungen zu den einzelnen Punkten erfolgen in enger Anlehnung an die entsprechenden Regeln in der COCOSYS-Beschreibung, können aber nicht mehr im vorliegenden Vorhaben abgeschlossen werden.

7.3.3 Abgestimmte Übertragung von Änderungen in COCOSYS nach ASTEC

Modelländerungen von COCOSYS werden in regelmäßigen Zeitintervallen systematisch ausgewertet und auf relevante Änderungen für ASTEC-CPA überprüft. Die für einen Transfer nach ASTEC relevanten Modellverbesserungen in COCOSYS wurden ausgewertet und in Form einer Kurzübersicht dokumentiert /ARN 07b/. Als ein Beispiel ist in Kap. 7.1.3.1 die Modelloptimierung von Kondensationsrohren beschrieben worden.

Weitere Modellübertragungen betreffen beispielsweise

- Die Aktualisierung des DRASYS-Zonenmodells zur Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen einem Zonenteil GASROOM und der Phasengrenzfläche Wasser-Atmosphäre infolge Verdunstung (einschließlich Volumensieden), Kondensation und Wärmeübergang.
- Einführung eines Tropfenabbaumodells in Nichtgleichgewicht (NONEQUILIB)- und Druckabbausystem (DRASYS)-Zonen, so dass auch bei nicht aktivierter Aerosolrechnung die Ablagerung z. B. entstehender Nebeltropfen gerechnet wird.
- Bei der Anwendung von SPARC war bisher die Definition der Gaskomponente AIR erforderlich. Um auch Szenarien ohne Luft rechnen zu können, wurde SPARC entsprechend erweitert. Anforderungen dazu kamen z. B. aus der Simulation der Wasserstoffrekombination (Modellierung von Sauerstoff und Stickstoff anstatt Luft).

- Der Füllstand von Wasservorlagen in Raumzonen sowie die Gasvolumen-Konzentration (ZCVOLP) werden in der für den Datenaustausch zwischen den Modulen verantwortlichen SIGAL-Datenbank abgespeichert, um sie dem SYSINT-Modul für die Event-Steuerung verfügbar zu machen.

Desweiteren sind im Laufe des Projekts bei Nachrechnungen verschiedener Experimente Inkonsistenzen zwischen den Ergebnissen von COCOSYS und solchen von ASTEC-CPA aufgetreten, die sich zunächst nicht erklären ließen. So waren bei der Nachrechnung der Kernschmelz-Aerosol-Versuche KAEVER die Aerosolphysik gegenüber entsprechenden COCOSYS- aber auch gegenüber früheren ASTEC-Rechnungen deutliche Verschlechterungen festzustellen, die eigentlich so nicht erwartet waren. Eingehende Untersuchungen und aufwändige Quellcodevergleiche zeigten dann aber für diesen Fall, dass seitens IRSN am CPA Quellcode-Modifikationen vorgenommen worden waren ohne diese mit der GRS abzustimmen. So wurde z. B. die Berechnung der Aerosolablagerung an Decken modifiziert, was zu falschen Ergebnissen führte. Weiterhin wurden falsche Berechnungsvorschriften in Zusammenhang mit der Belegung von Variablen für den Aerosoldurchmesser programmiert. Die ursprüngliche von GRS programmierte Version, die korrekte Werte lieferte, wurde ohne Rücksprache gelöscht und erst nach längerer Diskussion mit IRSN auch wieder einprogrammiert. Es wurden Absprachen getroffen, die dies zukünftig vermeiden sollen.

7.3.4 Zukünftige ASTEC-Version

Gemeinsam mit IRSN ist der Bericht 'Objectives and Requirements for ASTEC V2' zum Entwicklungs- und Validierungsplan erstellt worden /DOR 08/. Insbesondere beabsichtigt die GRS, einerseits maßgeblich die Erweiterung von ASTEC auf Siedewasserreaktoren voranzutreiben, andererseits stehen Verbesserungen der Modellierung für DCH, H₂-Verbrennung, Schmelze-Beton-Wechselwirkung, Schmelzeverlagerung und -ausbreitung nach RDB-Versagen und ATLAS für ASTEC an. Entsprechende Arbeitspunkte sind auch im Anschlussvorhaben spezifiziert.

7.3.4.1 Konzept für zukünftige ASTEC-Version

Das Konzept für die zukünftigen ASTEC-Versionen der Serie V2 sieht derzeit 3 Einzelversionen vor: die Version V2.0 mit Beginn 2009, die Version V2.1 Mitte 2010 sowie die Version V2.2 gegen Ende 2011 /DOR 08/.

7.4 Unterstützung von ASTEC-Nutzern

Im Projektzeitraum wurde begleitend zu den Aktivitäten im SARNET-Rahmen die Unterstützung externer, insbesondere auch der ASTEC-Anwender in SARNET sichergestellt. Des Weiteren wurden im SARNET-Rahmen verschiedene sog. "Users Clubs" durchgeführt, die eine Rückmeldung der Aktivitäten der ASTEC-Anwender ermöglichen und eine direktes Diskussionsforum darstellen und somit dem Entwickler eine wertvolle Hilfe bei der Diskussion von Anwenderproblemen geben. Der letzte Workshop wurde im Frühjahr 2008 in Aix-en-Provence von IRSN ausgerichtet. Im Vergleich zu früheren "Users Clubs" konnte ein deutlicher Fortschritt bei der Anwendbarkeit und Szenarienwahl festgestellt werden. Zu Beginn von SARNET konnten von einigen Partnern nur Teilaspekte kompletter Störfallszenarien (z. B. kompletter Ausfall der Stromversorgung, großes Leck im Kühlkreislauf, Dampferzeugerheizrohrbruch) gerechnet werden, da Stabilitätsprobleme z. B. beim Spaltprodukttransport durch den Kühlkreislauf häufig zu vorzeitigen Programmabbrüchen führten oder die Modelltiefe eine integrale Berechnung nicht zuließ.

Unterstützende Arbeiten seitens der GRS konzentrierten sich im Wesentlichen auf die Beseitigung von Anwenderproblemen bei der Erstellung korrekter Eingabedatensätze insbesondere für das von der GRS bereitgestellte ASTEC-Modul zur Simulation von Vorgängen im Containment (CPA - Containment Part of ASTEC). Weiterhin werden Anwender unterstützt, die Störfallszenarien für deutsche Reaktorlinien vom Typ KONVOI rechnen (z. B. IKE - Uni Stuttgart, Nuclear Research & Consultancy Group - Niederlande), in eingeschränktem Umfang auch solche, die Sequenzen für russische Reaktoren der Baureihe WWER-1000/W-320 analysieren (TU Dresden). Letzteres ergab sich aus einer Zusammenarbeit im Rahmen eines Austauschprogramms innerhalb von SARNET, bei dem eine Anwenderin des bulgarischen Energie-Instituts zur vertiefenden Anwendung von ASTEC zwei Monate bei der GRS in Köln verbrachte und eine ASTEC Rechnung mit einer entsprechenden ATHLET-Rechnung vergleichend analysierte /TUS 06/.

Eingabefehler bzw. Probleme bei der Datensatzerstellung sowohl aufgrund missverständlicher Dokumentation als auch aufgrund neuerer Modellentwicklungen konnten beseitigt werden. In einigen Fällen führten Anwenderanfragen betreffend fehlerhafter Programmläufe auch zu Modifikationen im Quellcode.

Als fester Bestandteil des SARNET-Arbeitspakets USTIA ("Users Support and Training, Integration and Adaption") ist die von Beginn an verfolgte Strategie etabliert worden, für die Unterstützung von ASTEC-Anwendern das Software-Werkzeug MARCUS zu nutzen. Vor dem Hintergrund steigender Nutzerzahlen muss dem Support hohe Aufmerksamkeit beigemessen werden. Über dieses zentrale Werkzeug werden Fehler oder Probleme dem Entwickler direkt mitgeteilt. MARCUS wurde kostenlos mit Beginn von SARNET den Nutzern zur Verfügung gestellt und ist auf einem GRS-Server installiert. Der Zugriff erfolgt nach Zulassung direkt über das world-wide-web (www). MARCUS stellt eine einheitliche Prozedur für die Kommunikation zwischen Benutzern und Entwicklern zur Verfügung und vereinfacht somit die Abarbeitung der Anfragen, deren Dokumentation und Problemlösung und nutzt letztlich auch Synergieeffekte, da allen Nutzern die bereits abgehandelten Anfragen und Problemlösungen jederzeit zur Verfügung stehen. Somit kann der Aufwand optimiert werden und eine Analyse der bereits abgearbeiteten Anfragen dem Nutzer hilfreiche Unterstützung bieten.

MARCUS gibt zunächst jedem angemeldeten Benutzer einen Überblick über alle Anfragen von anderen Benutzern, über den Stand eigener Anfragen sowie über die Problemlösung zu Anfragen anderer Nutzer. Nach der Anmeldung besteht für den Nutzer zunächst die Möglichkeit, Informationen zu bereits gelösten oder noch offenen Anfragen zu erhalten.

	Creator	Code	Request type	Abstract	Creation time	Developer	Start date	State	Delivering date	Site
1	Antonio Cipollaro	MEDICIS	Anomaly	Follow-up on SARNET/576/MEDICIS	13/05/08 02:14			Waiting		SARNET
2	Egidijus Urbonavicius	CESAR	Anomaly	Problem with PUMP simulation	13/05/08 09:33			Waiting		SARNET
3	Ivo Kljenek	CPA	Anomaly	Pb in CPA for TOSGAN	07/05/08 04:27			Waiting		SARNET
4	Joan Fontanet	CPA	Anomaly	CPA-SPARC convergence problems	28/04/08 05:20			Working		SARNET
5	SARNET:pmatejovic	CPA	Anomaly	Response to sheet 544 ? incorrect CPA valve function	07/04/08 11:21			Working		SARNET
6	Arunas Bieliuskas	CPA	Anomaly	Different injected and actual aerosol masses in containment	31/03/08 09:58			Waiting		SARNET
7	Polina Tusheva	ALL	Anomaly	ver1000 sbo. transient crash	27/03/08 02:42	jean-luc barbier	05/05/08	Terminated	13/06/08	SARNET
8	Jozef Slaby	CPA	Evolution	problem with value TUPP	26/03/08 09:14			Waiting		SARNET
9	armelle bretault	ALL	Anomaly	Problème avec ASTEC V1.3rev2	21/01/08 12:50	Nicolas Tregoures	22/01/08	Terminated	01/02/08	SARNET
10	SARNET:pmatejovic	CPA	Evolution	Fan modelling	06/02/07			Working		SARNET

Abb. 7-35 MARCUS-Übersichtsdarstellung mit Kurzinfo über Anfragen zu ASTEC

Durch Auswahl einer bestimmten Anfrage werden dann nähere Informationen bereitgestellt. Dies ist zunächst eine detaillierte Beschreibung des aufgetretenen Problems einschließlich evtl. vorhandener Zusatzinformationen, die als Anhänge eingefügt werden können, also z. B. Eingabedatensätze (Abb. 7-36).

Nach Analyse und Lösung des aufgetretenen Problems wird vom jeweiligen Bearbeiter, an den vom IRSN bzw. GRS Maintenance-Centraliser die Anfrage delegiert worden ist, eine entsprechende Antwort-Karte (Abb. 7-37) ausgefüllt und die Anfrage geschlossen. Auch hier können Zusatzinformation wie z. B. modifizierte Datensätze angehängt werden. Ist die Information bzw. Beschreibung des Problems aus Sicht des Bearbeiters nicht ausreichend, kann auch eine entsprechende Anfrage an den Nutzer zurückgegeben werden und die Anfrage geöffnet bleiben.

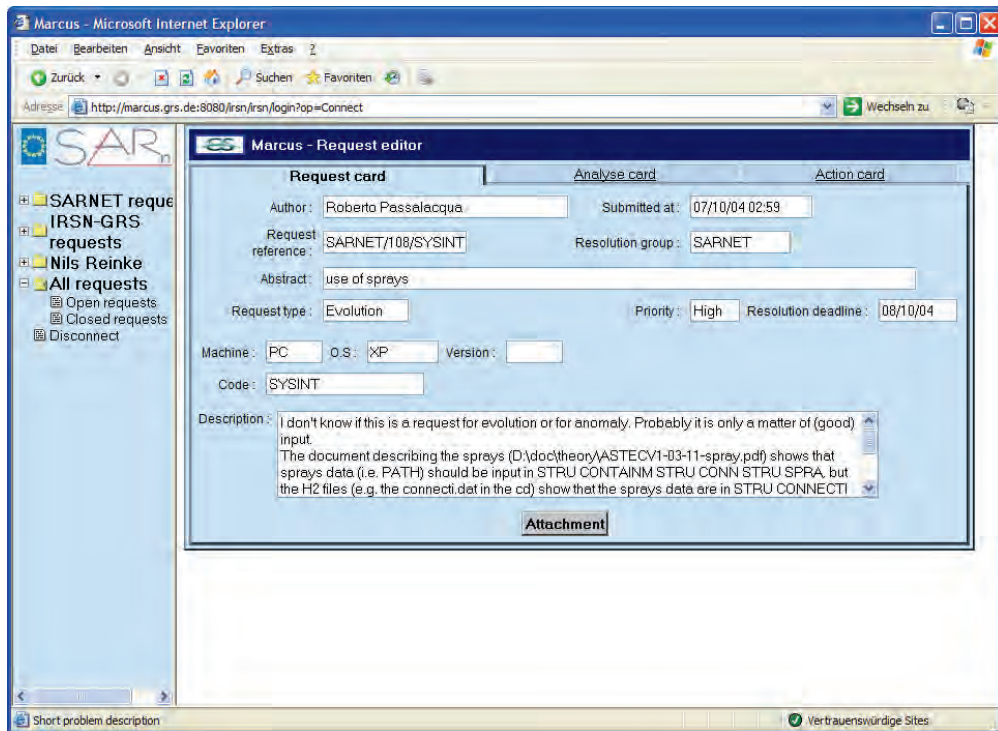


Abb. 7-36 Eingabemaske für Problembeschreibung und Zusatzinformationen

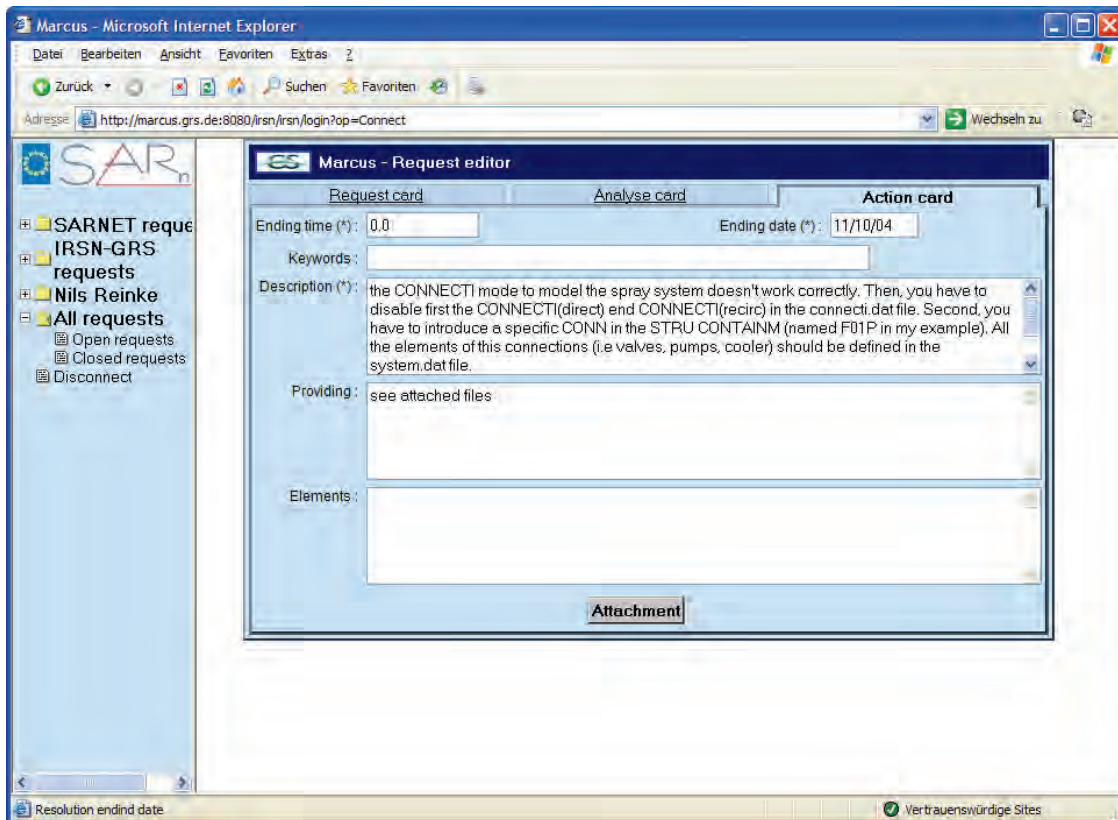


Abb. 7-37 Eingabemaske zur Bereitstellung der Problemlösung (Action Card)

Die MARCUS-Anfragen bezogen sich zum überwiegenden Teil auf die Module CESAR, DIVA und CPA, die jeweils die Thermohydraulik des Primär- und Sekundärkreises, die Kernzerstörung bzw. die Phänomene im Containment berechnen. Sie repräsentieren die Hauptmodule in ASTEC und sind demzufolge gerade auch zu Beginn von SARNET vorrangig von den Anwendern genutzt worden, entweder als Einzelmodul oder auch im Rahmen von gekoppelten Rechnungen. Zu einem geringeren Prozentsatz sind auch Anfragen zu MEDICIS (Schmelze-Beton-Wechselwirkungen), SOPHAEROS (Spaltprodukttransport und Ablagerung im Kühlkreislauf) und zu SYSINT (Systembeschreibung) gestellt worden.

Nachfolgend wird beispielhaft eine der von GRS bearbeiteten MARCUS-Anfragen erläutert. Viele Anfragen kamen in Zusammenhang mit der Aktivierung des DRASYS-Zonenmodells zur Modellierung von Dampfdurchtritt durch Wasservorlagen, wie es z. B. auch bei Druckabbausystemen in SWR auftritt. Bei Vorliegen von Sättigungsbedingungen in der Wasservorlage kondensiert der Dampf jedoch nicht mehr vollständig. Ein empirischer Ansatz basierend auf russischen Experimenten steht dazu zur Verfügung, besitzt jedoch nur über einen eingeschränkten Bereich Gültigkeit. Bei dem vorliegen-

den Problem der Nachrechnung eines Blow-Down-Versuches der MARVIKEN-Testreihe lagen die Randbedingungen jedoch außerhalb des Gültigkeitsbereichs, so dass nachfolgend falsche Werte errechnet wurden, mit dementsprechend unrealistischen Ergebnissen. Dies führt nicht zwingend notwendig zum Abbruch der Rechnung, außerdem wird eine Warnung in der Ausgabedatei von CPA generiert. Diesbezüglich wurde auch schon mehrmals von der GRS empfohlen, die Ausgabedateien hinsichtlich solcher Meldungen zu durchsuchen und insbesondere auch die Modelle auf ihren Anwendungsbereich bei der Nachrechnung von Experimenten zu überprüfen. Als Konsequenz dieser Arbeiten wurde der Quellcode dahingehend geändert, dass das eingangs erwähnte Modell nicht aktiviert wird, wenn die Randbedingungen weit außerhalb des für das Modell gültigen Anwendungsbereichs liegen. Diese Modifikation wird mit der nächsten Revision von ASTEC aktiv. Im Zuge weiterer Analysen zu dieser MARCUS-Anfrage wurde dann jedoch auch festgestellt, dass seitens des Anwenders Eingabefehler gemacht wurden, die zusätzlich das Ergebnis verfälschten bzw. zum Abbruch der Rechnung führten. Eine entsprechende Kurznotiz, basierend auch auf durchgeführten Testläufen mit dem modifizierten Eingabedatensatz, wurde erstellt und dem Anwender zur Verfügung gestellt.

Eine Übersicht über Anfragen für das Modul CPA, das hauptverantwortlich von der GRS gepflegt und entwickelt wird, ist in der nachfolgenden Tabelle gelistet.

