



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) mbH

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse von Ergebnissen der Nachrechnung des PHÉBUS Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD

Vorhaben RS1173

Validierung des
Rechenprogrammsystems
ATHLET / ATHLET-CD

Technischer Bericht/ Technical Report

Reaktorsicherheitsforschung-Vorhabens
Nr.:/
Reactor Safety Research-Project No.:
RS1173

Vorhabentitel / Project Title:
Validierung des Rechen-
programmsystems ATHLET /
ATHLET-CD

Validation of the computer
code system ATHLET /
ATHLET-CD

Berichtstitel:
Unsicherheits- und Sensitivi-
tätsanalyse von Ergebnissen
der Nachrechnung des PHÉBUS
Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD

Autor / Authors:
H. Austregesilo
B. Krzykacz-Hausmann
T. Skorek
S. Weber

Berichtszeitraum / Publication Date:
Februar 2010

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1173 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Kurzfassung

Im Rahmen des Forschungsvorhabens RS1173 werden im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie analytische Arbeiten zur Validierung des weiterentwickelten Rechenprogrammsystems ATHLET/ATHLET-CD anhand von internationalen Integral- und Einzeleffektversuchen durchgeführt.

Der vorliegende Bericht beschreibt eine Nachrechnung des PHÉBUS Versuchs FPT3 mit der aktuellen Version des Rechenprogramms ATHLET-CD (ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A). Dieser Bündelversuch dient der Untersuchung der Bündelzerstörung und der Materialverlagerung mit der damit verbundenen Freisetzung von Spaltprodukten sowie mit dem Transport, der Ablagerung und der Rückhaltung im Kühlkreislauf und im Sicherheitsbehälter. Im Gegensatz zu früheren PHÉBUS-Versuchen wurde bei FPT3 Borkarbid anstatt Silber-Indium-Cadmium als Absorbermaterial verwendet.

Diese Nachrechnung wurde durch eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ergänzt. Ziel war es, den Einfluss einer kombinierten Variation der Eingabeparameter auf die Güte der Simulation der experimentell beobachteten Phänomene zu untersuchen und auszuwerten. Dabei wurden multiple Sensitivitätsmaße berechnet, welche eine Gegenüberstellung und einen quantitativen Vergleich des Einflusses von modellbedingten und versuchsbedingten Unsicherheiten ermöglichen.

Die Ergebnisse dieser Unsicherheitsanalyse bestätigen, dass die wesentlichen physikalischen Vorgänge hinsichtlich der Bündelzerstörung von ATHLET-CD nachgebildet werden können. Die entsprechenden Messwerte liegen weitgehend innerhalb der Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse.

Zur Gesamtunsicherheit der Rechenergebnisse tragen maßgeblich die gewählte Nodalisierung im Bündelbereich, die Beschreibung der Wärmeübertragung durch Dampfkonvektion und die Temperaturkriterien zur Schmelzebildung (modellbedingte unsichere Eingabeparameter) sowie die Bündelleistung und die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht in der Bündelumfassung (versuchsbedingte unsichere Parameter) bei. Insgesamt zeigt sich die Anwendung von Methoden der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse als eine wertvolle Ergänzung zum Validierungsprozess eines Rechenprogrammes.

Abstract

In the frame of the reactor safety project RS1173, sponsored by the German Federal Ministry of Economics and Technology, analyses of international integral and separate effects tests are performed for the validation of the code system ATHLET/ATHLET-CD.

This technical report describes the post-test calculation of the PHÉBUS experiment FPT3 with the current version of the computer code ATHLET-CD (ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A). Main objective of this test was the investigation of bundle degradation phenomena and the behaviour of the fission products released in the reactor coolant system and in the containment, using boron carbide as absorber material instead of Silver-Indium-Cadmium.

The post-test calculation of this test was complemented by an uncertainty and sensitivity analysis of the calculated results. The main goal was to investigate the influence of a combined variation of input data upon the simulation of the main phenomena observed experimentally. In this analysis multiple sensitivity coefficients have been derived, allowing a comparison between the influences due to modelling uncertainties and those due to experimental uncertainties.

The results of the uncertainty analysis endorse the code capability to reproduce adequately the main experimental outcomes with respect to the bundle degradation. The measured values lay mostly within the tolerance limits of the calculated results.

The main contributions to the global uncertainty of calculated results are the axial nodalization applied for the active bundle region, the modelling of heat transfer by convection to overheated steam and the temperature criteria for melt initiation (modelling uncertainties) as well as the bundle power and the temperature dependent heat conductivity of the Zirconia layer within the bundle shroud (experimental uncertainties).

The application of methods of uncertainty and sensitivity analyses to validation calculations is a valuable complement to the assessment and validation process of a computer code.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Der Versuch PHÉBUS FPT3	2
2.1	Die PHÉBUS Versuchsanlage	2
2.2	Ablauf des Versuchs FPT3	3
3	Nachrechnung des Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD (Referenzrechnung)	7
3.1	Entwicklungsstand des Rechenprogramms ATHLET-CD	7
3.2	Beschreibung des Eingabedatensatzes	9
3.3	Darstellung und Diskussion der Rechenergebnisse.....	11
3.3.1	Temperaturen.....	11
3.3.2	Oxidation und Wasserstoffproduktion	12
3.3.3	Schmelzverhalten.....	13
3.3.4	Spaltproduktfreisetzung und -transport	14
3.4	Zusammenfassende Bewertung	15
4	Anwendung der GRS-Methode zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse	30
4.1	Methodologie.....	30
4.2	Auswahl der unsicheren Parameter und Quantifizierung des Kenntnisstandes.....	35
4.2.1	Modellbedingte unsichere Parameter	35
4.2.2	Versuchsbedingte unsichere Parameter	36
4.3	Durchführung der Unsicherheitsrechnungen mit ATHLET-CD und Auswahl der Ergebnisgrößen zur Unsicherheitsanalyse.....	43
5	Darstellung und Diskussion der Ergebnisse	46
5.1	Einzelergebnisse	46
5.1.1	Ablauf der Bündelzerstörung.....	47
5.1.2	Oxidationsprozesse.....	49

5.1.3	Freisetzung von Spaltprodukten	50
5.1.4	Jod-Transport im Kühlkreislauf	51
5.2	Zeitabhängige Ergebnisgrößen	66
5.2.1	Thermisches Verhalten	67
5.2.2	Oxidationsprozesse.....	69
5.2.3	Freisetzung von Cäsium	72
6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	88
7	Literatur.....	92
8	Verteiler	97

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1	Wichtige experimentelle Ereignisse während des Versuchs FPT3.....	5
Tabelle 3-1	Standardwerte von wesentlichen Eingabeparametern	16
Tabelle 3-2	Zeitverlauf der wesentlichen Ereignisse im Versuch FPT3.....	18
Tabelle 3-3	Relative Freisetzung in Simulation und Experiment	18
Tabelle 4-1	Unsichere Eingabe-Parameter zur Nachrechnung des PHÉBUS Versuchs FPT3	38
Tabelle 4-2	Ausgewählte skalare Ergebnisgrößen	44
Tabelle 4-3	Ausgewählte zeitabhängige Ergebnisgrößen	45

Bildverzeichnis

Bild 3-1: ATHLET-CD Modellierung der PHÉBUS-Teststrecke	19
Bild 3-2: Nodalisierung im Bündelbereich	19
Bild 3-3: Bündelleistung	20
Bild 3-4: Temperaturen in 200 mm Höhe	20
Bild 3-5: Temperaturen in 300 mm Höhe	21
Bild 3-6: Temperaturen in 400 mm Höhe	21
Bild 3-7: Temperaturen in 500 mm Höhe	22
Bild 3-8: Temperaturen in 600 mm Höhe	22
Bild 3-9: Temperaturen in 700 mm Höhe	23
Bild 3-10: Temperaturen in 800 mm Höhe	23
Bild 3-11: Temperaturen in 900 mm Höhe	24
Bild 3-12: Temperaturen in 1061 mm Höhe	24
Bild 3-13: Hüllrohrtemperaturen im inneren Ring.....	25
Bild 3-14: Massenströme am Bündelein- und –austritt	25
Bild 3-15: Integrierte Wasserstofferzeugung und Borkarbidoxidation	26
Bild 3-16: Gesamte Freisetzung von CO, CO ₂ und CH ₄ im Bündel	26
Bild 3-17: Schmelzen- und Krustenmassen der Brennstäbe	27
Bild 3-18: Bündelkonfiguration zu Versuchsende	27
Bild 3-19: Axiale Massenverteilung im Bündel bei der Kernabschaltung (17500 s).....	28
Bild 3-20: Gesamte relative Freisetzung von ausgewählten Spaltprodukten.....	28
Bild 3-21: Gesamte relative Freisetzung von ausgewählten Spaltprodukten.....	29
Bild 3-22: Gesamte relative Freisetzung von Uran, Zirkonium, Zinn und Rhenium	29
Bild 5.1-1a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens	54
Bild 5.1-1b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens.....	54
Bild 5.1-1c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens.....	54
Bild 5.1-2a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs.....	55
Bild 5.1-2b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs	55

Bild 5.1-2c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs	55
Bild 5.1-3a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze	56
Bild 5.1-3b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze	56
Bild 5.1-3c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze	56
Bild 5.1-4a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze.....	57
Bild 5.1-4b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze.....	57
Bild 5.1-4c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze.....	57
Bild 5.1-5a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze.....	58
Bild 5.1-5b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze	58
Bild 5.1-5c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze ..	58
Bild 5.1-6a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete gesamte Wasserstofferzeugung	59
Bild 5.1-6b: Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstofferzeugung.....	59
Bild 5.1-6c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstofferzeugung.....	59
Bild 5.1-7a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid	60
Bild 5.1-7b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid.....	60
Bild 5.1-7c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid.....	60
Bild 5.1-8a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Xe- Freisetzung	61
Bild 5.1-8b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Xe-Freisetzung	61
Bild 5.1-8c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Xe-Freisetzung	61
Bild 5.1-9a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Ba- Freisetzung	62
Bild 5.1-9b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Ba-Freisetzung	62
Bild 5.1-9c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Ba-Freisetzung	62

Bild 5.1-10a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete U-Freisetzung	63
Bild 5.1-10b: Sensitivitätsmaße für die berechnete U-Freisetzung	63
Bild 5.1-10c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete U-Freisetzung.....	63
Bild 5.1-11a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment	64
Bild 5.1-11b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment.....	64
Bild 5.1-11c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment	64
Bild 5.1-12a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment	65
Bild 5.1-12b: Sensitivitätsmaße für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment	65
Bild 5.1-12c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment	65
Bild 5.2-1a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter.....	74
Bild 5.2-1b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)	74
Bild 5.2-1c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm.....	75
Bild 5.2-1d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm	75
Bild 5.2-1e: Sobol'sche multiple Sensitivitätsindizes für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm.....	76
Bild 5.2-2a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Temperatur der Bündelumfassung in der Höhe 300 mm unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter	77
Bild 5.2-2b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Temperatur der Bündelumfassung in der Höhe 300 mm (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)	77
Bild 5.2-2c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete Shroud-Temperatur in der Höhe 300 mm.....	78
Bild 5.2-2d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Shroud-Temperatur in der Höhe 300 mm	78

Bild 5.2-3a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Wasserstoffmasse unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter	79
Bild 5.2-3b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Wasserstoffmasse (nur mit experimentellen unsicheren Parametern).....	79
Bild 5.2-3c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte Wasserstoffmasse	80
Bild 5.2-3d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstoffmasse	80
Bild 5.2-4a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten H ₂ -Erzeugungsrate unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter	81
Bild 5.2-4b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten H ₂ -Erzeugungsrate (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)	81
Bild 5.2-4c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete H ₂ -Erzeugungsrate	82
Bild 5.2-4d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete H ₂ -Erzeugungsrate.....	82
Bild 5.2-4e: Sobol'sche multiple Sensitivitätsindizes für die berechnete H ₂ -Erzeugungsrate	83
Bild 5.2-5a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten CO-Masse unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter	84
Bild 5.2-5b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten CO-Masse (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)	84
Bild 5.2-5c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte CO-Masse.....	85
Bild 5.2-5d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte CO-Masse	85
Bild 5.2-6a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Cs-Freisetzung unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter	86
Bild 5.2-6b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Cs-Freisetzung (nur mit experimentell unsicheren Parametern).....	86
Bild 5.2-6c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte Cs-Freisetzung	87
Bild 5.2-6d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Cs-Freisetzung	87

1 Einleitung

In einer Validierungsrechnung wird die Übereinstimmung mit Messwerten eines Experiments teilweise durch die Auswahl bestimmter Eingabeparameter oder durch Änderung von Modelloptionen erzielt. Diese Parameter müssen manchmal geändert werden, um unterschiedliche Experimente in der gleichen Versuchsanlage oder ein ähnliches Experiment in einer anderen Anlage in guter Übereinstimmung mit den Messwerten nachzurechnen. Die Aussagesicherheit der Rechenergebnisse kann im Rahmen dieses Validierungsprozesses nicht quantifiziert werden.

Als einen zusätzlichen Beitrag zur Erhöhung der Aussagesicherheit des Rechenprogramms wird die Anwendung von Methoden der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse auf Validierungsrechnungen angesehen. Damit können quantitative Aussagen über den gemeinsamen Einfluss von Unsicherheiten der Eingabeparameter und Modelloptionen (modellbedingte Unsicherheiten) sowie der versuchsbedingten Unsicherheiten (z. B. Anfangs- und Randbedingungen, Materialeigenschaften) auf die Rechenergebnisse ermittelt werden.

Die von der GRS entwickelte Methode zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurde exemplarisch auf eine Validierungsrechnung mit ATHLET-CD angewendet. Als Basis diente der Integralversuch FPT3, der im November 2004 in der französischen Versuchsanlage PHÉBUS durchgeführt worden ist.

Im vorliegenden Bericht werden zunächst die Versuchsanlage, der Versuch FPT3, das Rechenprogramm ATHLET-CD und der zur Nachrechnung verwendete Eingabedatensatz beschrieben. Im Kapitel 3 werden die wesentlichen Ergebnisse der Referenzrechnung zu diesem Versuch zusammenfassend dargestellt. Kapitel 4 beschreibt die Methodologie, die zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Rechenergebnisse verwendet wurde. Die Darstellung und Diskussion der wesentlichen Ergebnisse dieser Analyse folgen im Abschnitt 5. Der Bericht wird mit einer zusammenfassenden Bewertung abgeschlossen.

2 Der Versuch PHÉBUS FPT3

Das internationale PHÉBUS FP-Programm ist ein Versuchsprogramm zur Erforschung von Kernzerstörung und Spaltproduktfreisetzung bei schweren Störfällen in Leichtwasserreaktoren /CLE 03/. Die Versuche simulieren wesentliche Aspekte schwerer Störfälle, beginnend mit der Zerstörung eines nuklear beheizten Brennelementbündels (in-pile), weiterführend mit der Freisetzung von Spaltprodukten sowie deren Transport durch einen simulierten Reaktorkühlkreislauf, bis hin zur Freisetzung dieser Spaltprodukte in einen modellierten Sicherheitsbehälter eines Reaktors (Containment). Die dabei gewonnenen experimentellen Daten dienen der Untersuchung zusammenhängender Phänomene im Verlauf eines schweren Störfalls und der Validierung von Simulationsprogrammen wie ATHLET-CD.

2.1 Die PHÉBUS Versuchsanlage

Die Versuchsanlage PHÉBUS befindet sich in Cadarache (Frankreich) und wird vom Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) betrieben. Abbildung 2.1 zeigt schematisch den Aufbau der Anlage, die das Primärkühlsystem und den Sicherheitsbehälter eines 900 MWe Druckwasserreaktors (DWR) im Maßstab 1:5000 simuliert, bestehend aus der Neutronenquelle (Treiber-Core), der Versuchskapsel mit Testbündel, den Kühlkreislaufkomponenten und der 10 m³ großen Nachbildung des Sicherheitsbehälters /BIA 07/.

Das 1 m lange Testbündel selbst ist aus 20 Brennstäben mit Zircaloy-Hüllrohren aufgebaut, von denen zwei neu sind und 18 bereits vorbestrahlt /PHE 02/. In der Mitte der Anordnung befindet sich außerdem ein Steuerstab mit Borcarbid (B₄C) als Absorbermaterial in einem Zircaloy-4-Führungsrohr (Abb. 2.2). Die Abstandshalter bestehen ebenfalls aus Zircaloy-4. Das Testbündel wird von einem inneren Schutzrohr aus ThO₂ und ZrO₂, einem äußeren Schutzrohr aus ZrO₂ und einem Druckrohr aus Inconel 625 umfasst. Das Testbündel wird mit Wasser gekühlt.

Der Kühlkreislauf besteht aus einem etwa 9 m langen heißen Strang, einem U-förmigen Dampferzeuger und einem etwa 4 m langen kalten Strang. An diesen ist das zylindrische Containment angeschlossen, welches ein Volumen von 10 m³ hat. Es enthält beheizbare Kondensatoren zur Simulation der Wärmekapazität von Wänden und

Einbauten und besitzt an der Unterseite einen Sumpf. Die Temperatur der Behälterwände lässt sich mithilfe verschiedener Heiz-/Kühlsysteme steuern.

2.2 Ablauf des Versuchs FPT3

Die ersten Versuche des PHÉBUS FP Programms, bestehend aus den drei Experimenten FPT0, FPT1 und FPT2, ermöglichten die Erforschung der Einflüsse von Bestrahlung und Dampfverfügbarkeit auf die Zerstörung der Brennelemente sowie auf die Freisetzung und den Transport von Spaltprodukten. Außerdem konnte das Verhalten dieser Spaltprodukte im Containment untersucht werden. Bei den drei Versuchen wurden Kontrollstäbe mit Silber-Indium-Cadmium-Legierungen verwendet.

Im Versuch FPT4 wurde statt des Brennstabbündels ein Partikelbett aus abgebranntem Brennstoff und oxidierten Hüllrohrfragmenten eingesetzt.

Mit dem Versuch FPT3 wurde der Einfluss von Borkarbid-Kontrollstäben auf die Kernzerstörung und auf das Verhalten von Spaltprodukten untersucht. Dabei wurde vor dem Versuch das Testbündel 8,5 Tage vorbestrahlt, um kurzlebige Spaltprodukte zu erzeugen /BIA 07/.