Tab. 7-4 Marcus Anfragen zu CPA

Anfrage Ref.	Ersteller	Modul	Kurzinfo
CAD/1195/CPA	Laurent Walle	CPA	Calculation crashes when steam injection starts
SARNET/607/CPA	Antonio Cipollaro	CPA	Initialisation problem?
SARNET/603/CPA	Ivo Kljenak	CPA	Reply to previous request - solution found
SARNET/588/CPA	Jiri Dienstbier	CPA	CPA fission product balance
SARNET/578/CPA	Ivo Kljenak	CPA	Pb in CPA for TOSQAN.
SARNET/568/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	Response to sheet 544 ? incorrect CPA valve function
SARNET/542/CPA	Didier Tarabelli	CPA	The UNIFORM option fin CPA does not work
SARNET/555/CPA	Arunas Bieliauskas	CPA	Different injected and actual aerosol masses in containment
SARNET/544/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	Incorrect valve function in CPA module (urgent).
SARNET/461/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	Fan modelling
SARNET/494/CPA	Arunas Bieliauskas	CPA	Mass of N2, O2 and H2 decreasing over time in CPA
SARNET/486/CPA	Arunas Bieliauskas	CPA	Output file management in the CPA module
SARNET/482/CPA	SARNET:mconstantin	CPA	Injection of Iodide from SOPHAEROS to CPA-IODE

Anfrage Ref.	Ersteller	Modul	Kurzinfo
CAD/691/CPA	Christophe Seropian	CPA	sets HXX in zder2
SARNET/459/CPA	Gyorgy Gyenes	CPA	Error in the input aerosol diameter
SARNET/455/CPA	Gyorgy Gyenes	CPA	aerosol deposition is different calculated by V.1.2 and V.1.3
SARNET/451/CPA	Ivo Kljenak	CPA	STRU PLOT in ASTEC CPA - Aerosol concentration in sump
SARNET/369/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	CPA-BASE communication
SARNET/366/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	Valve function in the module CPA
SARNET/367/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	CPA valves function
SARNET/359/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	CPA - zone part definition
SARNET/361/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	CPA - error in DRASYS module
SARNET/361/CPA	SARNET:pmatejovic	CPA	CPA - error in DRASYS module
SARNET/381/CPA	Ivo Kljenak	CPA	How to model sprays in ASTEC-CPA
SARNET/344/CPA	Jiri Dienstbier	CPA	Wall temperature specification in CPA
CAD/429/CPA	Sarah Brethes	CPA	CPA problem after CSS start
SARNET/326/CPA	SARNET:mconstantin	CPA	Input deck problem. Description of spray system.
CAD/355/CPA	Astec team	CPA	DRASYS problem during VVER440 calculation
SARNET/273/CPA	Roberto Passalacqua	CPA	ASTECv1.2: stop in CPA (SERO problem)
SARNET/298/CPA	Pal Kostka	CPA	Code crash in CPA under linux
SARNET/264/CPA	Joan Fontanet	CPA	Bug in the Mass Median Diameter
SARNET/257/CPA	SARNET:Ggyenes	CPA	Evaluation of the aerosol parameters
SARNET/247/CPA	Jiri Dienstbier	CPA	Code failure CPA
SARNET/241/CPA	Joan Fontanet	CPA	CPA portability
SARNET/244/CPA	SARNET:Ggyenes	CPA	Defintion of FP source terms has failed
SARNET/237/CPA	Lubica Kubisova	CPA	abnormal stop of CPA when cylindrical type of wall used
SARNET/236/CPA	SARNET:ggyenes	CPA	Aerosol removal
SARNET/229/CPA	Joan Fontanet	CPA	Problems with polydisperse aerosols

Prinzipiell lassen sich die Anfragen und Fehlermeldungen zu ASTEC-Rechnungen vier unterschiedlichen Kategorien zuordnen:

1. Fehler aufgrund falscher Ein- bzw. Angaben im Datensatz
2. Fehler auf Grund unkorrekter oder missverständlicher Interpretation der Eingabebeschreibung (Online-Manual)
3. Fehler im Quellcode
4. Fehler aufgrund von Modellschwächen

Die ersten beiden Punkte machten gerade zu Beginn von SARNET den Hauptteil der Anfragen aus. So sind Programmabstürze oder falsche Rechnungen häufig auf Fehler in der Eingabe zurückzuführen, die teilweise auch aufgrund fehlender oder missverständlicher Eingabebeschreibungen auftraten. Für die aktuell freigegebene Version 1.32 sind dagegen die Gründe für das Öffnen einer MARCUS Anfrage nur noch zur Hälfte auf fehlerhafte Eingaben zurückzuführen, der verbleibende Anteil auf Fehler im Quellcode oder Modellschwächen. Somit gilt es als Konsequenz aus der Analyse der Anfragen die Anfälligkeit gegen Eingabefehler zu minimieren. Dazu ist einerseits eine Optimierung der Einleseroutine angeraten, die falsche oder auch physikalisch unrealistische Parameter abfängt und dem Anwender entsprechende Meldungen und evtl. Hilfestellungen bereitstellt. Dies ist bis zu einem gewissen Grad bereits vorhanden, jedoch können nicht alle Sonderfälle abgefangen werden und von Seiten der Anwender wurde auf dem "Users Club" kritisiert, dass die Meldungen wenig aussagekräftig wären und nur wenig zur Identifikation des eigentlichen Problems beitragen würden. So besteht oftmals die einzige Möglichkeit zur Problemlösung in der Erstellung einer Anfrage über MARCUS.

Des Weiteren besteht insbesondere bei der Windows-Version von ASTEC das Problem, dass Programmabstürze manchmal keine eindeutige oder gar keine Fehlermeldung generieren, so dass dem Anwender kein Hinweis auf eventuelle Fehler zur Verfügung steht. Auch hier fließen die Erkenntnisse in die Entwicklung ein. Mit Blick auf die Fortführung von SARNET im 7. Forschungsrahmenprogramm der EU ab 2009 (d. h. SARNET-2) ist eine Weiterführung der bisherigen Strategie angeraten, zumal neben den bereits etablierten Partnern auch neue Anwender hinzukommen, die zwar einerseits von den bisherigen Erfahrungen profitieren aber auch wieder neue Anforderungen stellen. Vor dem Hintergrund der neuen Version ASTEC V2, die sich durch zahlreiche Modellverbesserungen, aber insbesondere auch durch ein neues Modul zur Rechnung der Kernzerstörungsphase auszeichnet – ICARE2 statt DIVA –, sind ebenfalls steigende Anfragen zu erwarten, die entsprechenden Aufwand erfordern, aber für die Akzeptanz von ASTEC als Europäisches Referenzprogramm notwendig sind. Des Weiteren wird die GRS durch den Einbau weiterer Module z. B. zur Berechnung der Schmelzeausbreitung nach RDB-Versagen mit einem erhöhten Supportbedarf konfrontiert werden.

Eine abschließende Auswertung aller ca. 550 Anfragen, die von IRSN durchgeführt wird, steht noch aus.

7.5 Abstimmung mit IRSN

Wie bereits eingangs des Kapitels erwähnt, leitet sich der Entwicklungsbedarf für ASTEC aus verschiedenen Quellen ab. Der langfristige Entwicklungsplan wird dabei in den aus Mitgliedern von GRS und IRSN paritätisch besetzten Kontroll- und Arbeitsgremien definiert. Dazu finden turnusgemäß entsprechende Treffen statt. Übergeordnetes Gremium ist das ASTEC-Steering-Committee (SC) welches, unterstützt durch eine Technical Review-Group (TRG) bzw. durch die jeweiligen ASTEC-Projektleiter, den Stand und die Strategie der Entwicklung überwacht. Außerdem werden die Verknüpfung zu anderen nationalen wie internationalen Programmen (z. B. SARNET-2) erörtert.

Dem SC zugeordnet ist das TRG. Bei mehrmaligen Treffen pro Jahr wird der Fortgang der Entwicklung diskutiert. Außerdem werden Probleme, sei es bei den Arbeiten bei IRSN, GRS, anderen externen Anwendern aber insbesondere auch im SARNET-Rahmen thematisiert. Daraus erwachsender Handlungsbedarf sowie ein entsprechendes Zeitfenster für die Erledigung auch unter Berücksichtigung der aktuell verfügbaren Kapazitäten werden definiert.

Kurzfristiger Handlungsbedarf erwächst insbesondere aus den Arbeiten in SARNET. Diese zusätzlichen Anforderungen ergeben sich meist aus der Bearbeitung und Analyse sogenannter MARCUS-Anfragen, MARCUS stellt eine WWW-basierte Plattform zur Unterstützung der ASTEC-Anwender dar.

Ein Schwerpunkt bei der Zusammenarbeit und dementsprechend hoher Abstimmungsbedarf bildete und bildet die Erweiterung von ASTEC auf SWR, die auch seitens der EU als prioritär für die Weiterentwicklung eingestuft wird. Im Rahmen des vorliegenden Vorhabens wurden erste Arbeiten in Angriff genommen. Als problematisch erwies sich dabei der Umstand, dass in Frankreich keine SWR betrieben werden, der Kenntnisstand dementsprechend gering ist und das Know-how der GRS stark gefragt ist. Gleichzeitig sind speziell diejenigen Module, die den Kühlkreislauf und die Kernzerstörungsprozesse bei SWR modellieren, maßgeblich unter französischer Entwicklung. Dies macht eine genaue Absprache nicht nur hinsichtlich der Aufgabenzuordnung bei Arbeiten an einem Modul, sondern auch hinsichtlich der zeitlichen Koordination der Arbeiten notwendig.

Zusätzlich zu den offiziellen Treffen von IRSN und GRS werden häufig auch technische Meetings abgehalten, bei denen spezielle Themen unter Einbeziehung der daran beteiligten Experten diskutiert werden. Dazu gehörten z. B. Themen wie Direct Containment Heating, die Ankopplung von ATLAS an ASTEC und die Modellierung von Druckabbausystemen.

Mit zunehmender Verbreitung des Programms wird auch dessen Anwendungsbereich erweitert. So setzt der französische Partner IRSN z. B. das von der GRS hauptverantwortlich betreute Modul CPA zunehmend auch für Analysen von Störfällen bei Hochtemperaturreaktoren (HTR) sowie zukünftig auch bei Forschungsarbeiten für den „International Thermonuclear Experimental Reactor“ (ITER) ein. Auch hier ist die Unterstützung seitens der GRS im Sinne einer gemeinschaftlichen Zusammenarbeit angeraten.

8 Querschnittsaktivitäten

8.1 Modifikation der Modellierung aufgrund der Unterstützung interner und externer Nutzer

Das COCOSYS Programm mit den Hauptmodulen THY und AFP wurde bereits an verschiedene externe Anwender weitergegeben (z. B. RU Bochum, Becker Technologies). Durch den intensiven Austausch mit den internen und externen COCOSYS-Anwendern wurden verschiedene Schwierigkeiten bei der Anwendung des COCOSYS-Programms aufgezeigt. Diese betreffen z. T. fehlende Einzelmodelle (z. B. Umluftkühler) als auch fehlende Ausgabegrößen. Ziel ist es, die Möglichkeiten des COCOSYS-Programms an den tatsächlichen Bedarf der verschiedenen Anwender weiter anzupassen und die Handhabung des Programms zu optimieren. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden diesbezüglich die nachfolgend beschriebenen Arbeiten durchgeführt.

8.1.1 Optimierung der Iterationsprozedur für Pumpsysteme

Wird eine Kennlinie für die Pumpe verwendet, wird der Pumpmassenstrom iterativ berechnet. Das Iterationsverfahren basiert auf der Methode der Intervallhalbierung. Dieses wurde dahin gehend ergänzt, dass die verwendete Funktion teilweise keine Lösung besitzt. Die Iteration wird abgebrochen, wenn der Abstand der Unter- (V_{low}) und Obergrenze (V_{up}) eine vorgegebene Genauigkeit unterschreitet und wenn der dann berechnete Funktionswert kleiner ist als ein vorgegebener Fehler. Das zweite Kriterium ist notwendig, um bei zweisträngigen Pumpsystemen und symmetrischen Randbedingungen auch hinreichend genaue symmetrische Lösungen zu erhalten. Bisher wurde als Kriterium für beide Bedingungen eine feste konstante Größe $XACC = 10^{-6}$ gewählt. Unter bestimmten Randbedingungen ist das Kriterium zu genau, so dass keine Lösung gefunden wurde.

Auf Anregung seitens Becker Technologies wurden nun zwei Kriterien verwendet. Für das Argument (Volumenstrom der Pumpe) gilt nun

$$XACC1 = XACC \cdot |V_{up} - V_{low}| \quad (8-1)$$

und für den Funktionswert

$$FACC1 = FACC \cdot \sqrt{\frac{2g(h_{up} - h_{low}) \cdot A^2}{\zeta \cdot \max(V_{up}^2, V_{low}^2)}} \quad (8-2)$$

mit $FACC = 10^{-4}$. Der Aufruf der Iterationsroutine SBISE wurde für die anderen Routinen entsprechend angepasst.

8.1.2 Optimierung der INSERTION-Option zur Simulation von Kondensationsrohren

Eine Überprüfung dieser Option zur vereinfachten Simulation von Kondensationsrohren hat noch Unzulänglichkeiten aufgezeigt. Weiterhin wurde durch externe Nutzer angeregt, das Modell dahingehend zu erweitern, dass ein Freilegen der Kondensationsrohre zum Beispiel aufgrund eines Lecks in der Kondensationskammer simuliert werden kann.

Im ersten Schritt wurde die Berechnung der treibenden Druckdifferenz sowie dessen Glättung verbessert. Die verwendete Gleichung lautet nun:

$$p_F(\Delta p) = \delta \left(\frac{1}{1 + \frac{\Delta p}{\delta}} + \frac{\Delta p}{\delta} - 1 \right) \quad \Delta p \geq 0 \quad (8-3)$$

Mit

p_F	treibende Druckdifferenz [Pa]
δ	zusätzliche Druckdifferenz zur Dämpfung der Gleichung (Eingabegröße VINSERT) [Pa]
Δp	anliegende Druckdifferenz minus Eintauchtiefe $p_1 - p_2 - \rho_w g h$

Die Gleichung (8-3) hat folgende Eigenschaften: $p_F(0) = 0$, $p_F(\delta) = 0,5$, $p_F(\Delta p \gg \delta) = \Delta p - \delta$. Weiterhin ist die Ableitung von p_F bei 0 gleich 0 und für große Werte gleich 1. Dies gewährleistet somit stetig differenzierbare Übergänge.

Ebenfalls wurden die Schaltvorgänge modifiziert. Die Verbindung öffnet nun bei einem Differenzdruck von $\Delta p > 0,1 \cdot \delta$ und schließt bei $\Delta p < -0,5 \cdot \delta$.

Unterschreitet die Eintauchtiefe den Rohrradius ($h < r$), wird ein Durchbruch der einströmenden Gase durch die Wasservorlage angenommen. Dabei wird eine lineare Abhängigkeit für die Verteilung in den Pool und in die darüber liegende Atmosphäre angenommen.

8.1.3 Korrektur der Blendengleichung (ORIFICE)

Von externen Nutzern wurde auf einen Fehler in der Blendengleichung (ORIFICE-Option) von COCOSYS hingewiesen, d. h. bei kritischen Druckverhältnissen ist der berechnete Massenstrom und damit die Geschwindigkeit in der Verbindung zu groß.

Als Ursache stellte sich ein Fehler bei der Berechnung der Ausflusszahl α heraus, der unter kritischen Druckverhältnissen Werte über 1 erreichte anstatt sich zu verringern. Die entsprechende Formel (5-30) im COCOSYS V1.2 Reference Manual

$$\alpha = \frac{1 + \frac{1}{2\psi_g^2}(x_{\text{crit}} - x)x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}}}{2\xi x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}}} \dots$$

$$\dots \frac{-\sqrt{1 + \frac{1}{2\psi_g^2} \left[(x_{\text{crit}} - x)x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}} - 4x_{\text{crit}}^{\frac{2}{k_g}}(1-x)\xi \right]}}{\dots}$$

wurde korrigiert zu

$$\alpha = \frac{1 + \frac{(x_{\text{crit}} - x)x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}}}{2\psi_g^2} - \sqrt{\left(1 + \frac{(x_{\text{crit}} - x)x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}}}{2\psi_g^2}\right)^2 - \frac{4x_{\text{crit}}^{\frac{2}{k_g}}(1-x)\xi}{2\psi_g^2}}}{2\xi x_{\text{crit}}^{\frac{1}{k_g}}}$$

Zur Überprüfung wurden Testrechnungen mit einem einfachen 2-Raummodell durchgeführt (zwei Räume mit je 10 000 m³, Anfangsdrücke in R1 = 5 bar, in R2 = 1 bar, Verbindung J1 als ORIFICE mit 1 m²). Verglichen werden in Abb. 8-1 - Abb. 8-4 die Varianten:

- V1 = INST - instationäre inkompressible Strömungsgleichung
- V2 = ORI - kompressible Blendengleichung vor der Korrektur
- V3 = ORI_neu - korrigierte kompressible Blendengleichung.

COCOSYSV 2.3AA, sound speed, comparison: V1 = INST, V2/V3 = ORIFICE

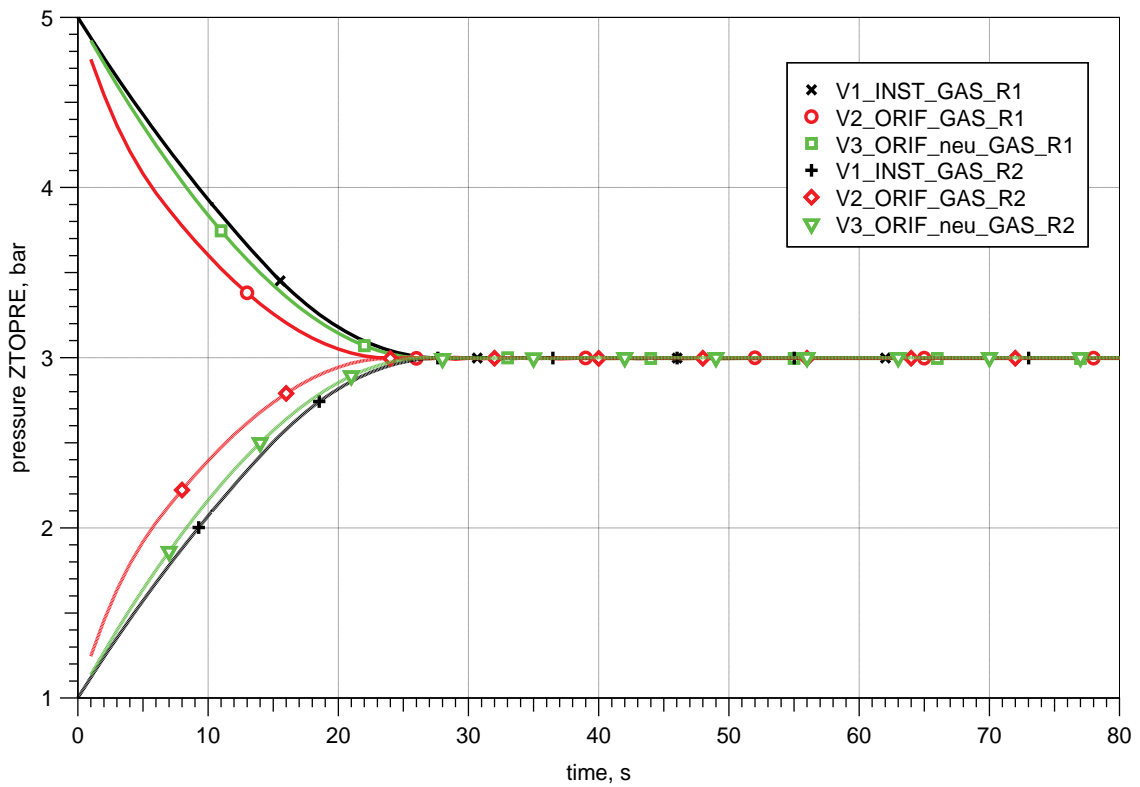


Abb. 8-1 Raumdruckverläufe

COCOSYSV 2.3AA, sound speed, comparison: V1 = INST, V2/V3 = ORIFICE

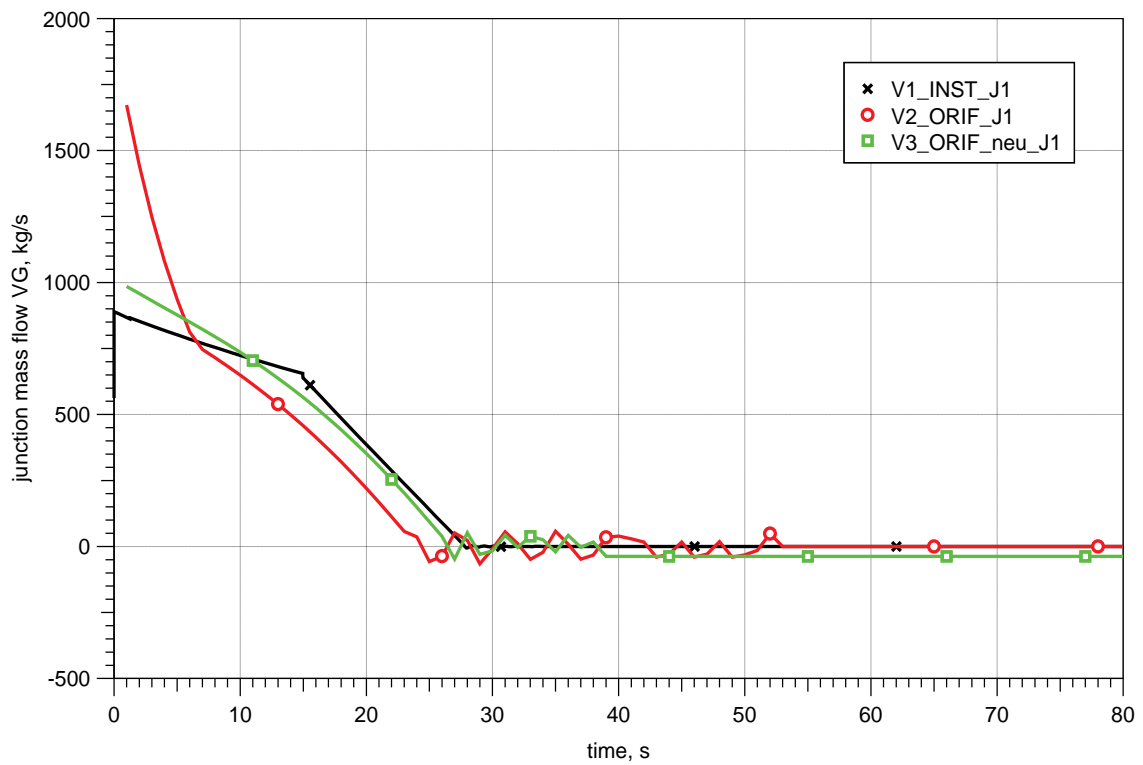


Abb. 8-2 Massenströme in Verbindung J1

COCOSYSV 2.3AA, sound speed, comparison: V1 = INST, V2/V3 = ORIFICE

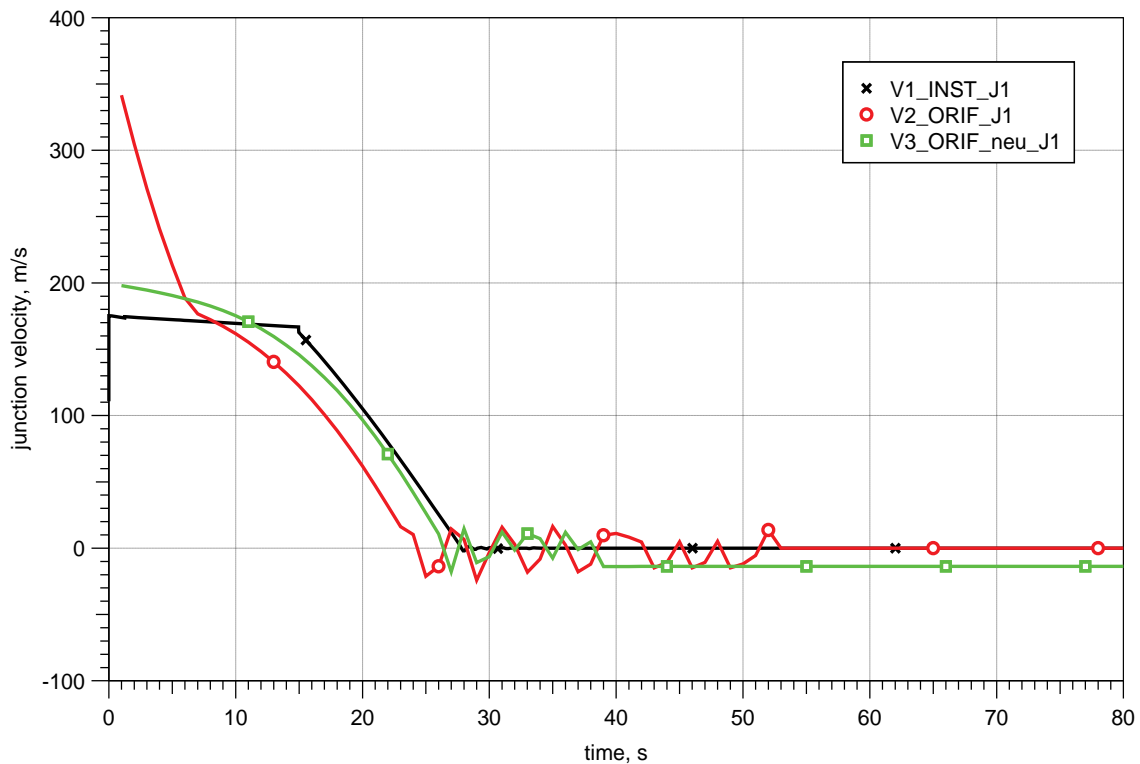


Abb. 8-3 Geschwindigkeit in Verbindung J1

Mit der Korrektur liegen die Ergebnisse bei Verwendung von INST (V1) und ORIFICE (V3) nahe beieinander. Bezüglich der berechneten Geschwindigkeit ist zu berücksichtigen, dass diese auf den geometrischen Querschnitt bezogen ist, d. h. die Einschnürung in der Verbindung nicht berücksichtigt ist.

Mit der korrigierten Berechnung von α verringert sich die Druckdifferenz zwischen den Räumen jedoch nicht auf Null und damit wird im obigen Beispiel über lange Zeit ein konstanter Massenstrom von ~ -35 kg/s berechnet. Dies hängt u. a. mit der Dämpfung der Ausflusszahl bei kleinen Druckdifferenzen zur Stabilisierung der Rechnung zu zusammen (Reference-Manual Gleichung 5-34):

$$\alpha_D = \begin{cases} \alpha_D \left(\frac{\Delta p}{5 \cdot 10^{-3} p_{j_s}} \right)^2 & \Delta p < 5 \cdot 10^{-3} p_{j_s} \\ \alpha_D & \Delta p \geq 5 \cdot 10^{-3} p_{j_s} \end{cases}$$

Im Unterschied zum Reference-Manual wurde allerdings in der Entwicklerversion in zwischen der Bereich der Dämpfung von $\Delta p < 5 \cdot 10^{-3} p_{j_s}$ auf $5 \cdot 10^{-5} p_{j_s}$ verringert.

Daraufhin wurde die Dämpfung untersucht. Das Verhalten ist relativ stark abhängig von den Randbedingungen (Zonenvolumen, Verbindungsfläche, max. Integrations-schrittweite, ...), so dass keine unter allen Bedingungen optimale Variante gefunden wurde. Als beste Alternative zur bisherigen Dämpfung von α_D (siehe oben) wird die Verwendung einer Kosinusfunktion:

$$\alpha_D = \alpha_D \left(0,5 \cdot \cos \left(\pi + \pi \frac{\Delta p}{\Delta p_{\text{limit}}} \right) + 0,5 \right)$$

sowie die Erhöhung des Dämpfungsbereiches Δp_{limit} auf den ursprünglichen Wert von $5 \cdot 10^{-3} p_{js}$ vorgeschlagen.

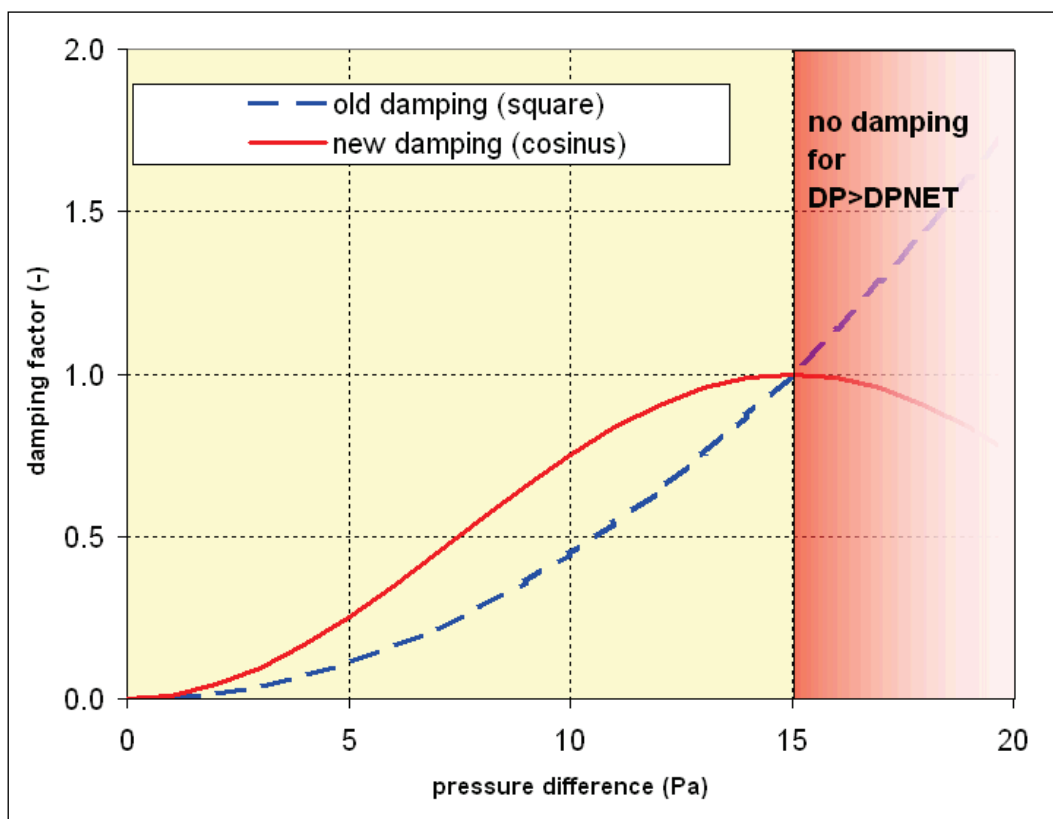


Abb. 8-4 Dämpfungsfunktionen für α_D

Diese ist in der neusten Entwicklerversion implementiert, wobei die alte Variante als auskommentierter Quelltext noch in der Subroutine vdero.f enthalten ist. Die Änderung wird anhand von Abb. 8-5 illustriert mit:

- V1 = ORI_neu - korrigierte kompressible Blendengleichung (identisch zu Variante V3 oben mit Dämpfung laut Reference Manual und $\Delta p_{\text{limit}} = 5 \cdot 10^{-5} p_{js}$)

- V2 = wie V1 mit neuer Dämpfungsfunktion
- V3 = wie V1 mit neuer Dämpfungsfunktion und $\Delta p_{\text{limit}} = 5 \cdot 10^{-3} p_{\text{js}}$.

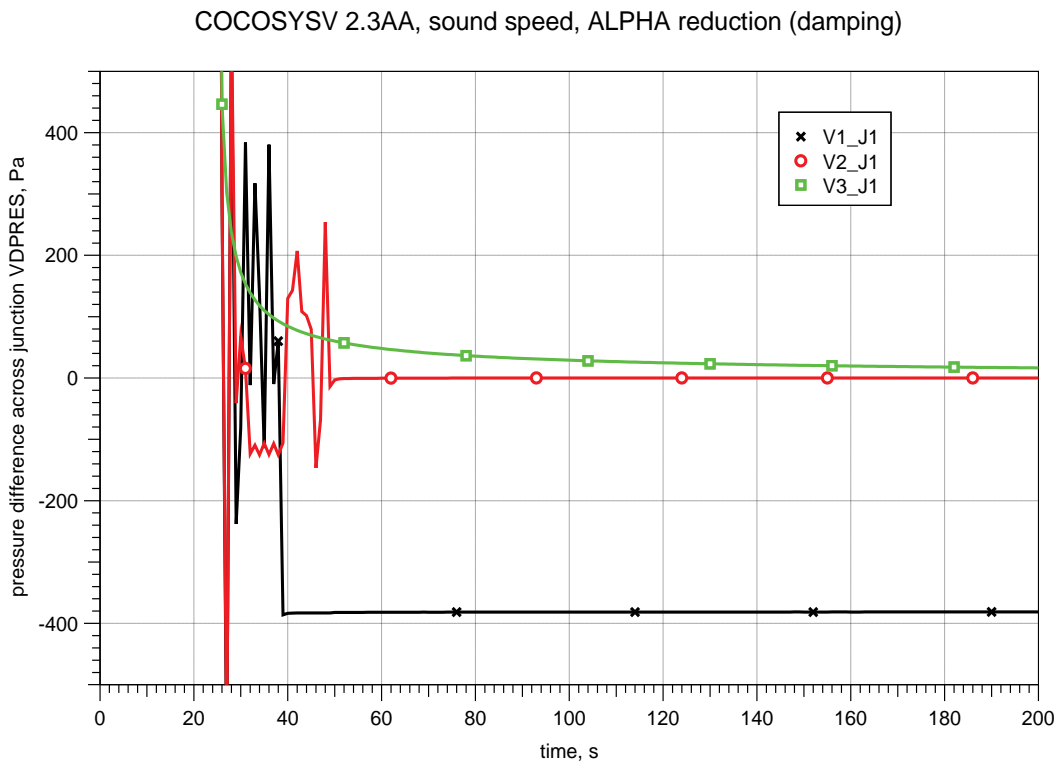


Abb. 8-5 Druckdifferenzverlauf über die Verbindung J1 in Abhängigkeit von der Dämpfung von α_D

8.1.4 Einbau eines von der RU Bochum entwickelten Modells zur Simulation der nassen Resuspension

Die RU Bochum hat eine Korrelation zur Simulation der nassen Resuspension anhand verschiedener THAI-Versuche entwickelt /DAP 08/. Dieses Modell wird durch die GRS in COCOSYS eingebaut.

8.1.5 Verbesserung der vereinfachten Simulation der Kondensationsrohre

Bei der Anwendung auf einen Reaktor vom Typ RBMK traten unterschiedliche Ergebnisse zwischen der Version V2.3v12 und der Entwicklerversion V2.4 auf. Als Ursache wurde die Simulation des Durchbruchs von Dampf bei nur gering eingetauchten Kondensationsrohren identifiziert. Üblicherweise werden Kondensationsrohre zusammengefasst. Dadurch wurde in diesem Fall ein Durchbruch viel zu früh berechnet. Bei der

Verwendung der INSERT-Option muss nun der Rohrradius separat vorgegeben werden. Die Rechnung wurde wiederholt. Die Ergebnisse sind nun für beide COCOSYS-Versionen identisch.

8.1.6 Einbau spezieller BOP Modelle für WWER1000/320 in der mit COCOSYS gekoppelten ATHLET-CD Version

Die Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD wurde aktualisiert. Die gekoppelte Version wird ebenfalls unter dem COCOSYS-Konfigurationsmanagement verwaltet. Für die Anwendung der gekoppelten Version auf WWER1000 Reaktoren ist die Einbindung spezieller so genannter BOP-Modelle notwendig. Dazu wurden spezielle Konfigurationen in den Makefiles eingeführt, so dass der zusätzliche Aufwand für diese Spezialversionen relativ gering ist.

8.2 Mitarbeit in internationalen Gruppen/Gremien

8.2.1 Mitarbeit in OECD/GAMA

State-of-the-Art Report on Nuclear Aerosols (NARSOAR)

Ein Ergebnis des bereits 1998 in Köln durchgeführten OECD/CSNI Workshops zu "Nuclear Aerosols in Reactor Safety" war die Empfehlung, einen State-of-the-Art-Bericht zum Aerosolverhalten im Primärkreislauf und Sicherheitsbehälter zusammenzustellen. Um dieser Empfehlung Folge zu leisten, wurde durch eine Expertengruppe unter Vorsitz der GRS eine Entwurfsversion eines neuen State-of-the-Art Reports on Nuclear Aerosols (NARSOAR) erstellt.

Dazu wurden im Laufe dieses Vorhabens die Kapitel "aerosol growth by steam", "uncertainties involved in specific aerosol applications", "COCOSYS", "KAEVER Tests and ISP-41", "REST, REVENT and THAI Reentrainment Tests", "VANAM Tests and ISP-37", "MARVIKEN Tests" und "THAI Aerosol Tests" verfasst. Desweiteren wurde am vierten NARSOAR-Treffen, das am 22. und 23. Oktober 2005 in Ottawa/Kanada stattfand, teilgenommen sowie die fünfte und letzte Sitzung im Rahmen der Erstellung dieses Berichtes vom 8. bis 11. Mai 2006 in Berlin inhaltlich und organisatorisch vorbereitet und durchgeführt. Als Diskussionsgrundlage wurde zu dieser letzten Sitzung ein Rohentwurf des Berichtes erstellt. Aufbauend auf dem Ergebnis dieses Treffens wurde

ein nahezu kompletter State-of-the-Art-Report on Nuclear Aerosols (NARSOAR) erstellt und an die Mitglieder der mit seiner Erstellung befassten internationalen Expertengruppe zur Kommentierung verschickt. Eine vollständige, qualifizierte Entwurfsversion wurde letztendlich der OECD im April 2008 vorgelegt /ALL 08/.

Entsprechend der Empfehlung des Workshops in Köln verfolgt der Bericht drei Hauptzielsetzungen:

- das aktuelle Wissen aus Experimenten und Analytik zu nuklearen Aerosolen zusammenzufassen,
- einige Beispiele für Validierungsergebnisse und speziell für Anlagenrechnungen zu geben und dabei die Unsicherheiten aufzuzeigen,
- sowie noch weitgehend ungeklärte Aspekte mit Sicherheitsrelevanz zu identifizieren.

Das letzte Kapitel des Berichtes beschäftigt sich mit dem aktuellen Stand der Forschung zu den Themen, die auf dem Workshop in Köln als noch nicht ausreichend geklärt identifiziert worden waren. Trotz einigem Fortschritt auf diesen Gebieten, z. B. für die Durchströmung von Rohrbündeln im Falle eines Dampferzeugerheizrohrbruches oder für die Resuspension von Wänden als Folge von Wasserstoffverbrennungsvorgängen gibt es immer noch einige Unzulänglichkeiten im Wissensstand, z. B. für:

- Formfaktoren
- die mögliche Unterstützung der Analytik durch Einsatz von CFD-Methoden
- Phänomene und Prozesse im Primärkreislauf:
 - Resuspension
 - Rückhaltung von Aerosolen in der Sekundärseite des Dampferzeugers
 - Einfluss der Chemie
- Phänomene und Prozesse im Sicherheitsbehälter
 - Transport und Ablagerung von Mischaerosolen unter kondensierender Atmosphäre
 - Resuspension
 - Wiedereintrag (re-entrainment)
 - Rückhaltung in Wasservorlagen (pool scrubbing)

- Einfluss von passiven autokatalytischen Rekombinatoren (PAR)
- Freisetzung aus der Schmelze-Beton-Wechselwirkung
- Durchdringung von Leckpfaden
- Brandaerosole

OECD SOAR (State-of-the-Art Report) on Iodine Chemistry

Zum „State of the Art Report of Iodine Chemistry“ wurde das Kapitel zur Wechselwirkung des Iodverhaltens mit Thermohydraulik und Aerosolphysik verfasst /CLE 07/.

Beitrag zur GAMA "Working Group"

Die Sitzung der GAMA "Working Group" in Ottawa im zweiten Halbjahr 2005 wurde vorbereitet. U. a. wurden fünf Präsentationen zu containment-relevanten Fragestellungen erstellt. An der Sitzung in Ottawa wurde teilgenommen.

Begleitung von OECD-Vorhaben

Mit erheblichem Aufwand wurde an der inhaltlichen Erstellung eines Arbeitsprogramms für das im Januar 2007 gestartete OECD-THAI Projekt mitgewirkt.

Im April 2006 fand das erste Programme-Review-Group (PRG)-Treffen des OECD-MCCI-2 Projektes in Paris statt. An diesem Treffen wurde teilgenommen. Auf diesem Treffen des Nachfolgeprojektes zu OECD-MCCI wurde das Vorgängerprojekt inhaltlich abgeschlossen sowie der Rahmen des angelaufenen Projektes vorgestellt und diskutiert. Auf eine dringende Anfrage Japans hin wurde beschlossen CCI-4 mit erhöhtem Metallgehalt (typisch für SWR) und mit kalkreichem ("limestone common sand" = LCS) Beton zu fahren. Da das Erosionsverhalten in CCI-2 mit LCS-Beton bislang besser verstanden ist als dasjenige in den Experimenten mit silikatischem Beton (CCI-1, CCI-3), hatte man sich für CCI-4 auf die Verwendung von LCS-Beton einigen können. An der detaillierten Auslegung des Experimentes CCI-4 wurde in Zusammenarbeit mit anderen deutschen Forschungsstellen mitgewirkt.

Für das OECD-Projekt BIP (Behaviour of Iodine Project) wurden Testbedingungen für Adsorptions- und Bestrahlungsversuche bei AECL für deutsche Stahl- und Farbcoupons definiert, mit AREVA und Becker Technologies abgestimmt und in das Projekt eingebracht. Die Daten aus den Iod/Stahl-Versuchen sollen die in THAI gewonnenen

Ergebnisse absichern. Es werden auch Daten für die Rückreaktion von nicht-flüchtigem (FeI_2) zu flüchtigem Iod (I_2) erwartet.