Der eigentliche Versuch lässt sich in zwei Phasen aufteilen: die Kernzerstörungsphase und die chemische Phase. In der ersten Phase, die fünf Stunden andauerte und während der die Temperatur auf bis zu 2500 °C erhöht wurde, schmolz das Kernmaterial, was zu einer Freisetzung von Spaltprodukten und deren Transport in das Containment führte. Am Ende dieser Phase wurde der PHÉBUS-Reaktor schließlich heruntergefahren. Die anschließende chemische Phase dauerte vier Tage. Während dieser Zeit wurden wichtige Daten gemessen, welche zu einem besseren Verständnis des Spaltprodukttransports und von Depositionsphänomenen führen. Ein weiterer wesentlicher Punkt war dabei die Untersuchung der Iod-chemischen Vorgänge im Containment.

Der genaue Ablauf der Kernzerstörungsphase ist in Abb. 2.3 dargestellt /BIA 07/. Das Experiment startet zum Zeitpunkt 0 s und wird im Wesentlichen durch Steigern der Leistung über die vier Plateaus P1 bis P4 gesteuert. Dabei sind folgende Abschnitte zu beobachten:

- Kalibrierung (0 bis 7920 s)
- Voroxidation (7920 bis 8640 s)

- Oxidation (8640 bis 11100 s)
- Plateau 4 (11100 bis 15500 s)
- Aufheizen (15500 bis 17370 s)
- Abkühlen (ab 17370 s)

Die Abschaltung des Reaktors wurde nach 17370 s eingeleitet, Messwerte wurden jedoch noch bis 18500 s aufgezeichnet. Tabelle 2.1 fasst die einzelnen Ereignisse während des Experiments in chronologischer Reihenfolge zusammen /BIA 07/, /DRA 07/, /LUZ 06/.

Während der Kalibrierungsphase wurden die Versuchsbedingungen eingestellt und die Instrumentierung überprüft. Bereits in dieser Phase versagten die Hüllrohre der Brennstäbe und es kam zu ersten Spaltproduktfreisetzungen. In der Voroxidationsphase kam es zur exothermen Zirkoniumoxidation. In der darauf folgenden Oxidationsphase wurde die Leistung weiter erhöht, so dass es zur Beschädigung des Absorberstabes kam. Die Hüllrohroxidation, die von der Mitte nach unten und anschließend wieder nach oben wanderte, führte zu einer Temperatureskalation mit deutlichen Temperaturpeaks. Danach sank die Temperatur wieder, bis die Aufheizung durch die Bündelleistung wieder dominiert. Während der Plateauphase wurde die Leistung in zwei Schritten erhöht und die Temperatur stieg infolge der Leistungssteigerung langsam an. Bereits in dieser Phase kam es zu ersten Materialverlagerungen. Die anschließende Aufheizphase mit kontinuierlicher Leistungssteigerung sollte erreichen, dass die Schmelztemperatur des Brennstoffes überschritten und weitere Schmelze verlagert wird. Danach erfolgte die Abschaltung des Treiberkerns und die Abkühlungsphase setzte ein.

Die endgültigen Versuchsergebnisse sind noch nicht veröffentlicht, so dass Simulationsergebnisse im Rahmen dieses Berichts lediglich mit vorläufigen experimentellen Daten /BIA 07/ verglichen werden können, die gerade bei den Spaltproduktfreisetzungen noch Unsicherheiten aufweisen.

Tabelle 2-1 Wichtige experimentelle Ereignisse während des Versuchs FPT3

Zeitpunkt [s]	Ereignis
0	Beginn des Experiments
4870	erstes Hüllrohrversagen auf 500 mm Bündelhöhe
8560	Beginn der Voroxidation
9550	Kontrollstabversagen
9840	Beginn der Oxidationsexkursion
11100	Beginn der Plateauphase
11530	erste Detektion von Gasprodukten am Bündel
14100 - 14500	erste signifikante Materialverlagerung
16620	erste Progression von Schmelze über dem unteren Abstandshalter
17330	zweite Progression von Schmelze über dem unteren Abstandshalter
17370	Beginn des Abschaltens des Reaktors

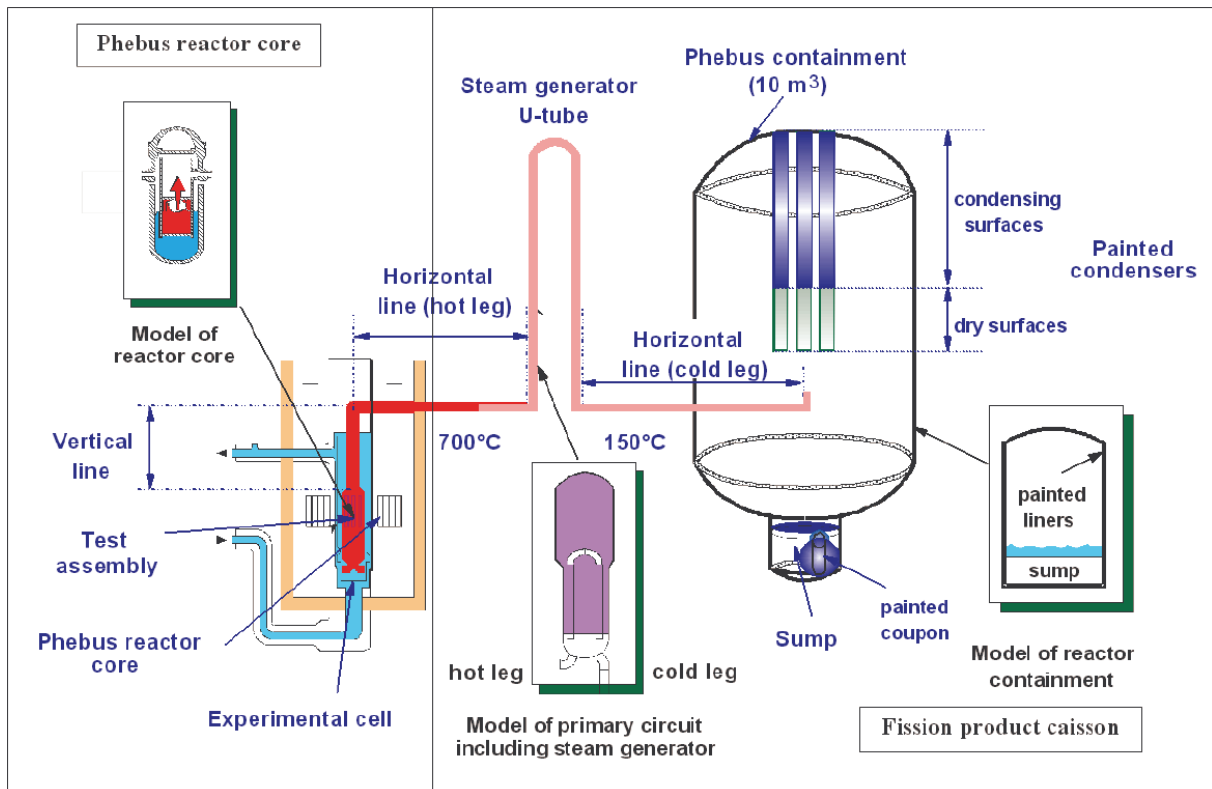


Bild 2-1: Aufbau der PHÉBUS-Versuchsanlage

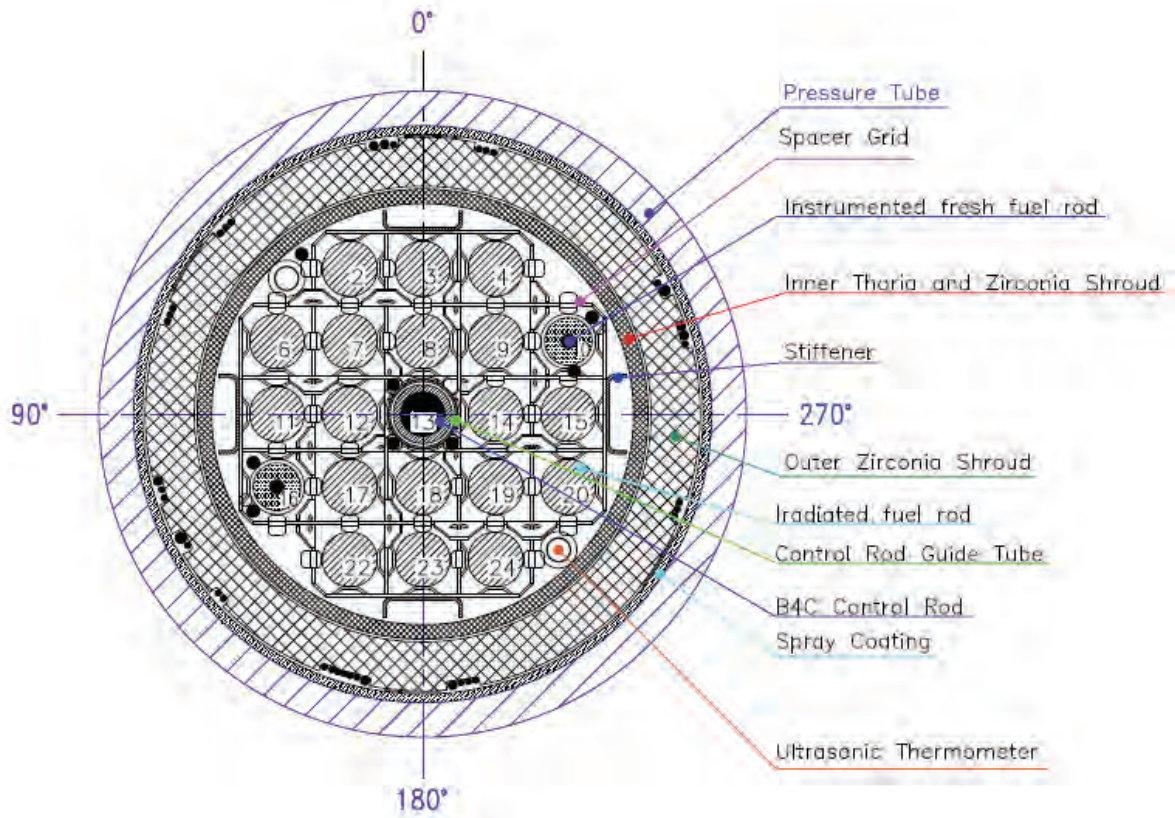


Bild 2-2: Bündelquerschnitt

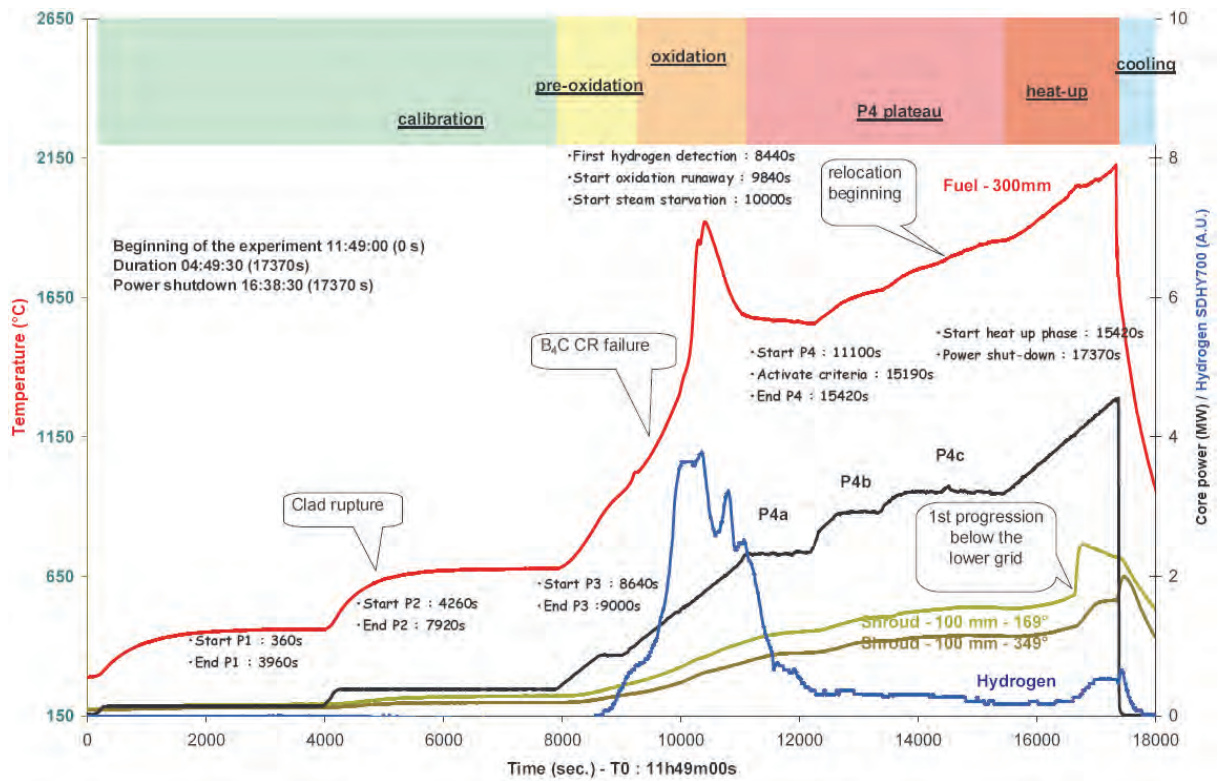


Bild 2-3: Ablauf des Versuchs PHÉBUS FPT3

3 Nachrechnung des Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD (Referenzrechnung)

3.1 Entwicklungsstand des Rechenprogramms ATHLET-CD

Zur Simulation von Störfallabläufen im Rahmen von Sicherheitsanalysen für Kernkraftwerke wird gefordert, deterministische Rechenprogramme einzusetzen, die nach Stand von Wissenschaft und Technik möglichst realistische Ergebnisse (best estimate) liefern. Diese Forderung wird sowohl für Auslegungsstörfälle als auch für auslegungsüberschreitende Stör- und Unfälle erhoben. Dabei stehen die Beherrschung von Störfällen und die Wirksamkeit von Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes bezüglich des Anlagenverhaltens und des Quellterms aus dem nuklearen Dampferzeugungssystem im Mittelpunkt des Interesses. Dafür werden die Rechenprogramme ATHLET (Analyse der Thermohydraulik von Lecks und Transienten) für Transienten und Störfälle ohne wesentliche Kernschäden und ATHLET-CD (Core Degradation) für Störfälle mit schweren Kernschäden entwickelt und validiert /TRA 09/.

Die Entwicklung und Einbindung von Modellen in ATHLET-CD erfolgt in enger Zusammenarbeit mit dem Institut für Kernenergetik und Energiesysteme der Universität Stuttgart (IKE). Durch die Modelle zur Bildung und Verlagerung metallischer und keramischer Schmelzen im Kernbereich und zum thermischen Verhalten von Partikelbetten, sowie zur Freisetzung von Spaltprodukten und Aerosolen im Kernbereich und zu deren Transport und Ablagerung im Kühlkreislauf wurde das Anwendungsspektrum des Rechenprogramms wesentlich erweitert. Dies wird durch erfolgreiche Nachrechnungen von Bündel- und Integralversuchen, wie z. B. QUENCH, LOFT-LP-FP2 und PHÉBUS FP, oder des TMI-2 Unfalls und des Störfalles in Paks-2 nachgewiesen /AUS 08, TRA 09/.

Die Entwicklung der verschiedenen Modelle orientiert sich an den Erfordernissen zur Simulation der Abläufe in einem Kernreaktor. Die ATHLET-CD-Struktur ist modular aufgebaut, um einerseits eine Vielzahl an Modellen für die Simulation anzubieten und andererseits eine günstige Plattform zur Weiterentwicklung zu schaffen.

Zur umfassenden Simulation der Thermo-Fluiddynamik im nuklearen Dampferzeugungssystem ist das Rechenprogramm ATHLET vollständig in ATHLET-CD eingebunden. ATHLET umfasst Module für die Thermo-Fluiddynamik (TFD), für die Wärmelei-

tung und Wärmeübertragung (HECU), für die Neutronen-Kinetik (NEUKIN), für die Steuerung und Regelung (GCSM) und zur Lösung der Differentialgleichungen (FEBE). Das TFD-Modul hat zwei unterschiedliche Gleichungssysteme zur Simulation der Fluidodynamik: ein 6-Gleichungsmodell mit vollständig separierten Erhaltungsgleichungen für die Wasser- und Dampfphase und ein 5-Gleichungsmodell mit nur einer Impulsgleichung für das Wasser-Dampf-Gemisch und einem allgemein gültigen Modell für die Relativgeschwindigkeit zwischen der Wasser- und der Dampfphase. Außerdem können in der Dampfphase bis zu fünf nicht kondensierende Gase und in der Wasserphase Bor und gelöster Stickstoff simuliert werden. Ferner stehen spezielle Modelle für Pumpen, Ventile, Separatoren, Gemischspiegel und kritische Ausströmung zur Verfügung.

Das Modul ECORE umfasst Modelle für Brennstäbe, Steuerelemente (Ag, In, Cd oder B₄C) und Brennelementkästen. Das Modul beschreibt das mechanische Brennstabverhalten (Ballooning), die Oxidation von Zirkonium in Dampf oder Dampf-Luft-Gemischen sowie von Borkarbid in Dampfumgebung anhand von Arrhenius-Gleichungen, die Auflösung von Brennstoff durch Zirkonium und von Borkarbid durch Stahl, sowie das Schmelzen von metallischen und keramischen Komponenten. Nach dem vollständigen Aufschmelzen einer Komponente in einer Zone wird die Schmelzeverlagerung durch mit konstanter Geschwindigkeit ablaufende Strahlen simuliert. Das Modell berücksichtigt Oxidation, Erstarren, Wiederaufschmelzen und Wiedererstarren sowie das Entstehen und Auflösen von Blockaden. Der Dampf- oder Sauerstoffverbrauch und die Wasserstoffherzeugung durch die Oxidation sowie Strömungsblockaden werden im Fluidynamik-Modell berücksichtigt. Neben der konvektiven Wärmeübertragung wird auch Wärmestrahlung zwischen den Brennstäben und der Kernumgebung modelliert. Umgebende Kernstrukturen und Abstandshalter werden mit dem Modul HECU (Wärmeübergang und -leitung) modelliert, wobei Oxidationsvorgänge bis zum Erreichen der Schmelztemperatur, nicht aber Abschmelz- und Verlagerungsvorgänge simuliert werden können.