8.2.2 Mitarbeit in der EU

8.2.2.1 Mitarbeit in CEG-SAM

Im Rahmen des von mehreren internationalen Staaten (Europäische Kommission, USA, Japan, Korea und seit kurzem Kanada) finanzierten "International Science and Technology Center" (ISTC) wird russischen Wissenschaftlern, die früher auf dem Gebiet der Waffentechnik tätig waren, die Möglichkeit geboten, ihr Wissen in den Dienst der friedlichen Nutzung der Kernenergie zu stellen. Die ISTC "Contact Expert Group on Severe Accident Management" ist ein von der Europäischen Kommission ins Leben gerufenes Gremium aus erfahrenen Wissenschaftlern auf dem Gebiet der schweren Störfälle, das zu den von den russischen Instituten gestellten Projektanträgen Empfehlungen im Hinblick auf eine Förderung durch die EU ausspricht. Dabei werden die Projektvorschläge speziell im Hinblick auf das Interesse der europäischen Forschergemeinschaft bewertet, was sich im Prinzip an den Forschungsprioritäten in SARNET spiegeln lässt.

Im Rahmen dieses Vorhabens ist an mehreren Treffen der Contact-Expert-Group on Severe Accident Management (CEG-SAM) mitgewirkt worden: Treffen-Nr. 8 in Moskau (September 2005), Nr. 9 in Paris (März 2006) und Nr. 12 in St. Petersburg (September 2007). Für das vorliegende Vorhaben sind folgende ISTC-Projekte/Projektvorschläge von Interesse:

- **CHESS-1 # 2916 (Nuclear Fuel Behaviour during Chernobyl Accident)**
Die generelle Zielsetzung dieses von 02/2005 bis 08/2007 laufenden Projektes war die Entwicklung von Modellen zur Beschreibung des Schmelzeverhaltens während des Tschernobyl-Unfalls. Die Modelle sollten den derzeitigen physikalischen und chemischen Zustand sowie die örtliche Verteilung der Schmelze und der radioaktiven Substanzen im zerstörten Reaktorblock erklären können. In einem ersten Teil des Projektes wurde eine Datenbasis zu allen vorgefundenen Stoffen mit Anteilen von Lava-ähnlicher Kernschmelze im Reaktorblock 4 erstellt. Alle verfügbaren Informationen zu geschmolzenem Kernbrennstoff und zum Zirkoniumgehalt im geschmolzenen Metall wurden zusammengetragen, ausgewertet und für die Modellie-

rung aufbereitet. Die Daten wurden aus Veröffentlichungen, Berichten, technischen Zeichnungen, Fotos und aus Filmmaterial abgeleitet. Es wurden mehr als 6000 Einträge in der Datenbasis erstellt. Die Datenbasis wurde in 4 Hauptteile untergliedert: 1) Brennstoff- und Strukturmaterialien von Reaktorblock 4 vor dem Unfall; 2) Zustand der verschiedenen Stoffe eine halbe Stunde nach dem Unfallbeginn (Beginn der Lava-Formierung); 3) Wärmequellen sowie physikalische und chemische Vorgänge während der Lava-Formierung; 4) Ausbreitung der Lava. Die Datenbasis soll eine Prognose der Lava-Formierung in Rechenprogrammen ermöglichen, allerdings wird die Schmelzezusammensetzung als sehr inhomogen bewertet. In dem zweiten Teil des Projektes wurde die große Datenbasis hinsichtlich der Lava-Formierung und der Ausbreitung systematisiert und es wurden Modelle für diese beiden Vorgänge während der ersten Tage nach dem Unfall entwickelt. In Fachkreisen sind erste Ergebnisse der russischen Datenauswertungen hinsichtlich des Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens (MCCI, Ausbreitung) diskutiert worden. Bei der Bewertung der Daten ist man sich allerdings einig, dass diese mit einer sehr großen Unsicherheit behaftet sind. Die innerhalb von CHESS vorgestellten Modellansätze sind noch nicht von unabhängiger Seite überprüft worden. Ob die Daten im Rahmen der Entwicklungsarbeiten zu COCOSYS/ASTEC genutzt werden hängt davon ab, ob gemeinsame Interpretationen der russischen Daten im geplanten Arbeitspaket „CORIUM“ in SARNET-2 erarbeitet werden können.

- EVAN # 3345 (Ex-Vessel Source Term Analysis)

Das in 2007 für ein Jahr laufende Projekt beinhaltet theoretische und experimentelle Forschung zu den Phänomenen der späten Freisetzung von Spaltprodukten in die Atmosphäre des Sicherheitsbehälters (SB). Diese Phase ist durch die Schmelzefreisetzung aus dem RDB in den SB charakterisiert. Das Vorhaben umfasste sieben Aufgabenstellungen: Aufgabe 1 beinhaltet die Analyse von Radioaktivitätsfreisetzungen in auslegungsüberschreitenden Störfällen (SLOCA und LLOCA). Hierbei sind die möglichen Spaltproduktfreisetzungs- und Transportmechanismen – auch anhand eines Anlagenfalls – untersucht worden. Aufgabe 2 beinhaltete Experimente zur Bestimmung von Spaltproduktfreisetzungsraten (SrO, BaO, La₂O₃, CeO₂, Ru und Mo) als Funktion der Schmelzetemperatur und des Oxidationsgrades. Aufgabe 3 beinhaltete die Entwicklung von Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichtsmodellen zur Beschreibung der Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze. Aufgabe 4 umfasste Experimente zur Bildung des flüssigen Aerosols AT 1, sowie zur Bildung und zum Mitriss des festen Aerosols AT 2 (Ammonium-Chlorid). Aufgabe 5 beinhaltete Voraus- und Nachrechnungen zur Bildung

und zum Transport von Aerosolen wie in den Versuchen der Aufgabe 4 beobachtet. Hier wurde ein Modell entwickelt, das zufriedenstellend mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmte. In Aufgabe 6 sind Experimente zur Bestrahlung von Medien in Edelmetallampullen sowie Experimente mit Medien in Fluoroplastik-Druckkammern, die nicht bestrahlt wurden, für die Beschreibung der Volatilität von Iod durchgeführt worden. Die Medien sind vor und nach dem Versuch untersucht worden. Aufgabe 7 beinhaltet die Entwicklung eines umfassenden Iodmoduls innerhalb eines Codes zu schweren Störfällen. Ein Computer-Code wurde entwickelt, Voraussrechnungen wurden durchgeführt, die Angemessenheit der mathematischen Modelle wurde demonstriert und der Code wurde anhand von Nachrechnungen zu den in EVAN durchgeführten Experimenten validiert. Auf die Bewertung der Ergebnisse aus dem EVAN-Projekt wird im Bericht zu der Validierung von COCOSYS/ASTEC (RS1170) eingegangen.

- CHESS-2 # 3702 (Long-Term Corium Behaviour)
Das geplante Nachfolgevorhaben zu CHESS beschäftigt sich mit den sehr langfristigen Prozessen nach dem Kernschmelzunfall in Tschernobyl (10 Tage... 100 Jahre) unter der speziellen Bedingung des Sarkophags. Diese Themenstellung ist für das vorliegende Vorhaben allerdings nur von begrenztem Interesse. Das Projekt ist von der CEG-SAM empfohlen worden, konnte aber bislang nicht finanziert werden, da bislang die Unterstützung vom Scientific Advisory Committee (ISTC/SAC) fehlte. Aufgrund der derzeitigen Beschränkung der Mittel für ISTC-Projekte wird die Finanzierung bis auf weiteres zurückgestellt.
- Large-Scale Installation for Heating and Retention of Corium (Phase 1), # 3831
Dieses Projekt dient zur Vorbereitung eines großmaßstäblichen Versuches (mit ca. 1200 kg Schmelze) zur 2D-Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Die vorgeschlagene alternative Beheizungstechnik sieht vor, dass die Schmelze durch periodischen Einwurf von Zirkonium in die Schmelze aufgrund der damit frei gesetzten Reaktionsenergie von innen beheizt wird. Dieses Vorhaben wird wegen seiner engen Verknüpfung zu Fragestellungen in SARNET (2D-MCCI) von der CEG-SAM hoch eingestuft und ist auch für die Entwicklung von COCOSYS/ASTEC von großem Interesse. Bevor der Großversuch aber insgesamt bewilligt werden kann, soll zunächst die Machbarkeit der Beheizungstechnik in einem kleineren Versuch (medium-scale, ~ 100 kg Schmelze ohne UO₂) demonstriert werden. Es wurde von CEA vorgeschlagen, in dem Vorversuch zur Demonstration der Machbarkeit einen LCS-Beton zu verwenden, bei dem das erwartete Ergebnis der Erosion einen isotropen

Charakter hat. Die Phase 1 des Projektes ist für 6 Monate bewilligt und läuft von August 2009 - Januar 2010.

8.2.2.2 SARNET - Forschungsaktivitäten

Im Rahmen der Mitarbeit in SARNET hat die GRS innerhalb dieses Vorhabens zu folgenden SARNET-Arbeitspaketen beigetragen:

- WP 2: USTIA (ASTEC User Support and Training, Integration and Adaptation)
 - Vorbereitung und Teilnahme an drei User-Workshops zu ASTEC (2005 in Köln, 2006 und 2008 in Aix-en-Provence)
 - Vorbereitung und Teilnahme an einem Training Course für ASTEC
 - Vorbereitung und Durchführung eines Seminars zu ATLAS
- WP 7: SARP (Definition von "Severe Accidents Research Rriorities"), s. u.
- WP 11 EXCORE (Ex-Vessel Corium Recovery)
 - Gemeinsame Interpretationen zu aktuellen MCCI-Versuchen (z. B. OECD-MCCI) mit EU-Partnern, Identifikation von Entwicklungsbedarf, Überprüfen von ersten Modellansätzen im Rahmen der Entwicklung
 - Diskussion zu möglichen vereinfachten Ansätzen für die Simulation der Schmelzeausbreitung in ASTEC (siehe auch Abschnitt 7.2.5)
- WP 13-2: DCH (Direct Containment Heating)
 - Vergleiche und Bewertung von 'lumped parameter'-Rechencodes zu DCH
 - Blinde Rechnungen für Experimente mit COCOSYS (siehe auch Abschnitt 7.2.4)
- WP 16: CONTCHEM (Containment chemistry impact on source term)
 - Nachrechnung und Interpretation des THAI-Versuchs Iod-9 zusammen mit einem Codevergleich Eine Zusammenfassung der Ergebnisse ist in /DIC 08/ veröffentlicht und ein umfassendes Papier ist in Vorbereitung /WEB 08/.
- WP 18 (Book on severe accident phenomenology)
 - Beteiligung an der Erstellung von Fachbeiträgen (z. B. zum Kapitel "Analytische Modelle zur Schmelzeausbreitung")

Die Beiträge zu diesen Arbeitspunkten umfassen neben den fachlichen Arbeiten zur Durchführung von Rechnungen etc. auch die Teilnahme an den entsprechenden Gruppen-/Gesamttreffen mit eigenen Präsentationen der Ergebnisse, sowie der Dokumentation dieser in den Fortschritts- bzw. Abschlussberichten.

Severe Accident Research Priorities (SARP)

Ermittlung der Forschungsprioritäten für schwere Störfälle im EU-Rahmen

Im Rahmen des 6. EU-Rahmenprogramms wurde das Severe Accident Research Network of Excellence (SARNET) gefördert. Dieses Projekt sollte die Nutzung der Ressourcen auf dem Gebiet der schweren Störfälle optimieren. 52 Teilnehmer aus 19 Ländern, Länder der EU sowie Schweiz und Kanada arbeiteten zusammen, um die wissenschaftlichen Erkenntnisse zu verbessern, gemeinsame Forschungsvorhaben zu definieren und durchzuführen, die Nachhaltigkeit der Ergebnisse zu sichern und die Informationen zu verbreiten. Um dieses Ziel zu erreichen, gab es eine Reihe von 'work programmes (WP)', von denen eines sich mit der Neubewertung der Prioritäten von Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der schweren Störfälle befasste. Dieses Arbeitspaket hatte zum Ziel, die Prioritäten von offenen Problemkreisen neu zu bewerten und Vorschläge für eine Harmonisierung, ggf. Umorientierung oder Neuformulierung von Untersuchungsprogrammen zu machen und eventuell Problemkreise – falls möglich – als ausreichend bearbeitet und geklärt einzustufen. Mit dieser Arbeit sollte dem Governing Board von SARNET eine Richtlinie zur Verfügung stehen, eine Orientierung für die Ausrichtung der gemeinsamen Forschungsaktivitäten in SARNET zu geben. Bei den Arbeiten sollten die Ergebnisse des EU-Projektes EURSAFE zu Rangeinstufungen von Phänomenen bei schweren Störfällen (PIRT – Phenomena Identification and Ranking Table), die Ergebnisse der Qualifizierungsarbeiten für ASTEC, von Reaktoranalysen im Rahmen anderer Aktivitäten und der Forschung im Bereich der drei Themenschwerpunkte in SARNET mit einfließen. Ergebnisse aus anderen internationalen Projekten und von PSA-Level-2-Arbeiten sollten ebenso berücksichtigt werden. Bei den Kriterien für die Bewertungen sollten Überlegungen, wie sie von den Arbeitsgruppen der OECD CSNI vorgeschlagen wurden – wie im Folgenden beschrieben – mit herangezogen werden:

- die sicherheitstechnische Relevanz
- die Signifikanz der Risiken von Phänomenen/physikalischen Prozesses (wenn Risikobewertung sinnvoll und/oder angemessen ist)

- das Vermögen, ein Sicherheitsproblem umfassend zu benennen
- das Potential für substanzielle Verbesserungen bei Accident Management (AM) und AM-Maßnahmen
- die Wahrscheinlichkeit, dass Forschung zu einem Thema schlüssige Ergebnisse liefern wird
- das Maß, in dem es den Anlagenbetrieb beeinflussen kann
- wie viele Anlagen von dem Problem betroffen sind
- die strategische Bedeutung, die das Thema für den Erhalt von Kompetenz und Infrastruktur hat
- Kosten und Dauer des Forschungsvorhabens
- und die Bewertungsmethoden, wie sie bei EURSAFE angewendet wurden

Das SARP-Arbeitspaket wurde von GRS geleitet. 8 Partner, bestehend aus Vertretern von europäischen Technical Safety Organisations (TSO) sowie von Industrie und Betreibern (IRSN, CEA, EdF aus Frankreich, FZK, GRS aus Deutschland, Universität Stockholm, Technische Universität Sofia und VTT aus Finnland) arbeiteten zusammen. Mitglieder des SARNET Advisory Committee und andere Endnutzer der Forschungsergebnisse wurden befragt. Die Leiter der SARNET-Themenschwerpunkte lieferten wertvolle technische Beiträge zu den Diskussionen.

Ausgangspunkt waren die im EURSAFE-Rahmen erarbeiteten Forschungsprobleme. Diese Probleme wurden neu bewertet und die Prioritäten auf der Basis der neuesten Forschungserkenntnisse und von PSA-Level-2 Ergebnissen für verschiedene Reaktoranlagen neu geordnet. Die Themen wurden erneut unter dem Aspekt Risiko-Signifikanz im Sinne des Einflusses auf die Spaltproduktfreisetzung bei Unfällen in die Umgebung und unter Einbeziehung von PSA-Ergebnissen diskutiert. Da PSA-Level-2-Ergebnisse anlagenspezifisch sind, war eine einheitliche Bewertung aus Sicht der PSA oft nicht möglich. In diesen Fällen wurde die Neubewertung hauptsächlich unter dem Aspekt Risiko-Signifikanz vorgenommen. Ein Verfahren mit einem Bewertungsbogen für die verschiedenen Themen und mit Kommentierungsstufen durch die verschiedenen SARNET-Gremien wurde entwickelt. Die Nutzung dieser intensiven Kommentierungs- und Feedback-Prozedur stellte sich im weiteren Projektverlauf als nicht prakti-

kabel heraus. Es wurde dann nur eine einfache Kommentierung durch das Management Team und das Advisory Committee von SARNET vorgenommen.

Auf der SARP-Sitzung im Februar 2006 wurden 7 neue oder neu zu beurteilende Themen benannt und diskutiert. Diese waren

- die Untersuchung von Hüllrohrmaterial von Hochabbrandbrennstäben bei hohen Temperaturen und bei Wiederauffüllvorgängen
- die Ausbreitung von Corium in einen benachbarten Containmentraum, der evtl. mit Wasser gefüllt ist
- die Auswirkung von Wasserstoffgegenmaßnahmen (insbesondere autokatalytische Rekombinatoren) auf die Wasserstoffverteilung
- die Verbrennung bei Wasserstoffjets in der SB- Atmosphäre bei unterschiedlichen H₂-Konzentrationen (in Verbindung mit DCH-Vorgängen)
- die Rückhaltung von Aerosolen im Reaktorkühlkreislauf, Dampferzeuger oder Rissen im Beton unter Berücksichtigung von Resuspension
- der Zerfall von Iodiden durch Aufheizung in katalytischen Rekombinatoren und ihr Einfluss auf den Quellterm
- die Flüchtigkeit von Ruthenium und sein Verhalten im Containment

Nur für die Themen „Zerfall von Iodiden in Rekombinatoren“ und „Verhalten von Ruthenium“ wurden zusätzliche Versuche und Berechnungen vorgeschlagen. Die anderen Themen konnten durch Erweiterung bestehender Arbeitspakete berücksichtigt werden.

Die Neubewertung der Prioritäten der 21 EURSAFE-Research-Items (ERI) (Tab. 8-1) wurde von der gesamten SARP-Gruppe mit Unterstützung durch technische Beiträge von den Leitern der SARNET-Themenschwerpunkte eingehend auf der SARP-Sitzung Februar 2005 diskutiert, weiter per Mailaustausch und über ein elektronisches Diskussionsforum diskutiert und bei der nächsten SARP-Sitzung im September 2007 abschließend erörtert. Zentraler Ausgangspunkt bei der Diskussion war die Risiko-Signifikanz der einzelnen Probleme („issues“) im Hinblick auf die Spaltproduktfreisetzung in die Umgebung (Quelltermrelevanz).