Das Modul FIPREM beschreibt die Spaltprodukt- und Aerosolfreisetzung anhand von Arrhenius-Gleichungen. Für die Spaltproduktfreisetzung steht auch ein Diffusionsmodell zur Verfügung. Die Freisetzung von Absorbermaterial (Ag, In, Cd) wird über den Partialdruck als Funktion der Absorbtemperatur berechnet. Die Bildung chemischer Verbindungen sowie der Transport und die Rückhaltung der Spaltprodukte und Aerosole werden mit dem Programm SOPHAEROS simuliert, das vom Institut de

Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN) entwickelt wird. Durch eine Vorausrechnung kann bei vorgegebener Reaktorleistungshistorie der Kernabbrand (OREST) bestimmt werden. Durch die Kopplung zwischen Spaltprodukttransport und radioaktivem Zerfall (FIPISO) kann die örtliche und zeitliche Entwicklung des Spaltproduktinventars (Massenanteil, Zerfallsleistung und Aktivität) verfolgt werden.

Das Programmsystem ATHLET/ATHLET-CD ist außerdem mit dem Containment Code System COCOSYS gekoppelt und wird als wesentliches Prozessmodell für Kernreaktoren in dem interaktiven Analysesimulator ATLAS verwendet.

Die Modelle zur Simulation der späten Phasen eines schweren Unfalls sind noch in der Entwicklung. Sie sollen das thermische Verhalten einer Partikelschüttung mit Schmelzen, Erstarren, Quenchen und Verlagerung in das untere Plenum, sowie das Versagen des Reaktordruckbehälters beschreiben. Das Modul MEWA zur Simulation der Partikelschüttung ist bereits in ATHLET-CD implementiert. Es hat seine eigene Fluid-dynamik für die Strömung in porösen Medien und ist an den Rändern mit der ATHLET-Fluiddynamik gekoppelt. Der Übergang von der nahezu intakten Kerngeometrie (ECORE) zur Partikelschüttung (MEWA) erfolgt abhängig vom lokalen Grad der Kernzerstörung.

Für die hier beschriebene Analyse wurde die Version ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A (Freigabedatum: März 2009) verwendet. Neben der Simulation der Thermohydraulik mit ATHLET wurden auch die ATHLET-CD Module Ecore, FIPREM und SOPHAEROS angesprochen.

3.2 Beschreibung des Eingabedatensatzes

Als Referenzrechnung für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse diente eine Versuchsnachrechnung, die im Rahmen der Code-Validierung durchgeführt worden ist /WEB 09/. Der dazu gehörende Eingabedatensatz basiert weitgehend auf dem Datensatz, der zur Nachrechnung des Versuchs FPT2 verwendet wurde /TRA 08/. Die einzigen wesentlichen Änderungen beziehen sich auf die Modellierung des Absorberstabs aus Borkarbid und der inneren Schicht aus ThO₂ im unteren Bereich der Bündelumfassung (Shroud), sowie auf die Eingabe der Randbedingungen des Versuchs FPT3.

Die Nodalisierung der Teststrecke ist in Abb. 3-1 dargestellt. Die für die Rechnung erforderlichen Komponenten der Teststrecke werden in ATHLET-CD durch mehrere Thermofluid-Objekte (TFO's) modelliert: der Hauptströmungskanal (BUNDLE) mit dem Testbündel, das Plenum (PLENUM), der heiße Strang (HOTPIP), der Dampferzeuger (STGEN), der kalte Strang (COLPIP) und das Containment (CONTAN). Die modellierten Komponenten sind noch jeweils in einzelne Volumina oder Zonen unterteilt: PLENUM (6 Zonen), HOTPIP (8 Zonen), STGEN (11 Zonen), COLPIP (5 Zonen), CONTAN (1 Zone).

Abb. 3-2 zeigt im Detail die Nodalisierung des Testbündels mit der axialen Unterteilung in 26 Zonen, von denen 21 im Bereich des Brennstoffmaterials liegen, 3 unterhalb und 2 oberhalb davon.

Das Testbündel wird durch zwei thermohydraulische Kanäle sowie zwei Brennstabringe modelliert. Der Hauptströmungskanal wurde entsprechend der Zahl der Brenn- und Absorberstäbe in zwei Parallelkanäle (BUNDLE und OUTER) mit dem Flächenverhältnis 0,43/0,57 unterteilt. Beide Parallelkanäle sind auf der gesamten Länge durch horizontale Querkanäle (IN-OUTER) verbunden. Der erste Brennstabring (ROD1) enthält die acht inneren Brennstäbe sowie den zentralen Steuerstab aus Borkarbid, der zweite Brennstabring (ROD2) die äußeren zwölf Brennstäbe, darunter die beiden frischen Stäbe. Weitere Komponenten in der Simulation sind die untere Bündelumfassung (BOTTOM), die Versteifungselemente (BUNDLE-S01 bis -S21) und die eigentliche Bündelumfassung bzw. der Shroud (BUNDLE-W01 bis -W23). Letzterer wird entsprechend des Versuchsaufbaus mit drei ringförmigen Materialzonen modelliert, die jeweils wiederum radial unterteilt sind: das innere Schutzrohr aus ThO_2 und ZrO_2 , die Wärmedämmung aus porösem ZrO_2 und das Druckrohr aus Inconel 625. Zwischen den Materialzonen befinden sich zwei Spalte.

Da es aufgrund von Schmelzvorgängen und den damit verbundenen Materialverlagerungen im Testbündel zur Blockierung des Hauptströmungskanals kommen kann, wurde der BYPASS als weiterer Strömungskanal mit hohem Strömungswiderstand eingeführt, der über horizontale Querleitungen mit dem Hauptströmungskanal verbunden ist. Bei einer Blockadebildung im Bündel wird dadurch erreicht, dass in diesem Bereich eine geringe Strömung über den BYPASS aufrechterhalten bleibt.

Die Standardwerte der wesentlichen Eingabeparameter sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

3.3 Darstellung und Diskussion der Rechenergebnisse

Die wesentlichen Ergebnisse der Nachrechnung sind in den Abb. 3-3 bis 3-22 den entsprechenden Messwerten gegenübergestellt. Simuliert wurde die Zeitspanne bis 20000 s nach Beginn des Experiments, etwa 2600 s nach dem Abschalten des Treiberreaktors. In den Graphiken sind die Messergebnisse als rote, gestrichelte Linien dargestellt und mit den in /PHE 02/ bezeichneten Messstellen gekennzeichnet. Die Tabelle 3-2 zeigt die Ereignisabläufe in Versuch und Nachrechnung im direkten Vergleich.

3.3.1 Temperaturen

Von zentraler Bedeutung sind die Temperaturverläufe während des Versuchs in den verschiedenen Höhen der Teststrecke. Die Temperaturen haben starken Einfluss auf wichtige Messgrößen wie beispielsweise die Oxidation (und damit einhergehend die Wasserstoffproduktion), das Schmelzverhalten sowie die Freisetzung von Spaltprodukten in den Kühlkreislauf.

Geregelt wird der Temperaturverlauf im Wesentlichen über die Leistung des Treiberkerns. Die über den Kopplungsfaktor von 135 reduzierte Leistung des Treiberkerns entspricht der im Brennstoff erzeugten thermischen Leistung, welche in Abb. 3-3 dargestellt ist. Die Berechnung des Kopplungsfaktors ist mit gewissen Ungenauigkeiten behaftet /LUZ 06, BIA 07/. In der Rechnung wurde die als Randbedingung verwendete Leistung um einen konstanten Faktor auf 90% reduziert, d.h. innerhalb des Toleranzbereiches, um das thermische Verhalten des Bündels korrekt wiedergeben zu können. Zusätzlich wurde eine konstante Nachzerfallsleistung von 0.55 kW berücksichtigt /BIA 07/. Die totale Bündelleistung (TOTNPOW) ergibt sich aus der Summe der vom Treiberkern aufgeprägten Leistung und der aus dem Nachzerfall. Die Leistung SQPOW gibt hingegen die tatsächlich im Bündel freigesetzte Leistung an. Bis etwa 16400 s sind beide Leistungen identisch, danach ist SQPOW aufgrund von Brennstoffverlagerungen aus Zonen mit hohem Neutronenfluss in Zonen mit kleineren Neutronenflüssen geringer.

Die Abbildungen 3-4 bis 3-12 zeigen die Temperaturen im Testbündel und in der Bündelumfassung (Shroud) in verschiedenen Höhen über dem Beginn des Brennstoffs. Dargestellt sind die simulierten Temperaturen der Hüllrohr- und Fluidtemperaturen der inneren und äußeren Brennstäbe sowie in den Ringspalten (S_1/4 und S_out). Außer-

dem sind die im Experiment gemessenen Temperaturen der „Ultra sonic thermometer“ (TUS.), in bzw. an den frischen Brennstäben (TCW.), am Steuerstab (TCX.), in der Bündelumfassung (TCB.) und in den Ringspalten (TCK.) aufgetragen. Bis etwa 10800 s (in 900 mm Höhe bis 9000 s) wird der Temperaturverlauf in der Simulation in allen Höhen sehr gut wiedergegeben. Danach werden in der Simulation bis zur Abschaltung des Reaktors die Temperaturen ab einer Höhe von 300 mm etwas überschätzt. Gegen Ende des Versuchs zeigen die Kurven dann jeweils wieder sehr gute Überstimmungen, wobei der Ausfall einiger Temperaturmessgeräte jedoch einen genauen Vergleich verhindert. Insgesamt wird der Temperaturverlauf also weitgehend korrekt simuliert.

3.3.2 Oxidation und Wasserstoffproduktion

Wie aus den Hüllrohrtemperaturen im inneren Ring aus Abb. 3-13 gut ersichtlich ist, beginnt bei 9850 s die Temperatureskalation durch Oxidation zuerst in einer Höhe von 550 mm. Bis zu diesem Zeitpunkt verlaufen die Temperaturen vollkommen analog zur Bündelleistung. Danach wandert die Oxidationsfront von der Mitte des Bündels nach unten und im Anschluss ganz nach oben. Der Temperaturanstieg im unteren Bündelbereich wird durch abfließende Schmelze noch beschleunigt, so dass die Spitzen bei den entsprechenden Kurven steiler sind als bei den Kurven der höher gelegenen Bereiche des Bündels. Nach dem Erreichen der Spitze sinkt die Temperatur aufgrund der abklingenden Oxidation wieder und beginnt erst wieder zu steigen, sobald die Bündelleistung hoch genug angestiegen ist, um das Verhalten wieder zu dominieren. Ein ähnliches Verhalten der Temperaturen konnte bereits beim Versuch FPT2 beobachtet werden /TRA 08/. Betrachtet man die Massenströme am Bündelein- und -austritt (Abb. 3-14), so ist deutlich eine Dampfangelphase von etwa 2000 s zu erkennen.

Bei der Oxidation von Zirkonium und Borkarbid entsteht Wasserstoff, was in Abb. 3-15 dargestellt ist. Da bei der Simulation über längere Zeit viel Wasserstoff gebildet wird (Abb. 3-14), wird die integrierte Produktion zunächst zu hoch berechnet, im weiteren Verlauf gleichen sich die berechnete und die gemessene Kurve jedoch wieder an und die gesamte im Versuch gebildete Wasserstoffmenge wird sehr gut berechnet. Setzt man in der Simulation die untere Temperaturgrenze für die Reduzierung der Oxidation zur Berücksichtigung des beginnenden Schmelzens TCMLT1 auf 1800 K, wodurch der Dampfangel auf eine Dauer von sieben Minuten begrenzt wird, dann wird die Kinetik der Wasserstoffproduktion zwar deutlich besser wiedergegeben, jedoch wird dadurch gleichzeitig die Oxidationsexkursion unterdrückt.

Neben Wasserstoff werden bei der B_4C -Oxidation auch CO und CO_2 freigesetzt, wie in Abb. 3-16 dargestellt ist. Bedingt durch die gegenwärtige Modellierung können in der Simulation allerdings nur die Anteile von CO , CO_2 und CH_4 an der Gesamtproduktion eingegeben werden, so dass bei der gewählten Konfiguration zwar die zeitliche Entwicklung und die Gesamtmasse der CO -Entstehung gut wiedergegeben, die CO_2 -Entstehung jedoch deutlich überschätzt wird. Die Bildung von CH_4 wird ebenfalls leicht überschätzt. Der Anteil des oxidierten B_4C liegt in der Nachrechnung mit 89 % im Vergleich zu 77 % im Experiment allerdings zu hoch.

3.3.3 Schmelzverhalten

Zu bestimmten, materialspezifischen Temperaturen beginnen die verschiedenen Materialien der Bündelkomponenten zu schmelzen. Die dadurch einsetzende Materialverlagerung hat wiederum Auswirkungen auf die Temperaturen sowie die Spaltproduktfreisetzung. Ab 5111 s in der Simulation und 4870 s im Experiment beginnt das Hüllrohr zu versagen (Bersten), das Versagen des Steuerstabes liegt bei 9361 s bzw. bei 9550 s. Auch hier gibt die Simulation also das reale Verhalten recht gut wieder. Abb. 3-17 zeigt die Massen der Schmelze und der Kruste der Brennstäbe. Während sich bei 10919 s die erste metallische Schmelze und auch Kruste aus dem Hüllrohr bilden, entstehen erst ab 16466 s keramische Schmelze und Kruste vom Brennstab selbst. Mit fast 1,5 kg ist der Großteil des geschmolzenen Materials keramisch, der metallische Anteil beträgt lediglich etwa 0,17 kg und die Gesamtmasse einschließlich des Materials aus dem Steuerstab 2,02 kg. Die ersten Vorabuntersuchungen des Versuchs liefern eine Masse von rund 1,5 kg, in der Nachrechnung wird die Masse des geschmolzenen Materials also überschätzt.

Auffällig ist außerdem, dass in der Simulation im Gegensatz zum Experiment eine stärkere Verlagerung im äußeren Ring stattfindet, wie Abb. 3-18 verdeutlicht. Erhöht man die Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht in der Bündelumfassung um 20%, einen Wert noch innerhalb des von den Experimentatoren angegebenen Unsicherheitsbereichs /PHE 02/, kann mehr Wärme nach außen abgeführt werden und es wird weniger Material verlagert (Abb. 3-19, modifiziertes Modell). Eine Reduktion der Bündelleistung QTOT würde ebenfalls die Materialverlagerung im äußeren Ring verringern, jedoch auch zu anderen, ungünstigen Werten, beispielsweise bei der Spaltproduktfreisetzung, führen.

3.3.4 Spaltproduktfreisetzung und -transport

Die zeitlichen Verläufe für die Freisetzungen sind in Abb. 3-20 bis 3-22 dargestellt. Aus Abb. 3-20 wird ersichtlich, dass die leicht flüchtigen Spaltprodukte Xenon, Jod und Cäsium bereits mit Bersten der Hüllrohre ab etwa 4700 s freigesetzt werden und während der Oxidationsphase infolge der hohen Temperaturen stark ansteigen. Der Anstieg wird anschließend durch die abnehmende Temperatur und durch die Abnahme des im Inventar verbliebenen Materials flacher. Insgesamt wird von diesen drei Elementen ein sehr großer Anteil von über 80 % freigesetzt. Die anderen Nuklide werden erst beim Versagen des Steuerstabes und der Brennstäbe freigesetzt. Die Freisetzung von Tellur und Antimon steigt dabei während der Oxidationsphase wesentlich langsamer an und erreicht einen geringeren Anteil von lediglich etwa 25 %. Im Gegensatz dazu steigt die Kurve für Molybdän etwas steiler an und erreicht am Ende einen Wert von etwa 70 %. Beispielhaft sind in der Abbildung auch die gemessenen Werte von Cäsium und Tellur dargestellt. Die Kurve für Cäsium verläuft dabei deutlich unter der der Simulation. Eine Ursache dafür ist, dass die Messwerte nicht den tatsächlichen Freisetzungswerten im Kern entsprechen, sondern am Messpunkt C im heißen Strang aufgenommen wurden und sich auf dem Weg dorthin zuvor schon einiges an Material abgelagert hat. Weiterhin ist davon auszugehen, dass ATHLET-CD die Freisetzung hier überschätzt. Bei Tellur verläuft die Kurve der experimentellen Werte zunächst fast gleich wie die der Simulation und es tritt erst gegen Ende eine Divergenz auf. Jedoch lagert sich Tellur besonders stark ab und eine am Bündelaustritt gemessene Kurve würde wesentlich höher verlaufen.

Die mittel bis schwer flüchtigen Spaltprodukte Barium, Strontium und Ruthenium zeigen ein ähnliches Verhalten wie Tellur und Antimon, wie Abb. 3-21 zeigt. Im Vergleich zu den experimentellen Messwerten tritt bei diesen Elementen eine besonders deutliche Überschätzung der Freisetzung auf. Schließlich sind in Abb. 3-22 die Freisetzungen von Uran, Zirkonium sowie der Strukturmaterialien Zinn (Hüllrohr) und Rhenium (Thermoelemente) dargestellt. Rhenium wird dabei noch lange in der Hochtemperaturphase freigesetzt, während sich hingegen die anderen Materialien wie Barium und Ruthenium verhalten.

Tabelle 3-3 stellt die berechnete Freisetzung einiger Nuklide den vorläufig veröffentlichten experimentellen Werten gegenüber. Außer bei Tellur liegen die Daten bei allen dargestellten Elementen in der Simulation deutlich über denen des Experiments. Obwohl die Daten erst im heißen Strang gemessen wurden und die Werte somit niedriger

ausfallen als die tatsächliche gesamte Freisetzung im Kern, ist dennoch davon auszugehen, dass ATHLET-CD die Freisetzung überschätzt und die zugrundeliegenden Modelle weiter verbessert werden sollten. Bei Tellur gibt es bei den experimentellen Daten aufgrund der stark ausgeprägten Neigung zur Ablagerung große Unterschiede zwischen der Messung im heißen Strang und den auf den Kern zurückgerechneten Werten.