Tab. 8-1 EURSAFE Research Issue and Rationale for Selection

ERI	Issue for needed Research 1)	Rationale for selection 1)	Rev. Priority	Expected benefit 2)	Work to be performed and associated schedule 2)
1,1	Hydrogen generation during reflooding or melt relocation into water	Rapid generation of hydrogen which may not be accommodated by recombiners and the risk of early containment failure. Improve knowledge about the magnitude of hydrogen generation.	M	Optimisation of the implementation of the hydrogen mitigation measures such as PAR	
1,2	Core coolability during reflooding and thermal-hydraulics within particulate debris	Termination of the accident by re-flooding of the core not yet totally degraded while maintaining RCS integrity. Increase predictability of core cooling during re-flooding.	H	Improve the predictability of codes for a better assessment of AM measure reflooding, possible reduction of frequency in PSA	activities to better understand cooling mechanisms and on concepts to stop melt progression
1,3a	Corium coolability in lower head	Improve predictability of the thermal loading on RPV lower head to maintain its integrity.	M	Improve the predictability of codes for a better assessment of the risk of RPV lower head failure;	
1,3b	Corium coolability in external corium catcher	Improve predictability of the thermal loading on core catcher devices to maintain their integrity.	L		
1,4	Integrity of RPV due to external vessel cooling	Improve data base for critical heat flux and external cooling conditions to evaluate and design AM strategies of external vessel cooling for in-vessel melt retention. Dep. on local conditions in the plants	M	For reactors with higher power density like large PWR of lower interest; For BWR design investigate the specific external cooling conditions at lower head, strong influence on BWR vessel failure; for low power reactors like VVER440 already solved	

1,5	Integrity of RCS	Improve predictability of heat distribution in the RCS to quantify the risk of RCS failure and possible containment bypass (SGTs).	CL		
1,6	Corium release following vessel failure	Improve predictability of mode and location of RPV failure to characterise the corium release into the containment.	L		
2,1 2,2	MCCI: molten pool configuration and concrete ablation	Improve predictability of axial versus radial ablation up to late phase MCCI to determine basemat failure time and loss of containment integrity.	H	Large uncertainties, possible reduction of conservatism for basemat penetration time in PSA,	Clarification of axial/radial ablation and long term erosion by experiments, adjustment of codes for transfer to plant conditions
	Ex-Vessel corium coolability, top flooding	Increase the knowledge of cooling mechanisms by top flooding the corium pool to demonstrate termination of accident progression and maintenance of containment integrity.		Cooling mechanism could stop basemat penetration and avoid containment failure	Investigate top-flooding cooling mechanisms
2,3 2,4	Ex-Vessel corium catcher: corium ceramics interaction and properties	Demonstrate the efficiency of specific corium catcher designs by improving the predictability of the corium interaction with corium catcher materials.	CL		
	Ex-Vessel corium catcher: coolability and water bottom injection	Demonstrate the efficiency of water bottom injection to cool corium pool and its impact on containment pressurisation.			
3,1 3,2	Melt relocation into water and particulate formation	Determine characteristics of jet fragmentation, debris bed formation and debris coolability towards maintenance of vessel and respectively containment integrity.	H	Reduce the uncertainties about in-vessel cooling as starting condition for an ex-vessel FCI, acceptable level for risk assessment of containment damage	Data from SERENA 2 (4 years program with experimental and analytical parts) expected to be used for ex-vessel FCI

	FCI incl. steam explosion: melt into water, ex-vessel	Increase the knowledge of parameters affecting steam explosion energetic during corium relocation into water and determine the risk of containment failure.		Reduce the uncertainties to an acceptable level for the risk assessment of containment failure, from SERENA 1 fair consensus that further investigation for in-vessel FCI is not a priority	
3,3	FCI incl. steam explosion in weakened vessel	Investigate the risk of weakened vessel failure during reflooding of a molten pool in the lower head.	CL		
3,4	Containment atmosphere mixing and hydrogen combustion / detonation	Identify the risk of early containment failure due to hydrogen accumulation leading to deflagration / detonation and to identify counter-measures.	H	Reduction of uncertainty concerning risk of DDT by flame acceleration; Optimisation of the implementation of hydrogen mitigation measures such as PAR	Improve predictability of the codes for H2 combustion, experimental investigation: scaling effect for accelerated flames, ignitions by recombiners, influence of recombination rate
3,5	Dynamic and static behaviour of containment, crack formation and leakage at penetrations	Estimate the leakage of fission products to the environment.	L		
4,1	Direct containment heating	Increase the knowledge of parameters affecting the pressure build-up due to DCH and determine the risk of containment failure.	M	Reduce the uncertainties to an acceptable level for the risk assessment of containment failure	
5,1	Oxidising environment impact on source term	Quantify the source term, in particular for Ru, under oxidation conditions / air ingress for HBU and MOX.	H	Include air ingress in source term and PSA	Small-scale experiments and modelling, validated models for safety studies expected in 2010
5,3	Aerosol behaviour impact	Quantify the source term for aerosol retention in the sec-	L		

	on source term	ondary side of steam generator and leakage through cracks in the containment wall as well as the source into the containment due to re-volatilisation in RCS.			
5,2 5,4	RCS high temperature chemistry impact on source term Containment chemistry impact on source term	Improve predictability of iodine/Ru species exiting RCS to provide the best estimate of the source into the containment. Improve the predictability of iodine chemistry in the containment to reduce the uncertainty in iodine source term.	H	Possible reduction of conservatism in source term assessment used for emergency preparedness	Small-scale experiments and modelling, validated models for safety studies expected in 2010
5,5	Core re-flooding impact on source term	Characterise and quantify the FP release during core re-flooding.	L		

1) from EURSAFE PIRT

2) from SARNET SARP

3) H stands for high research priority

M stands for medium priority, programs to be continued as planned or at reduced effort

L stands for low priority/second priority, no further new activities in SARNET frame, but continued in other research programs outside SARNET

CL stands for 'issue could be closed'. From point of risk significance and state of knowledge no further experimental program needed

Als Ergebnis der Diskussion wurden 6 Themen als mit **hoher Priorität** zu untersuchen eingestuft:

- Wiederflutung und Kühlbarkeit eines noch nicht völlig zerstörten Kerns (Debriskühlung) (ERI 1,2)
- Gemeinsame Untersuchung der Probleme bei der Schmelze-Beton-Wechselwirkung: Schmelzepoolkonfiguration, Langzeiterosion und Ex-Vessel-Kühlbarkeit und Kühlung mit Wasserüberdeckung (ERI 2,1/2,2)
- Gemeinsame Untersuchung der Ex-Vessel-Schmelzeverlagerung in Wasser hinein und die Ex-Vessel- Wechselwirkung zwischen Corium und Wasser (FCI) (ERI 3,1/3,2)
- Wasserstoffdurchmischung und Verbrennung im Containment (insbesondere Flammenbeschleunigung, Zündung durch Rekombinatoren und Modelle zur H₂-Verbrennung (CFD)) (ERI 3,4)
- Auswirkungen der Ruthenium-Oxidation sowie von Lufteinbruch in den Primärkreis auf HBU- und MOX-Brennstäbe (ERI 5,1)
- Gemeinsame Untersuchung der Iodchemie im Reaktorkühlkreislauf und im Containment) (ERI 5,2/5,4)

Weitere 4 Themen wurden mit **mittlerer Priorität** eingestuft:

- Wasserstoffentstehung bei Wiederfluten des teilzerstörten Kerns (Absicherung der analytischen Modelle und Eingrenzung der Unsicherheitsbandbreite, keine zusätzlichen Versuche) (ERI 1,1)
- Corium-Kühlbarkeit im unteren Plenum (ERI 1,3a)
- RDB-Integrität bei externer Kühlung (ERI 1,4)
- Schmelzepartikelaustrag aus dem RDB unter Druck (DCH, Druck bis etwa 20 bar) (ERI 4,1)

Bei 5 Themen wurde der derzeitige Stand des Wissens unter dem Aspekt Stand und Fortschritt des Wissens, Risiko- und Sicherheitsrelevanz und weiterführende Untersuchungen in Vorhaben außerhalb von SARNET als ausreichend eingeschätzt und als Themen mit **niedriger Priorität** eingestuft, d. h. die laufenden Untersuchungen sollten

noch zu Ende geführt und die Themen danach abgeschlossen werden. Diese Themen sind:

- Corium-Kühlbarkeit im Kernfänger mit externer Kühlung (ERI 1,3b)
- Corium-Ausströmen nach RDB-Versagen (ERI 1,6)
- Riss- und Leckagebildung in Betoncontainments (ERI 3,5)
- Aerosolverhalten und sein Einfluss auf den Quellterm (Rückhaltung in Dampferzeugerheizrohren und in Betonrissen des Sicherheitsbehälters)

3 Themen wurden als ausreichend behandelt und beendbar eingestuft vor dem Hintergrund ihrer Risiko-Signifikanz und des derzeitigen Wissensstandes, sowie unter Berücksichtigung, dass andere Themen eine größere Risikorelevanz und größere Unsicherheiten besitzen. Diese Themen sind:

- Integrität des Reaktorkühlkreislaufes bei hohen Temperaturen und die Temperaturverteilung im Kreislauf (ERI 1,5)
- Ex-Vessel-Kernfänger, Corium-Keramik-Wechselwirkung und Ex-Vessel-Schmelzekühlung mit Wassereinspeisung von unten (ERI 2,3/2,4)
- Corium-Kühlmittel-Wechselwirkung (FCI) einschließlich Dampfexplosion in einem geschwächten RDB (ERI 3,3)

Eine kurze Begründung für die Einstufungen ist im Vortrag zur ERMSAR-Konferenz 2008, Bulgarien /SCW 08/ gegeben. Detailliertere Ausführungen sind im SARNET-Bericht D96 enthalten /SCW 08a/.

Für die Themenschwerpunkte Corium, Containment und Source Term im weiterführenden Network of Excellence (SARNET2) wurden unter Berücksichtigung der neuen Prioritäten folgende Prozesse zur weiteren Untersuchung vorgeschlagen:

Auf dem Gebiet der Kühlbarkeit von Corium:

- Wiederfluten und Kühlbarkeit eines nicht vollständig zerstörten Kerns mit der Berücksichtigung mehrdimensionaler Effekte
- Wiederaufschmelzen von Debris, Schmelzpoolbildung und Kühlbarkeit
- Bildung von Ex-Vessel Debrisbett und seine Kühlbarkeit
- Einbringung der Ergebnisse in die Reaktoranwendung

Auf dem Gebiet der Schmelze-Beton-Wechselwirkung:

- Effekt der Betonzusammensetzung/Eigenschaften auf die Ausbildung der axialen und radialen Erosionsprofile
- Einfluss der Metallschicht auf die Schmelze-Beton-Wechselwirkung
- Wirksamkeit von Wasserkühlung von oben auf die Betonerosion
- Übertragung der Forschungsergebnisse auf Anlagenverhältnisse

Auf dem Gebiet Containment:

- die rechnerische Simulation von Stratifikation/Destratifikation von Wasserstoff durch Sprühsystem und Rekombinatoren in CFD- und LP-Rechenprogrammen
- verschiedene Einflüsse auf die Flammenbeschleunigung wie z. B. durch Wassertropfen etc.
- Corium-Kühlmittel-Wechselwirkung mit Untersuchung von Charakteristika der Jet-Fragmentierung, der Debrisbettbildung und Kühlbarkeit und Verbesserung der Kenntnisse über die Einflussparameter auf eine Dampfexplosion; hierbei auch die Verbesserung der Rechenmodelle zur Simulation
- Weiterführung von DCH-Versuchen zur KONVOI-Geometrie auch mit dem Ziel, die Simulation mit Rechenmodellen (3D und LP) zu verbessern.

Auf dem Gebiet des Quellterms:

- Ruthenium Oxidation und ihr Einfluss auf den Quellterm
- Lufteinbruch in den RDB und ihr Einfluss auf HBU- oder MOX-Brennstäbe
- die Übertragung der experimentellen Erkenntnisse und ihre Berücksichtigung in den validierten Modellen von ASTEC, so dass die Ergebnisse in die Anlagenuntersuchungen mit einfließen.

8.2.2.3 Beteiligung an PHÉBUS-FP

Sowohl von ASTEC-TRG als auch von der SARNET-Arbeitsgruppe SARNET-PHYMA wurden Aktionen definiert, die einen Vergleich der Iodmodelle IODE und AIM anhand des Phebus-Versuchs FPT1 zum Inhalt haben. Die Studie ist im Rahmen des

COCOSYS-ASTEC-Validierungsvorhabens RS1170 durchgeführt worden und wird dort ausführlich dokumentiert. Die Ergebnisse der Studie wurden auf dem Phebus-FP CCIC Meeting vorgestellt /WEB 08a/.

8.3 Aktualisierung von "Pre- und "Post Processing" für COCOSYS sowie der Online-Dokumentation

8.3.1 Pflege Pre- und Post processing für COCOSYS

Im Folgenden werden die durchgeführten Arbeiten zur Pflege des Pre- und Post-processings für COCOSYS kurz beschrieben:

- **COCPLOT** (zur Darstellung von COCOSYS Ergebnissen)
 - Implementierung einer Schnittstelle zur Methode basierend auf schnellen Fourier-Transformationen zum Vergleich von mehreren Rechenergebnissen mit dem Experiment (wird für Regressionstesten verwendet)
 - Ergänzung von COCOSYS zur Darstellung von Temperaturprofilen in Wandstrukturen
 - Ergänzung von COCPLOT zum Einlesen von ATHLET-CD-Daten
 - Implementierung der Potenzierungs-Funktion ($y' = y^p$)
 - Implementierung einer Funktion zur Interpolation von Kurven
 - Implementierung einer MIN-und MAX-Funktion
 - Implementierung der INFO-Option zum Übertrag des Datums und der verwendeten COCOSYS-Version auf die erzeugten Bilder
 - Erweiterung der Farboptionen
- **COCGRID**

Mit dem Gittergenerator GRIDGEN[®] können generische 3D-Gitter erzeugt werden. Mit dem Interfaceprogramm COCGRID kann dann aus diesem generischen Gitter ein COCOSYS-Datensatz erstellt werden. Dieser enthält die Eingabedaten für Zonen, Verbindungen und Strukturen. Im Rahmen des Vorhabens wurden einige Ergänzungen vorgenommen. So ist nun unter anderem die Vorgabe von "porösen" Wandstrukturen möglich (z. B. für die Simulation von Lochblechen). Weiterhin werden auch die Zonendaten für das AFP-Hauptmodul (Aerosolablagerungsflächen)

berechnet. Diese Ergänzung wurde insbesondere im Hinblick auf die Modellierung des Rußtransports notwendig.

8.3.2 Aktualisierung des COCOSYS-Manuals

Im Laufe des COCOSYS-Entwicklungsvorhabens wurde die Konzeption der COCOSYS Manuals vollständig überarbeitet. Für die bisherigen Manuals der COCOSYS Version V1.2 wurde das Programm Interleaf[®] verwendet. Das Programm ist zwar sehr gut für die systematische Dokumentation geeignet, hat aber den Nachteil, dass nur wenige Mitarbeiter dieses Programm handhaben können. Daher wurde mit der Umstellung der Dokumentation auf Microsoft Word begonnen. Weiterhin wurde die Gliederung des COCOSYS-Benutzerhandbuchs komplett überarbeitet. Wesentliche Merkmale der neuen Gliederung sind:

- Modellbeschreibung und Eingabe-/Ausgabebeschreibung wurden zusammengefasst
- Die Themen werden nicht mehr nach Kontrollwörtern sortiert, sondern sind nun problemspezifisch sortiert. Nach einer Kurzbeschreibung des Gesamtsystems und der Entwicklungshistorie der letzten COCOSYS-Versionen wird die Handhabung erläutert. Dann werden die grundlegenden thermohydraulischen Modelle beschrieben. Danach erfolgt die Beschreibung aller sicherheitsrelevanten Systeme und es folgt die Beschreibung spezifischer Fragestellungen wie Wasserstoffverbrennung, DCH, Brandsimulation und so weiter. Weiterhin werden die Themen der anderen Hauptmodule beschrieben. Der Vorteil dieser Gliederung besteht darin, dass die Eingabedaten zu bestimmten Fragestellungen geschlossen dargestellt werden.
- Als Ergänzung zum COCOSYS-Benutzerhandbuch wird eine klassische Eingabebeschreibung erstellt. Diese orientiert sich an der gesamten Eingabestruktur. Dieses Dokument ist zum Nachschlagen von bestimmten Eingabeparametern gedacht.
- Die Umstellung des Referenz-Handbuches ist noch nicht vollständig erfolgt. Zurzeit sind im Wesentlichen die neuen Modelle beschrieben.

8.4 Herausgabe einer neuen COCOSYS-Version

Innerhalb der Laufzeit des Projektes wurde die Version COCOSYS V2.3 freigegeben. Die Version V2.4 steht kurz vor der Fertigstellung. Allerdings sind noch einige Ergänzungen zum pH-Wertmodell und zum Wärmeübergangmodell notwendig, so dass sich die Freigabe verzögerte. Weiterhin sind noch Unterschiede in den Resultaten zum HDR Versuch E11.4 zu klären, welche beim Regressionstesten /ARN 08b/ aufgetreten sind.

8.5 Qualitätssicherung

Die festgelegten QS-Maßnahmen /LAN 96/ werden bei der Weiterentwicklung von COCOSYS angewandt. Insbesondere erfolgt die Versionsverwaltung von COCOSYS weiterhin entsprechend dem festgelegten Konfigurationsmanagement. Für die Anwenderversionen von COCOSYS wird ein Änderungsmanagement durchgeführt.

Das QS-Handbuch wurde zu Beginn der COCOSYS-Entwicklung erstellt mit dem Ziel, schon zu Anfang der COCOSYS-Entwicklung entsprechende QS-Maßnahmen durchzuführen. Aufgrund der in der Praxis gewonnenen Erfahrungen und organisatorischer Umstellungen ist es aber nun notwendig, das QS-Handbuch zu aktualisieren.

Wesentlicher Kernpunkt der QS-Maßnahmen ist das Konfigurations- und Änderungsmanagement. Die dazu durchgeführten Arbeiten sind im folgenden Kapitel beschrieben.

8.5.1 Konfigurations-/Änderungsmanagement

Wie im vorherigen Vorhaben wurde das Konfigurationsmanagement (Versionsverwaltung) von COCOSYS mit dem Werkzeug CVS /CED 92/ weiter durchgeführt. Es wird dabei strikt darauf geachtet, dass nur ein sogenannter Head-Branch für die Entwicklerversion verwendet wird und ein Branch für die Anwenderversion installiert wird. Dies vereinfacht den Übertrag der in der Anwenderversion entdeckten und korrigierten Fehler auf die Entwicklerversion erheblich. Die aktuellen Kennzeichnungen (Stand September 2008) sind zurzeit für die Entwicklerversion V2.4dev und für die Anwenderversion V2.3v20. Die Bezeichnung "v20" indiziert den Patch. Bei der Implementierung von Korrekturen bzw. kleinen Änderungen in der Anwenderversion wird immer das gesamte Programmsystem „eingefroren“ und an die Anwender verteilt. Die Informationen be-

zöglich Patches und neuer COCOSYS Versionen werden über die ASTRID/COCOSYS-Website an die Anwender verteilt. Sofern der Informationsbedarf an die Anwender dringend ist (z. B. bei gravierenden Fehlern) ist es möglich, beim Publizieren neuer Websites die Anwender aktiv per E-Mail zu informieren. Somit sind die Anwender nicht gezwungen, aktiv nach neuen Inhalten auf der ASTRID/COCOSYS-Website zu suchen.

Änderungen in der COCOSYS-Anwenderversion werden systematisch in einer Fehlerliste dokumentiert. Hier hat der Anwender die Möglichkeit, sich über den Stand der Fehlerbehebung zu informieren.

COCOSYS V2.3v19

Id	Status	Date	Member	Machine	Routine(s)	Comment/Solution
						–

COCOSYS V2.3v19

Id	Status	Date	Member	Machine	Routine(s)	Comment/Solution
V2.v19-001		24.09.2008	K.-G. Petzold (AREVA)	PC (WinXP)	Aewash.f, afp_evap_mod.f, afpaestr.f, fhzvint.f	– Correct re-entrainment in case of inner AFP time steps.

COCOSYS V2.3v18

Id	Status	Date	Member	Machine	Routine(s)	Comment/Solution
V2.v18-001		02.09.2008	K.-G. Petzold (AREVA)	PC (WinXP)	yglobal_interface.f, ithyint_mod.f, iafpint_mod.f, crspray.f, zsprini.f ,vder3_spray.f, spray3.f, spray4.f, thy_int.f, hspray.f, zjin.f, zpout.f, crjunc.f, rijun.f, zwevp.f, hvint.f, ithyint_m.f, zvint.f, afpjdstr.f, afpjdspay.f, aewash.f, fhzvint.f, cafpjunc.f, iafpint_m.f, afpijun.f, afp_evap_mod.f, afpaestr.f, afpjdspay.f, fhiele.f,	– Extension of COCOSYS to consider re-entrainment of aerosols, fission products and iodine species due to spontaneous evaporating water

Id	Status	Date	Member	Machine	Routine(s)	Comment/Solution
					fh_fis_int.f, fhder1.f, fh_fis.f, mfhele.f, afpaecalc.f, afpaout.f, afpaeinit.f, afpimod.f, cafpspray.f	

COCOSYS V2.3v17

Id	Status	Date	Member	Machine	Routine(s)	Comment/Solution
V2.3v17-001	V2.3v18	05.05.2008	L. Kubisova (UJD)	PC (WinXP)	user_interface_mod.f	– Using default output format lead to a program error. Work-around: Define this input CFUDATA always.
V2.3v17-002	V2.3v18	05.05.2008	O. Hongisto (FORTUM)	PC (WinXP)	iccini1.f, iccijin.f, iccd1.f, riicc.f, iccini.f, crinj.f, cricc.f, cooler.f, vder3.f, rserv.f, riinj.f	- Incorrect IC_CIRCUIT temperature in case of HXX (wrong initialisation of heat injection) - Wrong print/plot output of QSICC and QPICC (zero in case of HXX, but correctly used in iccd1.f)
V2.3v17-003	V2.3v18	26.05.2008	K. Fischer / S. Schwarz	PC (WinXP)	mpfh2.f	- avoid possible division by zero in case of PTOT = PD

Abb. 8-6 Ausschnitt aus der COCOSYS-Fehlerliste

8.5.2 Aktualisierung von QS-Vorschriften

Zur Überprüfung der QS-Vorschriften werden zuerst der Änderungsbedarf und die zurzeit existierenden Probleme identifiziert. Die einzelnen Themen spiegeln sich anhand des verwendeten QS-Handbuchs. Weiterhin wird bei Bedarf Bezug zum aktuellen QS-Handbuch /DOR 07b/ für ASTEC, welches in Zusammenarbeit mit IRSN und GRS entwickelt wird, genommen.

8.5.2.1 Identifizierung des Änderungsbedarfs

Qualitätsziele

In /LAN 96/ werden zunächst die Qualitätsziele festgelegt. Die angestrebten Qualitätsziele sind zusammengefasst:

- Erzielung realitätsnaher Ergebnisse
- Absicherung der Modelle und ihres Zusammenwirkens
- Ausgewogenheit der Einzelmodelle hinsichtlich ihrer Tiefe (Detaillierungsgrad der Modelle)
- großer Gültigkeitsbereich
- stabiles Verhalten (Robustheit des Gesamtsystems)
- übersichtliche, änderungs- und erweiterungsfreundliche Programmierung
- Portabilität auf andere Rechnerplattformen
- übersichtliche und vollständige Dokumentation des aktuellen Standes

Vertretbare Rechenzeiten werden zwar angestrebt, sind aber nicht ein Qualitätsziel.

Die Qualität der Rechenergebnisse zu beurteilen, ist für Programme wie COCOSYS relativ schwierig, da die quantitativen Anforderungen (z. B. relative Abweichung zwischen Rechenergebnis und Messung) sehr unterschiedlich sein können. So sind die Abweichungen bei berechneten Atmosphärentemperaturen bei Brandrechnungen vergleichsweise immer höher und daher der Anspruch an Rechengenauigkeit geringer. Da

COCOSYS zu der Gruppe der 'best estimate'-Codes gehört, ist aber eine möglichst realitätsnahe Simulation der relevanten Phänomene anzustreben. In Zukunft werden in der Benchmarkgruppe im Rahmen des OECD-PRISME-Projekts unterschiedliche Verfahren zur Messung der Abweichungen zwischen Rechnung und Messung angewendet. Diese können auch im Rahmen des Regressionstestens für COCOSYS von Interesse sein. Aufgrund der doch relativ akzeptablen Rechenzeiten ist auch die Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen zur quantitativen Bestimmung von Unsicherheiten sinnvoll. Wegen der oben genannten Schwierigkeiten zur quantitativen Beschreibung von Qualität gewinnen im Vergleich zu anderen Entwicklungsprojekten von Softwareprogrammen die Verifikation und vor allem die Validierung des Programms erheblich an Bedeutung. Für COCOSYS gibt es daher neben dem Entwicklungsprojekt ein paralleles Validierungsvorhaben (aktuell RS1190).

Insgesamt sind daher die im QS-Handbuch genannten Qualitätsziele weiterhin gültig.

Personelle Organisation

Laut QS-Handbuch /LAN 96/ lassen sich die Arbeitsgebiete in Projektleitung, Softwareerstellung, Verifikation & Validierung, Konfigurationsmanagement, Qualitätssicherung und Dokumentation charakterisieren. Soweit möglich sollten in großen Programmprojekten diese Rollen mit verschiedenen Personen besetzt werden.

Betrachtet man nur die Arbeiten für COCOSYS, so ist festzustellen, dass die Anzahl der Personen sich im Laufe der Zeit reduziert hat. Insgesamt sind zurzeit nur 6 Mitarbeiter in den Projekten zur COCOSYS-Entwicklung und -Validierung involviert. Somit ist eine personelle Trennung praktisch nicht mehr durchzuführen. Personelle Trennungen können daher nur noch problemspezifisch durchgeführt werden. Laut Handbuch wird ein deutlicher Unterschied zwischen Testen (durch den Entwickler) und Validierung (durchgeführt durch Mitarbeiter, die nicht bei der Entwicklung involviert waren) gefordert. Diese Trennung ist wesentlich und sollte unbedingt beibehalten werden. Durch die geringe Personalkapazität kommt der externen COCOSYS-Validierung ebenfalls eine erhebliche Bedeutung zu.

Zusammenstellung der zu prüfenden Programmteile

Im QS-Handbuch werden die einzubindenden Programmteile und neu zu entwickelnde Programmteile aufgelistet. Es wird dabei zwischen einzubringenden Programmteilen, die bereits entwickelt wurden und neu zu programmierenden Teilen unterschieden.

Das QS-Handbuch beschreibt den Stand zu Beginn der gesamten COCOSYS Entwicklung. Somit muss dieser Teil des Handbuchs überarbeitet werden. In Abb. 8-7 wird ein Überblick über das COCOSYS Gesamtsystem dargestellt. Der gelb eingerahmte Teil gehört zum eigentlichen COCOSYS. Weiterhin ist die Kopplung zu weiteren externen Programmen dargestellt. Die COCOSYS-QS-Maßnahmen umfassen die Programmteile des COCOSYS-Gesamtsystems (gelber Kasten) sowie LAVA. Weiterhin werden die speziellen Ergänzungen hinsichtlich der Kopplung mit eingeschlossen. Um konsistente Versionen bezüglich COCOSYS und ATHLET-CD sicherzustellen, ist das gesamte ATHLET-CD Programmsystem im Konfigurationsmanagement des COCOSYS eingeschlossen. Dies gilt ebenso für LAVA.

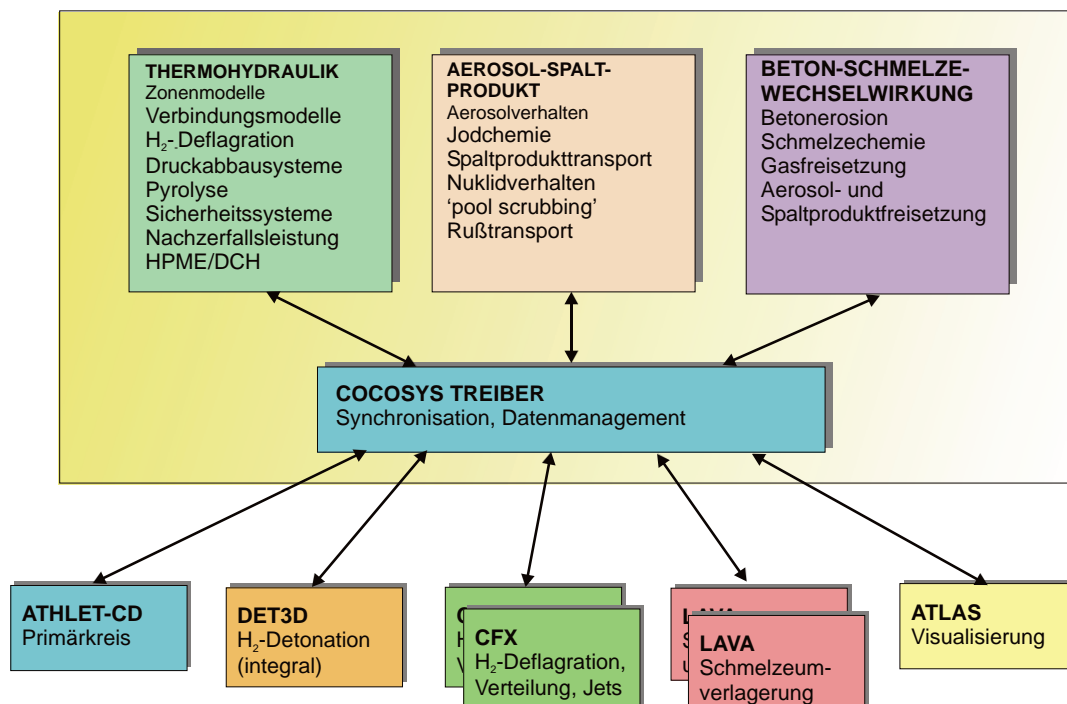


Abb. 8-7 COCOSYS-Gesamtsystem

Durchzuführende Prüfungen

In Tabelle 1 in /LAN 96/ werden die zu prüfenden Aspekte aufgelistet. Diese sind:

- Modellgleichungen, Diskretisierung, Lösungsverfahren
- Vollständigkeit der Rückkopplungen mit anderen Modellen
- Funktionsfähigkeit
- Gültigkeitsbereich
- Umsetzung in FORTRAN
- Effizienz (CPU-Aufwand)
- Portabilität
- Dokumentation

Aufgrund der relativ geringen Anzahl von beteiligten Mitarbeitern (vor allem auch im Vergleich zu ASTEC) wird der Aufwand im Bereich der Erstellung einer Spezifikation reduziert. Somit entfallen auch die formalen Prüfungen bezüglich der Modellgleichungen, Umsetzung in FORTRAN, Effizienz und ähnliches. Prüfungen erfolgen zunächst durch den Entwickler selbst. Weiterhin sind entscheidende Entwicklungen in der Regel in nationalen und internationalen Projekten eingebunden. Durch den Vergleich mit anderen Institutionen ist somit eine Prüfung entsprechend W&T sichergestellt. Insgesamt wird die Qualitätssicherung auf die interne und externe Validierung verlagert.

Verifikation und Validierung

Wie schon in /LAN 96/ festgestellt, kommt der Validierung des COCOSYS-Programms im Vergleich zu anderen Softwareentwicklungen eine hohe Bedeutung zu. Ein wesentlicher Grund ist die Schwierigkeit, Qualitätsmaßstäbe allgemein quantitativ festzuschreiben. Somit wird die Qualität des Programms anhand der durchgeführten Validierungsrechnungen aufgezeigt. Notwendig ist dabei eine Zuordnung zwischen Modellen und Modelloptionen zu den einzelnen Szenarien. Anhand von durchzuführenden Regressionstests wird die Qualität des Gesamtsystems aufgezeigt. Die erfolgreiche Durchführung dieses Tests ist notwendig für eine Freigabe einer neuen COCOSYS Version, also zum Beispiel von V2.3 nach V2.4.

Konfigurationsmanagement und Änderungsmanagement

Wie oben beschrieben wird das Konfigurationsmanagement mit CVS durchgeführt. Allerdings ist der formale Aufwand (z. B. Kontrollausschuss) massiv reduziert. So werden der Support, das Konfigurationsmanagement und das Änderungsmanagement vom gleichen Mitarbeiter durchgeführt.

Dokumentation und Ergebnis der QS-Maßnahmen

Entsprechend /LAN 96/ sollen folgende Punkte dokumentiert werden:

- System- und DV-Architektur
Diese Informationen werden im sogenannten Implementierungs-Manual dargestellt.
- Systemkonfiguration
Die Darstellung zum Betrieb älterer Versionen soll entfallen.
- Verifikation und Validierung, Regressionstesten
Die Dokumentation wird durchgeführt.
- Dokumentation der Ergebnisse der QS-Maßnahmen

8.5.2.2 Überarbeitung des QS-Handbuchs

Auf Basis des oben dargestellten Änderungsbedarfs wurde ein neues QS-Handbuch in englischer Sprache erstellt. Die Qualitätsziele bleiben dabei unverändert. Aufgrund der relativ geringen Anzahl beteiligter Mitarbeiter wurde die personelle Organisation entsprechend angepasst und entsprechend vereinfacht. Wesentlich ist dabei die personelle Trennung zwischen Entwicklung und Validierung von Modulen/Modellen. Die zu prüfenden Programmteile wurden dem aktuellen Entwicklungsstand angepasst. Die Prüfungen selbst wurden neu strukturiert. Zur Vereinfachung wird die Dokumentation der Spezifikation vereinfacht. Das sogenannte Pflichtenheft (Spezifikation der geplanten Modelle/durchzuführenden Arbeiten) entspricht dem Angebot. Hier sind, falls notwendig, auch die durchzuführenden Tests festgelegt. Die Qualitätssicherung sowie die damit verbundenen Arbeitsschritte sind im QM-Programm der GRS festgelegt. Wie auch schon in /LAN 96/ bildet die Validierung von COCOSYS den Schwerpunkt der Qualitätssicherung. Hierzu zählt auch das Regressionstesten, welches bei jeder Freigabe des COCOSYS Programms durchgeführt.

9 Zusammenfassung

In diesem Vorhaben sind zu den beiden Rechenprogrammen COCOSYS und ASTEC die geplanten Entwicklungsarbeiten durchgeführt worden, und der erreichte Entwicklungsstand ist anhand zahlreicher Testrechnungen der Entwickler bewertet worden. Das waren zusammengefasst die folgenden Punkte.

Arbeiten an COCOSYS

Im Hinblick auf einen Einbau in COCOSYS wurden drei zur Verfügung stehende **pH-Wert-Modelle** für den Reaktorsumpf untersucht:

- alleinstehendes AREVA-Modell
- Modell in MELCOR
- Modell der Firma AECL

Aufgrund der Ergebnisse dieser Untersuchung scheidet das AECL-Modell für einen Einbau in COCOSYS aus. Das AREVA-Modell ist prinzipiell für den Einbau in COCOSYS geeignet. Es müssen aber noch einige Punkte (z. B. Wirkung von Cs und HNO₃ auf den pH-Wert, HNO₃-Bildung, Auslaugen von organischem Material aus dem Dekontaminationsanstrich im Sumpf) geklärt bzw. entsprechende Arbeiten durchgeführt werden. In dem pH-Modell werden wichtige, den pH-Wert bestimmende chemische Elemente (z. B. Borsäure und CO₂) betrachtet. Die Quellen dieser chemischen Produkte werden in dem vorhandenen Modell allerdings nur sehr rudimentär vorgegeben. Insbesondere im Hinblick auf die geplante Umstrukturierung des Hauptmoduls für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten ist eine Verbesserung der Anbindung des pH-Wert-Modells an die anderen COCOSYS-Module im Nachfolgevorhaben RS1185 nötig.

Im Rahmen des Projektes wurden zu acht THAI-Versuchen zu den Themen Iod/Ozon-Reaktion, Iod/Stahl-Reaktion und Iod/Farbe-Reaktion, die auch Entwicklungsschwerpunkte des Moduls AIM für das **Iodverhalten** in COCOSYS darstellten, Rechnungen durchgeführt: Die Rechnungen bestanden aus Auslegungsrechnungen, blinden Voraus- und/oder Nachrechnungen. Parallel dazu wurde die Modellierung der chemischen Reaktionen und, wo erforderlich, deren Wechselwirkung mit Thermohydraulik und Aerosolverhalten erweitert und verbessert. Als Konsequenz aus den Versuchen Iod-13 und Iod-14 musste vor allem der natürliche Abbau von Ozon (O₃) in AIM stark korrigiert werden. Hier ist für die Zukunft vorgesehen, dass ein von AREVA entwickeltes, verbessertes Modell für den natürlichen Abbau von O₃, das auch die Zersetzung

an Oberflächen berücksichtigt, in AIM integriert wird. Ein Teil des auf der Stahloberfläche des Behälters abgelagerten flüchtigen I_2 reagiert zu nicht-flüchtigem Fel_2 . Diese Reaktion war weder in AIM noch in IODE berücksichtigt. Sie wurde daher in AIM neu modelliert und die erforderliche Reaktionskonstante anhand der verfügbaren Experimente abgeschätzt. Das Iod/Farbe-Modell wurde in Absprache mit AREVA um die chemisorbierte Spezies I_{chs} erweitert und die für die Modellerweiterung erforderlichen Reaktionskonstanten anhand der Versuche ermittelt.

Zu den möglichen **Rückwirkungen katalytischer Rekombinatoren und von H_2 -Verbrennungsvorgängen auf das Aerosolverhalten und die Iodchemie** sind zunächst verschiedene Einzelvorgänge identifiziert worden. Um die wichtigsten Vorgänge in COCOSYS berücksichtigen zu können, sind in der Entwicklerversion entsprechende Erweiterungen durchgeführt worden:

- Vorgabe der Konversionsrate von Iodid zu I_2 in Rekombinatoren
- Anpassung des Modells von Fromentin zur trockenen Resuspension auf die Bedingungen, die nach einer Wasserstoffverbrennung herrschen

Der Einfluss der möglichen Vorgänge auf den Quellterm ist beispielhaft in parametrischen Rechnungen mit COCOSYS ausgewertet worden. Die Rechenergebnisse mit COCOSYS an einem ausgewählten Szenario zeigen, dass eine CsI-Zersetzung von 20 % unter der Annahme einer frühen Wasserstoffverbrennung eine entscheidende Quelle für I_2 darstellen kann, da die I_2 -Konzentration in einem typischen Störfallverlauf mehrere Größenordnungen niedriger ist als die CsI-Konzentration. Für Abschätzungen zur CsI-Konversion in Rekombinatoren ist dasselbe Szenario berechnet worden. Auch hier ist die CsI-Konzentration um mehrere Größenordnungen höher als die des I_2 . Daher kann selbst eine so geringe Konversionsrate wie 10 % zum frühen Zeitpunkt (bei Störfallbeginn) die entscheidende Quelle für I_2 sein. Die durchgeführten Rechnungen zur trockenen Resuspension nach Wasserstoffverbrennungen zeigen, dass im Falle einer Auslegungsleckage nur ein minimaler Einfluss auf den Quellterm zu erwarten ist, während bei einer $0,01 \text{ m}^2$ -Leckage der Aerosolquellterm um einen Faktor 4 steigen kann. Darüber hinaus ist im Rahmen dieses Vorhabens an der Auslegung von speziellen Experimenten zu dieser Thematik mitgewirkt worden.

Die Einführung einer **gemeinsamen Bilanz im Modul für das Aerosol und Iodverhalten in COCOSYS-AFP** gewährleistet eine konsistente Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens im Containment. Um die einzelnen Module in AFP wei-

ter zu harmonisieren, ist im Rahmen des Nachfolgevorhabens RS1185 eine grundlegende Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP vorgesehen. Hierdurch werden alle Module auf dieser sehr allgemeinen Basis harmonisiert. Die Simulation weiterer Transportprozesse wird ebenfalls sehr vereinfacht.

Zur Berücksichtigung der **Quellen für Spaltprodukte in COCOSYS** wurde die Funktionsfähigkeit der Kopplung zwischen COCOSYS V2.4 und ATHLET-CD 2.1b anhand dreier Beispiele aufgezeigt. Die Schwerpunkte der drei Beispiele liegen auf dem Bereich Thermohydraulik, Nuklidfreisetzung und Aerosol- und Spaltproduktfreisetzung (elementweise, ohne Verwendung von FIPISO). Insbesondere die Auswertung der Berechnungsergebnisse zeigt, dass Integralexperimente wie PHEBUS FPT1 eine einzigartige Gelegenheit bieten, einen komplexen Störfallablauf, bei dem verschiedene untereinander wechselwirkende Phänomene auftreten, zu berechnen und dabei in den Modellen vorhandene Schwachstellen zu erkennen und ATHLET-CD wie COCOSYS integral und nicht nur partiell an Einzeleffekt-Experimenten zu testen.

Zur Ermöglichung der Einarbeitung neuerer experimenteller Ergebnisse in die Simulation des **Ex-Vessel-Schmelzeverhaltens** ist der gemeinsam von IRSN und GRS für ASTEC entwickelte MCCI-Code MEDICIS in COCOSYS integriert. Hierbei sind alle nötigen Schritte für die Übertragung von MEDICIS aus der ASTEC-Umgebung bis zur funktionsfähigen Einbindung in COCOSYS durchgeführt worden. Angesichts der noch unklaren, experimentellen Datenlage zum (mehrdimensionalen) Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton hat die GRS für MEDICIS ein halb-empirisches Modell vorgeschlagen und erfolgreich umgesetzt, welches auf einer integralen Auswertung von Experimenten beruht. Die unbestimmten Parameter wurden dabei aus der Mittelung von experimentellen Daten gewonnen. Die bisherige Validierung zeigt ausreichende Genauigkeit in wichtigen Punkten (Erosion, Temperatur). Die in den zu diesem Vorhaben parallel laufenden Validierungsvorhaben RS 1147 und RS1170 durchgeführten Rechnungen zu WEX, dem alten MCCI-Modell in COCOSYS/ ASTEC, und MEDICIS, dem neuen MCCI-Modell in ASTEC und nun auch in COCOSYS, haben gezeigt, dass nach Einbringung dieser neuen Beschreibung des Wärmeübergangs an der Grenze Schmelze/Beton das Modell MEDICIS ausreichend belastbar für die Anwendung auf viele vorliegende Experimente und - dank seiner fortschrittlichen Codestruktur - flexibel und leicht um zusätzliche Modelle erweiterbar ist.

Die Einbindung von ASTEC-MEDICIS in COCOSYS wurde an einem Anlagendatensatz überprüft. Es handelt sich hierbei um ein Szenario für einen deutschen DWR mit

1300 MWe (Konvoi). Die Ergebnisse zeigen im Hinblick auf wichtige thermohydraulische Größen (z. B. Containment-Druck) eine weitgehende Äquivalenz der Ergebnisse im Vergleich zur alten Anbindung von WECHSL. Ausgehend von dem erreichten Stand der Anbindung von MEDICIS an COCOSYS sind die Punkte Wasserüberdeckung der Schmelze, Aerosol- und Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze, mehrdimensionales Verhalten bei der Erosion sowie die Aktualisierung von Schnittstellen im Rechenprogramm für Gesamtabläufe (Freisetzung → Ausbreitung → MCCI → Ausbreitung ...) noch als offen zu nennen. Diese Punkte sollen in dem Anschlussvorhaben RS1185 gelöst werden.

Die **Wärmeübergangsmodelle** zwischen Atmosphäre und Strukturen wurden im Hinblick auf die charakteristische Länge sowie deren Einfluss auf das Aerosolverhalten untersucht. Es wurde ein verbessertes kombiniertes Wärmeübergangsmodell (für freie, erzwungene Konvektion und Kondensation) in COCOSYS implementiert und anhand von mehreren Experimenten (HDR E11.4, THAI-TH13 und BMC-VANAM-M2*) überprüft. Mit dem neuen Modell können nun realistische charakteristische Längen verwendet werden. Allerdings sind die Ergebnisse zum Aerosolverhalten noch nicht zufriedenstellend. Hierzu sind im COCOSYS Validierungsvorhaben noch weitere Untersuchungen geplant.