3.4 Zusammenfassende Bewertung

Der Verlauf der Temperaturen in den verschiedenen Höhen des Testbündels und der Bündelumfassung konnte in der Simulation gut wiedergegeben werden. Auch die Oxidation und dabei besonders das Wandern der Oxidationsfront konnte sehr gut reproduziert werden. Die dadurch bedingte Entstehung von Wasserstoff wird jedoch über einen kurzen Zeitraum überschätzt, die Gesamtmenge am Ende des Versuchs liegt aber wieder gut im Unsicherheitsbereich der Messungen. Bei der Freisetzung von CO, CO₂ und CH₄ können aufgrund der vorhandenen Modellierung nur die Anteile dieser Größen an der Gesamtproduktion angegeben werden, so dass in der vorliegenden Simulation die Entstehung von CO korrekt wiedergegeben wird, die CO₂-Entstehung allerdings deutlich von den experimentellen Werten abweicht.

Sowohl die Zeitpunkte als auch die Mengen der Schmelzen werden von ATHLET-CD gut berechnet und die Ergebnisse stehen in zufriedenstellender Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Masse des geschmolzenen Materials wird dabei jedoch ein wenig überschätzt. Außerdem liefert das Simulationsprogramm im Gegensatz zum Experiment eine deutliche Verlagerung im äußeren Ring des Testbündels. Die Freisetzung der meisten Nuklide, insbesondere der halbflüchtigen und der schweren Spaltprodukte wird in der Simulation deutlich überschätzt.

Tabelle 3-1 Standardwerte von wesentlichen Eingabeparametern

Bezeichnung	Name	Wert
Randbedingungen		
Systemdruck	EXPRES#T	0,22 MPa
Dampfmassenstrom	INFLOW#T	0,5 g/s
Einspeisetemperatur	INTEMP#T	165 °C
Rheniumeinspeisung	MPTAB_RE#T	0 - 10 mg/s
Außentemperatur SHROUD	TEMP-B#T	165 °C
Außentemperatur PLENUM	TEMP-B#T	165 °C
Außentemperatur PLENUM	TEMP-HOT#T	150-700 °C
Außentemperatur HOTPIP	TEMP-HOT#T	150-700 °C
Außentemperatur COLPIP	TEMP-COL#T	150 °C
Bündelleistung	POWER#T	0 - 32,77 kW
Axiales Leistungsprofil	POWT1	0 - 1,719
Relative Stableistung innerer Ring	PRAD1#T	0,913
Relative Stableistung äußerer Ring	PRAD2#T	1,058
Eingabeparameter und Modelloptionen – Modul E CORE		
Anzahl der Brennstäbe	NROTOT	20
Beheizte Länge	SECOR-SBCOR	1000,00 mm
Länge des unteren Stopfens	STU	100,00 mm
Länge des oberen Stopfens	STO	82,00 mm
Brennstoffradius	RPEL	4,02 mm
Hüllrohrinnenradius	RCLI0	4,12 mm
Hüllrohraußenradius	RROD0	4,74 mm
Stabgitterteilung	PITCH	12,6 mm
Hüllrohroxidation (Leistikow / Prater-Courtright)	IOXMOD	19
Obergrenze des Dampfzonenbereichs	OXXLIMI	0,1
Brennstabinnendruck (T = 293 K)	PROD0	2,5 MPa
Hüllrohrdehnungsmodell (TESPA-ROD)	IBLOW	3
Kriechdehnungsrate (Rosinger)	ITESPA	2
Sauerstoffkonzentration im Hüllrohr	TSPOX0	0,125 %
Wasserstoffkonzentration im Hüllrohr	TSPHPPM	250 ppm
Hüllrohrversagenskriterium	IBURST	2
Versagenskriterium maximale Dehnung	TSPBURST	38 %
Versagenskriterium max. Dehnungsrate	TSPBRATE	0,1 s ⁻¹
Modell für Brennstoffauflösung (Hofmann)	ILIQUI	1
Beginn der Brennstoffauflösung	TAM	2030 K
Hüllrohrversagenstemperatur, (OXLAY < DDTAL)	TALLOW	2250 K
Hüllrohrversagenstemperatur, (OXLAY > DDTAL)	TALHIGH	2450 K
Oxidschichtdicke für Hüllrohrversagenskriterium	DDTAL	0,3 mm

Bezeichnung	Name	Wert
Unterkühlung zur Erstarrung der metallischen Schmelze	DETSL	50 K
Oxidation der metallischen Schmelze	IOXML	19
Mindestoxidschichtdicke	OXML0	10 µm
Verlagerungsgeschwindigkeit der metall. Schmelze	WSLMAX	60,0 mm/s
Viskosität der metallischen Schmelze	VISCOSFR	1,0e-3 m ² /s
Solidustemperatur der keramischen Schmelze	TCOMPM	2600 K
Liquidustemperatur der keramischen Schmelze	TCOMPL	2800 K
Unterkühlung zur Erstarrung der keramischen Schmelze	DTSLUO	50 K
Verlagerungsgeschwindigkeit der keram. Schmelze	WSLUO	60,0 mm/s
Viskosität der keramischen Schmelze	ANYUO	1,0e-3 m ² /s
Absorbermaterialradius	CRAIC	3,74 mm
Absorberstabbradius	CRBA	5,12 mm
Führungsrohrinnenradius	CRHU	5,65 mm
Führungsrohraußenradius	CRSTAB	6,05 mm
Solidustemperatur der Absorberschmelze	CRTAM	1473 K
Liquidustemperatur der Absorberschmelze	CRTAL	1523 K
Versagenstemperatur des Absorberstabs	CRTVER	1523 K
Unterkühlung zur Erstarrung der Absorberschmelze	CRDTSL	300 K
Verlagerungsgeschwindigkeit der Absorberschmelze	CRWSL	60 mm/s
Abschirmfaktor (0,1 < m/m ₀ < 5,0)	SHIELDTAB	1,9 – 0,4
Eingabeparameter und Modelloptionen – Modul FIPREM		
Auswahl des Modells (Ratenansatz)	IFMOD	1
Spaltproduktfreisetzung (ORNL)	NMODI	7
Spaltproduktinventar (Tabelleneingabe)	IDTBAS	0
Einfluss der Hüllrohroxidation (ja)	NOXII	2
Inventar im Brennstabspalt (FRENCH Data)	NBRSTI	3
Rückkopplung Freisetzung / Verlagerung (ja)	NMELTI	2
Niederer Abbrand (nein)	ILOBUP	0
Geringe Brennstoffoxidation (ja)	IFULOX	1
Eingabeparameter und Modelloptionen – Modul SOPHAEROS		
Anzahl der Partikelgrößenklassen	NCTI	20
Minimaler Partikelradius	RMIN	10,0 µm
Maximaler Partikelradius	RMAX	10,0 µm
Genauigkeitskriterium chemischer Verbindungen	EPCHEM	1,0e-6
Materialdatenbasis (CsHO, H ₂ MoO ₄)	MDBPATH	MDB-V13
Zusätzliche Elemente (MPTAB_B, MPTAB_Re)	SOURCES	Re
Partikelgrößenverteilung geometrischer Radius	RGEOM1	10,0 nm
Partikelgrößenverteilung, Standardabweichung	SIGMA1	1,7

Tabelle 3-2 Zeitverlauf der wesentlichen Ereignisse im Versuch FPT3

Ereignis	Experiment (s)	Rechnung (s)
Beginn des Experiments	0	0
Erstes Hüllrohrversagen auf 500 mm Bündelhöhe	4870	5111
Beginn der Voroxidation	8560	ca. 8600
Versagen des Kontrollstabs	9550	9361
Beginn der Oxidationsexkursion	9840	ca. 9800
Beginn der Plateauphase	11100	11200
Erste Progression von Schmelze über dem unteren Abstandshalter	16620	16470
Zweite Progression von Schmelze über dem unteren Abstandshalter	17330	17200
Reaktorabschaltung	17370	17370

**Tabelle 3-3 Relative Freisetzung in Simulation und Experiment
(alle Angaben in %)**

Element	ATHLET-CD	/PAY 08/	/BIA 07/	/DEV 08/
Cs	86	72	45 - 65	65
I	84	70	45 - 65	
Te	24	63	45 - 65	12
Xe	85	81,5	80	
Ba	15	3	3	3
U	0,3			0,03
Ru	15			0,3