Für die **Erweiterung des COCOSYS-Manuals basierend auf der THAI-Validierung** wurden die Vorgänge zu Atmosphärenschichtungen in den THAI-Versuchen TH2, TH7, TH10 und TH13 und HM-2 untersucht und die blinden COCOSYS-Rechnungen ausgewertet. Aus den Ergebnissen der COCOSYS-Rechnungen wurden Nodalisierungsempfehlungen abgeleitet und im COCOSYS-Manual dokumentiert.

Die durchgeführte **Optimierung des Diffusionsansatzes in den Verbindungsgleichungen** im Thermohydraulikmodul in COCOSYS zur Simulation der in Experimenten beobachteten Schichtung von Gasen wurde hinsichtlich ihrer Eignung anhand der Experimente THAI TH10 und Panda SETH Test 9 überprüft. Es wird empfohlen, dieses Modell standardmäßig in COCOSYS zu verwenden.

Im Fall einer Wärmeabgabe von nassen Strukturen wird der darauf befindliche Wasserfilm wieder verdunstet und führt so zu einer höheren Feuchte in der Atmosphäre. In COCOSYS ist es mit dem neu eingebauten **Filmverdampfungsmodell** nun möglich, diesen Effekt zu berücksichtigen. Das Filmverdampfungsmodell wurde anhand des THAI-Versuchs TH9 geprüft. Hierbei zeigte sich, dass der Wärmetransport in vertikaler

Richtung durch die Behälterwand einen starken Einfluss auf die Versuchs- und die Rechenergebnisse hat. Da COCOSYS den Wärmetransport nur eindimensional (hier in radialer Richtung) berechnet, konnte der vertikale Transport nicht ausreichend berücksichtigt werden. Somit ist eine belastbare Validierung des neuen Filmablauf- und Verdampfungsmodells zurzeit nicht möglich. Es ist für das Nachfolgevorhaben vorgesehen, dass zum Zwecke der Validierung ein zweidimensionales Wärmetransportmodell für COCOSYS entwickelt wird.

Für die Verbesserung der **Pyrolyse**-Modelle in COCOSYS konnten die im internationalen Rahmen bei ICFMP (International Collaborative Project to Evaluate Fire Models for Nuclear Power Plant Applications) und OECD PRISME (Mehrraum-Versuche zur Wärme- und Rußausbreitung) gewonnenen Erkenntnisse genutzt werden. Das COCOSYS Programm wurde dahingehend ergänzt, dass unter Verwendung von sogenannten Plumezonen (Kegelstumpf-förmige Zonen) der auf Basis einer Plumekorrelation berechnete Luftmitriss berechnet wird und mit den von COCOSYS berechneten Strömungswerten in Richtung des Plumes verglichen werden kann. Die Ergänzung wurde anhand des PRISME-SOURCE Versuchs SI-D1 getestet. Zur Modellierung der Rußproduktion wurde in COCOSYS die Möglichkeit geschaffen, die chemische Zusammensetzung des Rauchs sowie eine von der Sauerstoffkonzentration abhängige molare Rauchausbeute als Tabelle per Eingabe vorzugeben. Des Weiteren wurde die Reaktionsgleichung für die Kohlenwasserstoffe entsprechend modifiziert. Das Modell wurde anhand des PRISME-SI-D3 Experiments erfolgreich getestet. Verbesserungsbedarf besteht noch im Hinblick auf die in der Rechnung beobachteten Instabilitäten.

Im Rahmen der Arbeiten wurde die **Schnittstelle zwischen dem DRASYS (DRuckAbbauSYSTEMe, THY Hauptmodul) Zonenmodell und dem 'Pool Scrubbing' SPARC Modell** verbessert und die Integration von SPARC in das COCOSYS-Gesamtsystem erhöht. Dadurch können jetzt z. B. Szenarien mit der gleichzeitigen Simulation einer Wasserstoffrekombination und der Rückhaltung von Aerosolen in Wasservorlagen simuliert werden. Zur Überprüfung der Modelländerungen wurden die POSEIDON-Versuche PA-09, PA-11, PA-15 und PA-20 nachgerechnet. Die Modifikationen sollten von COCOSYS nach ASTEC übertragen werden. Dies wäre sinnvoll im Zusammenhang mit einem kompletten Update von SPARC, das sich in ASTEC noch auf dem COCOSYS-Stand von 2003 befindet. Parameterstudien zu speziellen Randbedingungen zeigen, dass es noch offene Fragen zum Verhalten des SPARC-Modells gibt. Dies betrifft u. a. die Ergebnisse zur Aerosolrückhaltung bei nahezu reiner

Dampfzuströmung. Die Aerosolrückhaltung in einer gesättigten Wasservorlage kann derzeit nicht berechnet werden, weshalb in diesem Fall die Dekontamination auf Null gesetzt wird.

Für die Simulation von **Wasserstoffverbrennungen mit CFD-Methoden** war bislang das Programm CFX-4 für die Anbindung an COCOSYS vorgesehen. Die CFX-Version 5 (und folgende) enthält viele Verbesserungen gegenüber der älteren Version 4. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde von der GRS das in CFX-11 implementierte Eddy-Dissipation Modell für die Anwendung auf Wasserstoffverbrennungen verbessert und die nötige Parameteranpassung für dieses modifizierte Modell durchgeführt. Die Rechnungen mit dem erweiterten Modell zeigen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Dabei ist mit den Experimenten HYCOM01 und HYCOM02 explizit auf die Versuchsbasis, die im Projekt HYCOM erstellt wurde, zurückgegriffen worden. Da aber die Kopplung zwischen 'lumped parameter'-Codes (COCOSYS) und CFD-Code (CFX) nicht unproblematisch ist, erscheint es nach derzeitiger Sicht zweckmäßig, zunächst mit der Abbildung eines KONVOI-Sicherheitsbehälters im Vorhaben RS1181 Erfahrungen zu sammeln und abzuwarten, welche Lehren bei der Anbindung von CFD an 'lumped parameter' an anderen Stellen (u. a. auch bei GRS hinsichtlich der Kopplung ATHLET-CFX) gezogen werden, bevor weitere Arbeiten zur Kopplung zwischen CFX und COOSYS durchgeführt werden.

Arbeiten zu ASTEC

Da mit einer volumenorientierten Diskretisierung wie in ASTEC die Bewegung einer Flammenfront für die **Simulation von H₂-Verbrennungsvorgängen** nicht erfasst werden kann, ist des Thermohydraulik-Modul (CPA) um ein Flammenfrontverfolgungsmodell erweitert worden. Dieses erfasst auch zeitliche Änderungen der Flammengeschwindigkeit während der Bewegung zwischen den Zonen. Der eigentliche Verbrennungsvorgang wird weiterhin durch das bereits implementierte Verbrennungsmodell COMB in ASTEC berechnet. Der Vorteil besteht in der genaueren Berechnung der thermohydraulischen Vorgänge mit dem CPA-Modul. Um diese Vorteile der thermohydraulischen Modellierung des Containments durch das CPA-Modul in vollen Umfang nutzen zu können, wird der Einfluss der Gasgeschwindigkeiten auf die Flammenfront nun berücksichtigt. Die derzeit implementierten Modellparameter liefern für die drei Experimente RUT, HDR und HX23 zufrieden stellende Ergebnisse.

Vor dem Hintergrund einer neuen Strategie seitens IRSN zur CESAR-ICARE2-Kopplung sind die geplanten Arbeiten zu der **CESAR-DIVA-Kopplung** obsolet geworden. Seitens der GRS war schon früh auf die Problematik der CESAR-DIVA-Kopplung hingewiesen und an der Strategie für eine zukünftige Entwicklung mitgewirkt worden. Charakteristisch für die derzeitige Kopplung ist, dass mit Aktivierung des DIVA-Moduls die Thermohydraulik, die bis zu diesem Zeitpunkt komplett von CESAR berechnet wird, ab diesem Zeitpunkt teilweise auch von DIVA gerechnet wird. Insbesondere die Druckiteration an den Schnittstellen der Module zeigte sich als anfällig für numerische Instabilitäten. Die mit der neuen Strategie verbundenen, sehr aufwändigen Arbeiten sind von Seiten des IRSN bereits in Angriff genommen worden und mit einer ersten Version ist erst gegen Mitte 2010 zu rechnen.

Im Thermohydraulikmodul CPA in ASTEC wurde ein schnell rechnendes, vereinfachtes Modell zur **Simulation von Kondensationsrohren in SWR** eingebaut. Das Modell wurde anhand des Experimentes GKSS M1 validiert und wird den Anwendern mit der neuen Version ASTEC V2.0 zur Verfügung stehen.

Bisher ist CESAR, das Thermohydraulikmodul in ASTEC für den Kühlkreislauf, nur für den Reaktorkühlkreislauf eines DWR angewendet worden. In diesem Vorhaben sind erste Schritte durchgeführt worden, um **CESAR für die Anwendung auf SWR** zu erüchtigen bzw. zu testen. Ausgehend von einem MELCOR-Datensatz für eine SWR der Baulinie 69 wurde zunächst ein vereinfachter Datensatz für CESAR entwickelt, um mit den verfügbaren Möglichkeiten von CESAR die Verhältnisse in einem SWR abbilden zu können. Die mit diesem einfachen Modell erreichten Ergebnisse zeigen die grundsätzliche Fähigkeit von CESAR, einen SWR-Primärkreislauf zu modellieren. Auf dieser Grundlage ist derzeit keine Entwicklung von speziellen SWR-Komponenten (z. B. Wasser-Dampf-Separator) für CESAR erforderlich. Die nächste Aufgabe ist die Erstellung eines detaillierten Datensatzes und die Durchführung einer Vergleichsrechnung mit ATHLET. Aus dem Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeiten lässt sich unter Umständen noch Entwicklungsbedarf ableiten.

Im Hinblick auf die Identifikation von **zukünftigem Entwicklungsbedarf für SWR** konnte die Anwendbarkeit des Containmentmoduls CPA auf SWR-Containments mit einer ersten Testrechnung für einen SWR vom Typ 69 nachgewiesen werden. Notwendige Modellverbesserungen oder -Entwicklungen sind derzeit unter anderem für die Iodchemie denkbar. Die wichtigsten Defizite werden aber bei der Modellierung des Kühlkreislaufs sowie der Phase der Kernzerstörung bei einem SWR gesehen.

Ein Konzept für die **Verbesserung des DCH-Moduls in ASTEC** wurde erstellt und mit IRSN eingehend diskutiert. Das in COCOSYS verfügbare DCH-Modul ist auf der Basis von Experimenten für die Anlagen der deutschen KONVOI- sowie der französischen P'4-Baureihe mit je zwei blinden Rechnungen (für die Experimente DISCO-KH01 und KH02 sowie FH01 und FH03) im Hinblick auf Verbesserungsmöglichkeiten von ASTEC überprüft worden. Hinsichtlich der Tiefe der Modellierung und des Detailreichtums erreicht der bisherige Modellstand zu DCH in ASTEC, bestehend aus RUPUICUV, CORIUM und CPA, bei weitem nicht den Stand von COCOSYS. In Zusammenarbeit mit IRSN und auch im SARNET-Rahmen ist geplant, COCOSYS als Testbett für verbesserte Ansätze zur Darstellung des Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube zu nutzen und die so gewonnenen Erkenntnisse in die zukünftige ASTEC-Entwicklung einfließen zu lassen.

Im Hinblick auf das **'prototyping' eines Modells für die Schmelzeausbreitung in ASTEC** wurde in einem ersten Schritt das derzeitige 'stand alone' Programm LAVA bis zur Erreichung der prinzipiellen Ablauffähigkeit ('prototyping') als neues Modul in ASTEC integriert und getestet. LAVA ist an ASTEC bislang prinzipiell angebunden, d. h. eine Schmelzeausbreitung kann mit ASTEC im 'stand alone'-Modus berechnet werden. Die Einbindung in eine Rechnung für einen Unfallablauf muss noch erprobt werden. In einem zweiten Schritt ist auf der Basis von verfügbaren theoretischen Ansätzen ein analytisches Kriterium zur Abschätzung der Ausbreitungseffizienz entwickelt worden, das in Abstimmung mit IRSN in ASTEC eingebracht wird und bei einem gegebenen Szenario (Focus: EPR) entscheidet, ob die Berechnung der Schmelzeausbreitung mit einem detaillierten Code (LAVA) in diesem Fall benötigt wird oder nicht.

Im Bezug auf die Pflege der **Code-Infrastruktur** war ein besonders wichtiges Ziel, die Kopplung von ASTEC mit dem von der GRS entwickelten Visualisierungsprogramm ATLAS, das bereits zur Ergebnisdarstellung von ATHLET, COCOSYS und MELCOR angewendet wird, auszuweiten. Hier ist die Kopplung von ASTEC mit ATLAS auf die Daten des DIVA-Moduls erweitert worden. Die Prozeduren sind als Quellcodemodifikationen in ASTEC übertragen und erfolgreich getestet worden. Mit den eigens zu diesem Zweck erstellten Grafiken kann neben den Daten des Primärkreislaufs und des Containments auch die Phase der Kernzerstörung als dynamisiertes Bild in ATLAS dargestellt werden. Zusätzlich zur bereits im Vorläufervorhaben erstellten Containment-Grafik für einen DWR vom Typ KONVOI ist nun auch ein entsprechendes Bild für einen DWR vom Typ WWER-1000 erstellt worden. Damit stehen für eine KONVOI- und eine WWER-1000 Anlage erste Versionen von Basisgrafiken zur Verfügung. Zur Vorberei-

tung auf die ATLAS-Schulung für externe ASTEC-ATLAS-Nutzer wurde zunächst mit den ATLAS-Entwicklern in Garching eine interne, anwendungsbezogene Schulung in Köln durchgeführt.

Im Projektzeitraum wurde begleitend zu den Aktivitäten im SARNET-Rahmen die **Unterstützung externer**, insbesondere auch der **ASTEC-Anwender** in SARNET sichergestellt. Des Weiteren wurden im SARNET-Rahmen verschiedene sog. "Users Clubs" durchgeführt. Die ASTEC-Nutzer insbesondere im SARNET-Rahmen wurden über das web-basierte MARCUS-Tool unterstützt. Eingehende Anfragen für CPA bezogen sich auf das Modell zur Modellierung von Druckabbausystemen (DRASYS), zur Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen (SPARC) und zur Ablagerung von Spaltprodukten an Wänden. Viele Anfragen hatten als Ursachen falsche oder fehlende Eingabegrößen. Weiterhin sind einige Modelle unter Randbedingungen eingesetzt worden, für die die Modelle nicht validiert sind und demzufolge außerhalb ihrer Gültigkeitsgrenzen liegen. Als eine Konsequenz ist die Dokumentation einerseits zu vervollständigen und zum anderen um Nutzer-Empfehlungen zu erweitern.

Querschnittsaktivitäten

Aufgrund des Informationsrückflusses **im Rahmen der Unterstützung interner und externer Nutzer** wurden zahlreiche **Modifikationen der Modellierung** in COCOSYS durchgeführt, wie z. B. die Optimierung der Iterationsprozedur für Pumpsysteme, die Optimierung der INSERTION-Option für die Simulation von Kondensationsrohren, die Korrektur der Blendengleichung im Thermohydrauliklöser, der Einbau eines Modells zur nassen Resuspension, Verbesserungen an der vereinfachten Behandlung von Kondensationsrohren und die Aktualisierung der Kopplung zwischen COCOSYS und ATHLET-CD.

In **internationalen Gremien** wurde intensiv mitgearbeitet: Für OECD-GAMA wurde der State-of-the-Art-Report zu Nuklearen Aerosolen (NARSOAR) erstellt und als qualifizierte Entwurfsversion der OECD im April 2008 vorgelegt. Des Weiteren wurden die OECD-Vorhaben THAI bzw. MCCI-2 intensiv vorbereitet bzw. begleitet. Im Rahmen der Mitarbeit in SARNET hat die GRS innerhalb dieses Vorhabens zu vielen SARNET-Arbeitspaketen beigetragen.

Im Zeitraum des Projektes wurde die **neue COCOSYS-Version V2.3** freigegeben. Die Version V2.4 steht kurz vor der Fertigstellung.

Wie im vorherigen Vorhaben wurde zur **Qualitätssicherung** (QS) das Konfigurationsmanagement (Versionsverwaltung) von COCOSYS mit dem Werkzeug CVS weiter durchgeführt. Die QS-Vorschriften wurden hinsichtlich eines Änderungsbedarfs überprüft und auf Basis des identifizierten Änderungsbedarfs wurde ein neues QS-Handbuch in englischer Sprache erstellt. Die Qualitätsziele bleiben dabei unverändert.

Fazit

COCOSYS ist – gespiegelt an dem aktuellen, internationalen Wissensstand – ein führendes Werkzeug zur umfassenden Simulation der Vorgänge im Sicherheitsbehälter bei Stör- und Unfällen. Auf den Gebieten mit den größten noch vorhandenen Wissenslücken wurden die Modelle entsprechend des Erkenntnisfortschrittes weiter verbessert (z. B. Iodverhalten) bzw. die Möglichkeit für zukünftige Verbesserungen geschaffen (Einbringen eines flexiblen Modells für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung). In der parallel durchgeführten ASTEC-Entwicklung wurden die Erfahrungen der GRS mit den eher detailliert-mechanistischen Modellen in COCOSYS erfolgreich eingebracht, um für die Bedürfnisse von ASTEC schnell laufende, aber dennoch im Sinne der „Best Estimate“- Maxime ausreichend genaue Simulationsmodelle für bestimmte Phänomene (z. B. für SWR) zur Verfügung zu stellen. ASTEC wird zurzeit als europäischer Referenzcode im Rahmen des SARNET-2-Projektes verwendet.

10 Literatur

- /ADR 04/ Adreani, M.
Summary of Selected Tests and Criteria Applied
EVOL-ECORA-D12, September 2004
- /ALE 99/ Alekseev, V. et al.
Integral Large Scale Experiments In Hydrogen Combustion For Sever Accident Code Validation
Kurchatov Institute, 1999
- /ALL 99/ Allelein, H.-J. et al.
Entwicklung und Verifikation eines Containment-Codesystems (COCOSYS) und eines deutsch-französischen Integralcodes (ASTEC)
Abschlussbericht GRS-A-2736, GRS Köln, 1999.
- /ALL 99b/ Allelein H.-J. et. al.
Entwicklung und Verifikation eines Containment-Codesystems (COCOSYS) und eines deutsch-französischen Integralcodes (ASTEC) , Teil 2
Abschlussbericht, GRS-A-2737, GRS Köln, Oktober 1999
- /ALL 03/ Allelein, H.-J. et al.
Weiterentwicklung und Fortsetzung der Validierung des Containment-Codesystems COCOSYS und des deutschfranzösischen Integralcodes ASTEC
Abschlussbericht GRS-A-2960, GRS Köln, 2003.
- /ALL 03b/ Allelein, H.-J. et al.
Weiterentwicklung und Fortsetzung der Validierung des Containment-Code-Systems COCOSYS und des deutschfranzösischen Integralcodes ASTEC, Teil 2: Fortsetzung der COCOSYS Validierung
Abschlussbericht GRS-A-2961, GRS Köln, 2003.
- /ALL 07/ Allelein, H.-J. et al.
Intensivierte Validierung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC
Abschlussbericht GRS-A-3360/I, GRS Köln, 2007.

- /ALL 08/ Allelein, H. - J., Auvinen, A., Ball, J., Güntay, S., Herranz, L. E., Hidaka, A., Jones, A. V., Kissane, M., Powers, D., Weber, G.
State-of-the-Art Report on Nuclear Aerosols in Reactor Safety
OECD, to be published
- /ARD 98/ Ardey, N.
Struktur und Beschleunigung turbulenter Wasserstoff-Luft-Flammen in
Räumen mit Hindernissen
Doktorarbeit, TU München, 1998
- /ARN 99/ Arndt, S., Weber, G.
FIPHOST – A Module to Calculate the Fission Product Transport in a LWR
Containment
ASTEC-Bericht ASTECV0/DOC/99-21, GRS Köln, 1999
- /ARN 03/ Arndt, S.
Implementaion of Simple Passive Autocatalytic Recombiner Models in
ASTAC V0.4 and V1.0
ASTEC-Bericht ASTECV1/DOC/03-05, GRS Köln, 2003
- /ARN 04/ Arndt S.
Testrechnung zur Überprüfung der SPARC Modifikationen
Arbeitsmaterial, September 2004
- /ARN 07/ Arndt S.
Implementation of a Fast Running Model for the Simulation of Vent Pipes
into ASTEC
BMW i Projekt RS 1159: Weiterentwicklung der Rechenprogramme
COCOSYS und ASTEC
Technical Note TN-ARN-1/2007, revision 1a
GRS mbH, December 20, 2007

- /ARN 07b/ Arndt S.
 Overview of COCOSYS source code modifications suggested to be transferred to ASTEC CPA
 BMWi Projekt RS 1159: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC
 ASTEC-V1/MEM/07-05, Technical Note TN-ARN-2/2007, revision 0
 GRS mbH, July, 2007
- /ARN 08/ Arndt S.
 Verbesserung der Kopplung zwischen DRASYS und SPARC sowie der Robustheit von SPARC Rechnungen
 BMWi Projekt RS 1159: "Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC", SWR-spezifische Modifikation bzw. Ergänzung der Modellierung
 Technische Notiz TN-ARN-1/2008, GRS Berlin, Oktober 2008
- /ARN 08b/ Arndt, S. und Nowack, H.
 Status of Regression Testing,
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Juli 2008
- /AUB 05/ Auban, O.
 OECD/SETH PANDA Test 9-1 Quick-Look Report,
 TM-42-05-15, ALPHA-05-08-0, June 2005
- /AUD 99/ Audouin, L. und Tourniaire, B.
 New Estimation of the Thermal Interface Height in Forced-Ventilation Enclosure Fires,
 6th International Symposium of Fire Safety Science, pp 555 – 566, 1999
- /AUD 07/ Audouin, L., Forestier, M.,
 OEDC PRISME Project, Exercise#1: Open calculations on PRISME Source Tests and Blind Calculations on PRISME Door Tests, SEMIC-2006-319 rev 1a, IRSN, March 2007
- /BAE 96/ Baehr, H. D., Stephan, K.
 Wärme- und Stoffübertragung
 Springer Verlag Berlin, 1996.

- /BES 00/ Bestele, J., Klein-Heßling, W.
 ASTEC V0 CPA module, Program Reference Manual
 ASTEC-V0/DOC/00-14, September 2000
- /BON 00/ Bonnet, J. M.
 Thermal Hydraulic Phenomena in Corium Pools for Ex-Vessel Situations:
 the BALI Experiment
 Proc. of ICONE8,. Conf., Baltimore, 2000.
- /BRA 04/ Braun, T.
 Einfluss des Wärmeübergangs an Wänden auf die Aerosolabbaurate im
 Sicherheitsbehälter von Kernkraftwerken bei schweren Störfällen,
 LEE-8, Ruhr-Universität-Bochum, 2004
- /BRO 90/ Brown, M. L. ; Beahm, E. C. ; Shockley, W. E.
 The Oxidation of Cesium Iodide in Stationary Premixed Hydrogen Flames
 ACE-TR-B6, ORNL. 1990
- /CED 92/ Cederqvist, P. et. al.
 Version Managment with CVS
 Signum Support AB, 1992
- /CFX 07/ CFX-11.0 Manual, CFX ANSYS Inc, Canonsburg, USA, 2007
- /CLE 07/ Clément, B., Cantrel, L., Ducros, G., Funke, F., Herranz, L., Rydl, A., We-
 ber, G., Wren, C.
 State of the Art Report on Iodine Chemistry
 OECD NEA/CSNI/R(2007)1, 2007
- /COC 05/ COCOSYS User Forum - Report of Bugs:
<http://domino.grs.de/cocosys%5Cuserforumcocosys.nsf/pages/report>
 Bug-IDs V2.2v0-008, V2.1v4-002, V2.1v3-005, V2.1v3-004

- /DAP 08/ Dapper, M., Bendiab, M., Wagner, H.-J., Koch, M. K.
Nasse Resuspension, Modellentwicklung der Filmtropfenfreisetzung
3. Technischer Fachbericht zum Vorhaben BMWi 150 1300: Einfluss von
Resuspensionsprozessen auf den Quellterm und Beitrag zur an COCOSYS
angepassten Modellierung von Wasservorlagen,
LEE-47, Lehrstuhl für Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-
Universität Bochum, April 2008
- /DEH 96/ Dehbi A.
Final Experimentally Averaged Values for the POSEIDON Integral Tests
E-mail of A.Dehbi@psi.ch to "Hans-Günter Friederichs/Koeln/GRS/DE"
13.06.96
- /DES 04/ Deschamps, F. ; Sabroux, J. C.
Particulate Iodide to Gaseous Iodine Conversion in a Passive Autocatalytic
Hydrogen Recombiner.
Journal of Aerosol Science 34 Suppl. 1 (2004), pp. S1087–S1088
- /DIC 08/ Dickinson, S., Andreo, F., Karkela, T., Ball, J., Bosland, L., Cantrel, L.,
Funke, F., Girault, N., Holm, J., Guilbert, S., Herranz, L. E., Housiadas, C.,
Ducros, G., Mun, C., Sabroux, J C., Weber, G.
Advances on Containment Iodine Chemistry
The 3rd European Review Meeting on Severe Accident Research
(ERMSAR-2008), Nesseber, Vigo Hotel, Bulgaria, 23-25 September 2008
- /DIN 00/ Dinh, T. N., Konovalikhin, M. J., und Sehgal, B. R.
Core Melt Spreading on a Reactor Containment Floor
Progress in Nuclear Energy, vol. 36, n°4, pp. 405-468, 2000
- /DOR 07/ Van Dorsselaere, J.P., Allelein, H.-J.
ASTEC V2 Objectives and Requirements
ASTEC-V2/REQ/07-02, 2007
- /DOR 07b/ Van Dorsselaere, J. P., et al.
ASTEC Quality Assurance – IRSN-GRS Common Frame of Reference,
ASTEC-V1/QA/07-02, Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire,
März 2007

- /DOR 08/ Van Dorsselaere, J. P., et al.
 ASTEC V2 Development and Validation Plan,
 ASTEC-V2/SPE/08-01,
 Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, May 2008
- /FIS 98/ Fischer K.
 Modellierung von Abscheidungsvorgängen in Wasservorlagen
 Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung - Vorhaben-Nr. 150 1086
 Berichts-Nr. BF-R68.411-1
 Battelle Ingenieurtechnik GmbH, Eschborn, Dezember 1998
- /FRO 89/ Fromentin, A.
 Particle Resuspension from a Multi– Layer Deposit by Turbulent Flow
 Paul Scherrer Institut. 1989 (PSI-Bericht Nr. 38)
- /FUN 06/ Funke, F., Langrock, G., Kanzleiter, T., Poß, P., Fischer, K., Weber, G.,
 Allelein, H. - J.
 Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum
 Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter – THAI Phase II, Teil 2: Iod-
 Versuche (Abschlussbericht)
 NTR-G/2007/de/0233A (August 2006)
- /FUN 07/ Funke, F.
 Model to Predict the pH of PWR Sumps in Severe Accidents
 AREVA Work report NTR-G/2006/en/0118, Erlangen, Oct. 2007 (restricted)
- /GAL 89/ Galloway, F. M., Hirschler, M. M.
 A Model for the Spontaneous Removal of Airbourne Hydrogen Chloride by
 Common Surfaces, Fire Safety Journal 14 (1989), S. 251
- /GAL 90/ Galloway, F. M., Hirschler, M. M.
 Transport and Decay of Hydrogen Chloride: Use of a Model to Predict Hy-
 drogen Chloride Concentrations in Fires Involving a Room-Corridor-Room
 Arrangement, Fire Safety Journal 16 (1990), S. 33

- /GAU 05/ Gauntt, R. O. et al.
MELCOR Computer Code Manuals
Vol. 2: Reference Manual, Version 18.6 Sept. 2005
NUREG-/CR-6119, Vol. 2, Rev. 3 (2005)
- /GÜN 96/ Güntay S.
POSEIDON-Loop: Experimente zur Rückhaltung von Iod und Aerosolpartikeln – Abschlussbericht
Nationale Energie-Forschungs-Fonds (NEFF), Projekt Nr. 432
PSI, Labor für Sicherheits- und Unfallforschung, Würenlingen-Villingen,
May 1009
- /HEI 95/ Heitsch, M.
Das Verbrennungsmodell DECOR für das Programmsystem RALOC
mod4.0
GRS-A-2292
- /HEI 97/ Heitsch, M.
Nachrechnungen mit RALOC mod4 zu Deflagrationsversuchen am HDR
(Serie E12)
GRS-A-2103, GRS Köln, 1993
- /HEI 03/ Heitsch, M.
Validierung von Modellen zur Simulation von Verbrennungsvorgängen im
Sicherheitsbehälter, GRS-A-3137, GRS Köln 2003
- /HEI 03b/ Heitsch, M., Pailhories, P., Schwinges, B.
Comparative Calculations on selected H2 deflagration experiments with
DECOR and PROCO, Rev 0, , ASTEC-V1/MEM/03-13
- /HES 93/ Hesse, U., Weber, G.
Ein Modell zur Berechnung der Gamma-Wärmequellichten in
Containmentstrukturen für das Rechenprogramm FIPLOC-M
GRS-A-2039, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH,
1993

- /HIN 99/ Hinds, W. C.
Aerosol Technology – Properties, Behavior, and Measurement of airborne Particles. second edition. John Wiley & Sons, 1999
- /JAH 75/ Jahn, M.
Holographische Untersuchungen der freien Konvektion in einer Kernschmelze
BMFT - Forschungsvorhaben RS 48/1, Hannover 1975.
- /JON 05/ Jones, W. W. et. al.
CFAST – Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport (Version 6), Technical Reference Guide, NIST Special Publication 1026, December 2005
- /KAN 93/ Kanzleiter, T.
VANAM–Mehrraum–Aerosolabbau–Versuch M4 mit Mischaerosol (lösliches und unlösliches Material) und Resuspension durch einen Wasserstoffbrand
Battelle–Institut e.V. 1993 (BleV-R67.098-305)
- /KAN 07/ Kanzleiter, T. ; Ahrens, G. ; K.Fischer ; Häfner, W. ; Kühnel, A. ; G.Poss ; Funke, F. ; Langrock, G. ; Allelein, H. J. ; Weber, G. ; Schwarz, S.
Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter. THAI Phase II
Becker Technologies, Areva NP und GRS. 2007 (150 1272 – S1)
- /KLE 00/ Klein-Heßling W. u. a.
COCOSYS V1.2 User's Manual
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
GRS-P-3/2, Juli 2000
- /KLE 01/ Klein-Heßling, W., Schwinges, B.
CPA Module. Program Reference Manual
ASTEC-Bericht ASTECV0/DOC/01-34, GRS Köln, 2001

- /KLE 06/ Klein-Heßling Walter, et. al.
 Evaluation of Fire Models for Nuclear Power Plant Applications, Benchmark Exercise No. 4: Fuel Pool Fire inside a Compartment, International Panel Report, GRS-213, ISBN 978-3-931995-80-5, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, November 2006
- /KLE 08/ Klein-Heßling, W. et. al.
 COCOSYS V2.4 User's Manual
 in Vorbereitung, <http://quickplace.grs.de/astrid1>
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH,
 November 2008
- /KLI 00/ Klimm, M., Preusser, G.
 Rechenprogramm WAVCO, Benutzerhandbuch
 KWU NDS2/00/1003.a, Siemens, Mai 2000
- /KRI 04/ Krieger, H.
 Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlungsschutzes
 Teubner Verlag 2004
- /KUP 92/ Kupferschmidt, W. C. H. ; Evans, G. J. ; Koroll, G. W. ; Buttazoni, J. B. ; Greig, D. R. ; Harris, D. R. ; Sanipelli, G. G.
 The Effects of Steam on the Oxidation of Cesium Iodide Aerosol during Hydrogen Combustion
 ACE-TR-B8, Whiteshell Laboratories, 1992
- /LAN 96/ Langhans J.
 Qualitätssicherungshandbuch für COCOSYS, GRS-A-2357,
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Juli 1996
- /LAN 08/ Langrock, G.
 Konsistente Modellierung der Iod/Stahl- und Iod/Dekontanstrich-Wechselwirkungen in den THAI-Versuchen
 (Diplomarbeit Herr Sebastian Ludwiger, Universität Erlangen-Nürnberg, August 2007 - März 2008)
 Arbeitsbericht NTCR-G/2008/de/0076
 AREVA NP, Erlangen, 6.3.2008

- /LUT 06/ Luther, W.
ASTECV1.3 Code. PROCO User Manual
ASTEC-Bericht ASTECV1/DOC/06-22, GRS Köln, 2006
- /MCC 83/ McCaffrey, B. J.
Momentum Implications for Buoyant Diffusion Flames,
Combustion and Flame 52, 149 (1983)
- /NEL 85/ Nelson, L. S.; Benedick, W. B.; Einfeld, W.; Guay, K. P.; Valdez, G. D.; Lee, J. H.; Knystautas, R.; Fresko, M.; Gaug, M.
The Behaviour of Reactor Core-Simulant Aerosols During Hydrogen/Air Combustion
SAND85-1817C, Sandia National Laboratories, Albuquerque. 1985
- /NOW 07/ Nowack H., Arndt, S.
Post-calculation of the GKSS M1 test with COCOSYS
RS1170: "Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie generische Anwendungsrechnungen mit diesen Rechenprogrammen"
GRS-A-3390, October 2007
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
- /NOW 08/ Nowack, H.
Aerosolverhalten im Sicherheitsbehälter beim Einsatz von Rekombinatoren und nach Wasserstoffverbrennungen
Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 2008
- /OWC 91/ Owczarski, P. C., Burk, K. W.
SPARC-90: A Code for Calculating Fission Product Capture in Suppression Pools
US-NRC Report, NUREG/CR-5765
1991
- /PAI 06/ Pailhories, P.
ASTECV1.3 – PROCO Module, Description of Models of Hydrogen Combustion in Containment
ASTEC-Bericht ASTECV1/DOC/06-31, IRSN, 2006

- /PEA 97/ Peatross, M. J., Beyler, C. L.,
Ventilation effects on compartment fire characterisation, 5th International Symposium on Fire Safety Science, International Association of Fire Safety Science, pp 403-414, 1997
- /PET 97/ Peters, N.
New Developments in the Theory of Premixed Turbulent Combustion, Cours sur la Combustion Turbulente, Institut de l'Ecole Normale Supérieure, Paris - 28 Octobre 1997
- /QUI 84/ Quintiere, J. G., Steckler, K., Corley, D.
An Assessment of Fire Induced Flows in Compartments, Fire Science and Technology 4, 1 (1984)
- /RIE 06/ Riese, O. et. al.
Evaluation of Fire Models for Nuclear Power Plant Applications, Benchmark Exercise No. 5: Flame Spread in Cable Tray Fires, International Panel Report, GRS-214, ISBN 978-3-931995-81-2, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, November 2006
- /ROW 08/ Röwekamp, Marina et. al.
International Collaborative Fire Modeling Project (ICFMP), Summary of Benchmark Exercises No. 1 to 5, ICFMP Summary Report, GRS-227, ISBN 978-3-939355-01-4, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, September 2008
- /SAB 05/ Sabroux, J. C. ; Deschamps, F.: Iodine chemistry in hydrogen recombiners. EUROSAFE FORUM 2005, Brüssel, 2005
- /SAI 88/ Said, R. and Borghi, R.
A Simulation with a Cellular Automation for Turbulent Combustion Modeling
22nd Symposium (Int.) on Combustion, University of Washington - Seattle, USA, 1988

- /SCH 93/ Schmitt, R. E. ; Fiedler, M. ; Friehmelt, V. ; Poss, G. ; Schachtebeck, G. ; Schüller, M. ;Wandzilak, L.
Experimentelle Untersuchung über das Verhalten von CsI bei H₂- Verbrennung
BF-R67.818, Battelle. 1993
- /SCH 99/ Scholtyssek, W.
Integral Large Scale Experiments on Hydrogen Combustion for Severe Accident Code Validation
Forschungszentrum Karlsruhe, FIKS-CT1999-00004, 1999
- /SCH 03/ Schneider, R.
Resuspension von Aerosolen durch transiente Strömungen im Containment
Lehrstuhl für Thermodynamik, TU-München, 2003
- /SCH 03b/ Schmitz, B.M.
COCOSYS/SPARC-B/98: Nachrechnung der POSEIDON-Testserie PA-06 bis PA-21
Technische Notiz TN-SMZ-03-1 (*Draft*)
GRS mbH, September 2003
- /SCH 05/ Schmitz, B.M.
COCOSYS/SPARC-B: 3. Korrektur des Einspeisemodells für das Tauchrohr
Technische Notiz TN-SMZ-05-1, Dezember 2005
- /SCW 08/ Schwinges, B. et al.
Ranking of Severe Accident Research Priorities, Paper n°S5-1, 3rd European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR 2008), Bulgaria, 23-25 September 2008
- /SCW 08a/ Schwinges, B. et al.
Final Evaluation of Severe Accident Research Priorities and Proposed Research Activities, SARNET Report SARNET-SARP D96, Aug. 2008

- /SER 04/ Seropian, C., Pailhories, P., Van Dorsselaere, J. P.
Simplified ASTEC Modelling of Hydrogen and Carbon Monoxide Combustion in Containment, Rev. 0, ASTEC-V1/DOC/04-22.
- /SER 05/ Seropian, C., Bentaib, A., Bleyer, A.
Detailed Specification of PROCO Implementation in ASTEC V1
- /SON 98/ Sonnenkalb, M.
Unfallanalysen für DWR mit dem Integralcode MELCOR 1.8.3
GRS-A-2579. 1998
- /SON 06/ Sonnenkalb, M. et al.
Erprobung und Bewertung der Methoden einer PSA für SWR Anlagen der Baulinie 69 nach Stand von Wissenschaft und Technik (PSA SWR 69),
Fachband 3 - Integrale deterministische Unfallanalysen mit MELCOR für die PSA der Stufe 2 aus dem Leistungsbetrieb
GRS-A-3294, April 2006
- /SPE 04/ Spengler, C. et al.
Blind Benchmark Calculations for Melt Spreading in the ECOSTAR Project
Proceedings of ICAPP '04, Pittsburgh 2004.
- /SPE 08/ Spengler, C., Meyer, L., Meignen, R.
Investigations of Direct Containment Heating (DCH) in European Reactors:
Database of Integral Tests and Progress in Modeling
Paper No. 3.5, 3rd European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2008), Nesseber, Vigo Hotel, Bulgaria, 2008
- /SPE 08b/ Spengler, C.,
A Criterion for Estimating the Efficiency of Core Melt Spreading for Application in ASTEC with View to the EPR Core Catcher Based on Self-Similar Solutions for Gravity Flows
ASTEC/DOC/08-09, GRS Köln, 2008

- /TUS 06/ Tusheva, P., Reinke, N.
Comparative Analyses of Thermal Hydraulic Behaviour for VVER-1000/V-320 Station Blackout Accident Scenario with ASTEC v1.2.1 and ATHLET 1.2a
SARNET mobility report:
http://sarnet.grs.de/sites/WP4/Shared%20Documents/ASTEC%20V1.2%20RAB%20detailed%20reports/Tusheva_mobility_report.pdf
Cologne, September 2006
- /WEB 99/ Weber, G.
Description of the Aerosole Models in the Containment Part of ASTEC (CPA)
ASTEC-Bericht ASTECV0/DOC/99-20, GRS Köln, 1999
- /WEB 00/ Weber, J. P. et al.
Unterstützende Arbeiten und Analysen zur sicherheitstechnischen Bewertung der Kernkraftwerke mit RBMK-Reaktoren
Langfristprogramm RBMK, Vorhaben SR 2333
Zwischenbericht für den Zeitraum 01.02.1999 bis 30.09.2000
GRS-A-2878, September 2000
- /WEB 06/ Weber, G., Allelein, H.-J., Funke, F., Kanzleiter, T.
COCOSYS and ASTEC Analyses of Iodine Multi-Compartment Tests in the THAI Facility
ICONE 14, Miami, USA, July 17-20, 2006
- /WEB 07/ Weber, G.
Description of the Iodine Model AIM-F2 in COCOSYS
GRS, TN-WEG-01/2007, Juni 2007
- /WEB 08/ Weber, G., Bosland, L., Funke, F., Glowa, G., Kanzleiter, T.
ASTEC, COCOSYS, and LIRIC Interpretation of the Iodine Behaviour in the Large-Scale THAI Test Iod-9
To be published at the ICONE-17 conference, May 2009

/WEB 08a/ Weber, G.

ASTEC and COCOSYS Comparative Calculations on the Iodine Behaviour
in PHEBUS FPT1

PHEBUS-FP CCIC Meeting, Hotel Aquabella, Aix-en-Provence, 16th October
2008

/WEB 09/ Weber, G., Funke, F.

Description of the Iodine Model AIM-3 in COCOSYS

Technischer Bericht GRS - A - 3508, GRS Köln, 2009

/WON 88/ Wong, C. C.

HECTR Analyses of the Nevada Premixed Combustion Experiments

Sandia National Laboratory, 1988Verteiler

11 Verteil

BMWi

Referat III B 4 1 x

GRS-PT/B

Internationale Verteilung 40 x

Projektbegleiter (seh) 3 x

GRS

Geschäftsführung (hah, stj) je 1 x

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

Abteilungsleiter (gls, poi, paa, som) je 1 x

Projektleiter (spc) 1x

Projektbetreuung (kgl) 1 x

Informationsverarbeitung (nit) 1 x

Bibliothek (Garching, Köln) je 1 x

Autoren (spc, arn, noh, klh, luw, ren, smm, weg
scw, scz) je 1 x

Gesamtauflage: 71 Exemplare