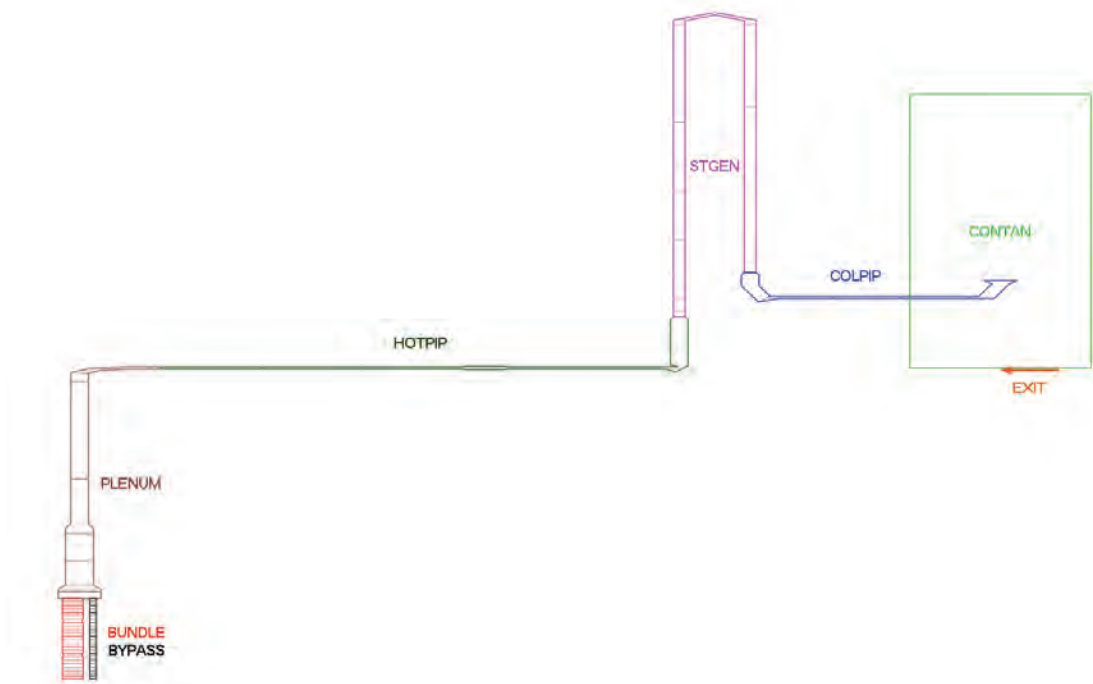


Bild 3-1: ATHLET-CD Modellierung der PHÉBUS-Teststrecke

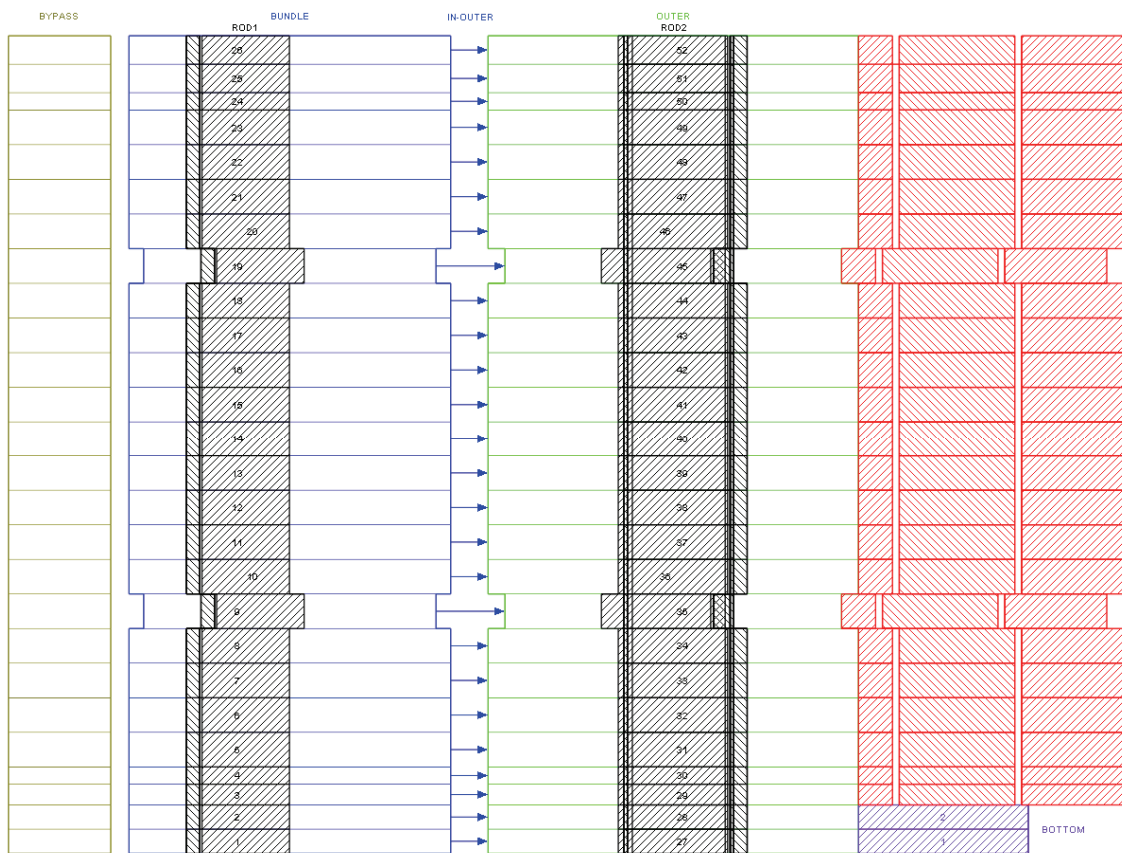


Bild 3-2: Nodalisierung im Bündelbereich

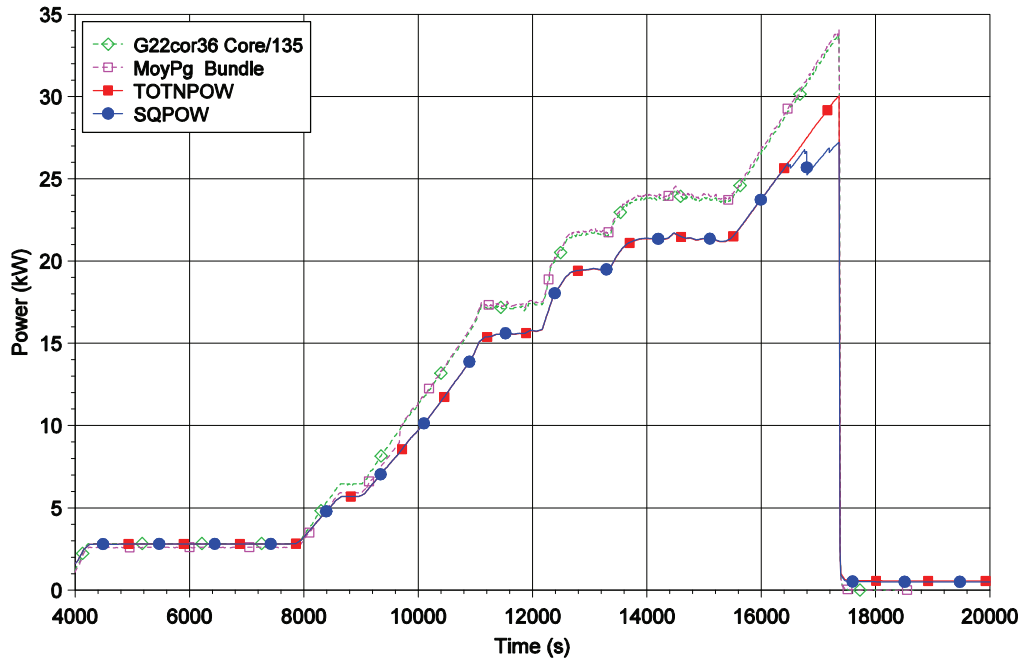


Bild 3-3: Bündelleistung

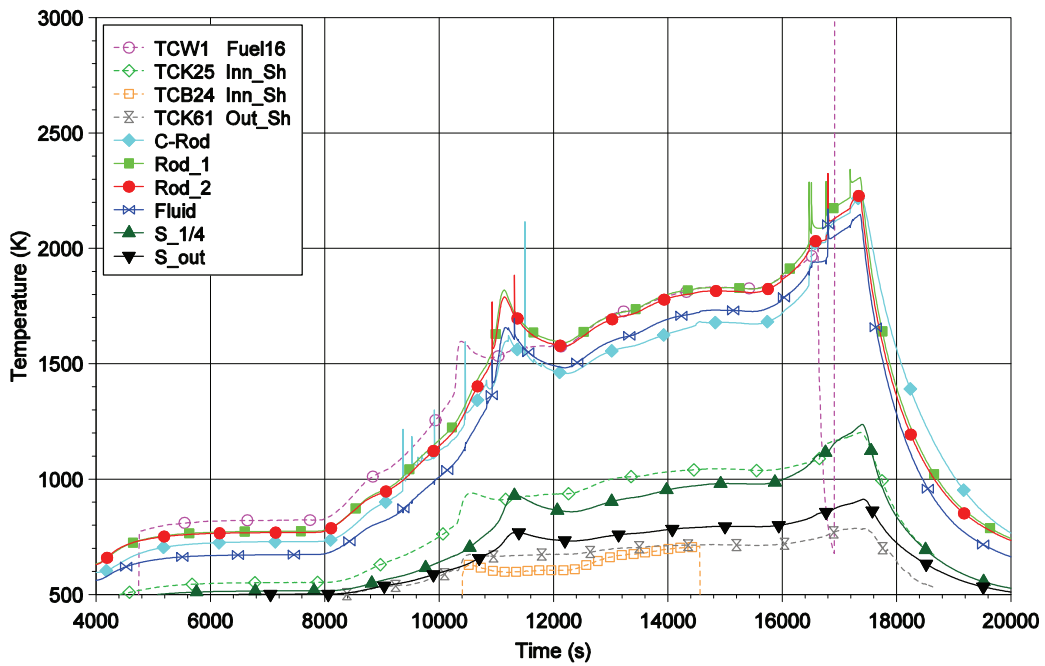


Bild 3-4: Temperaturen in 200 mm Höhe

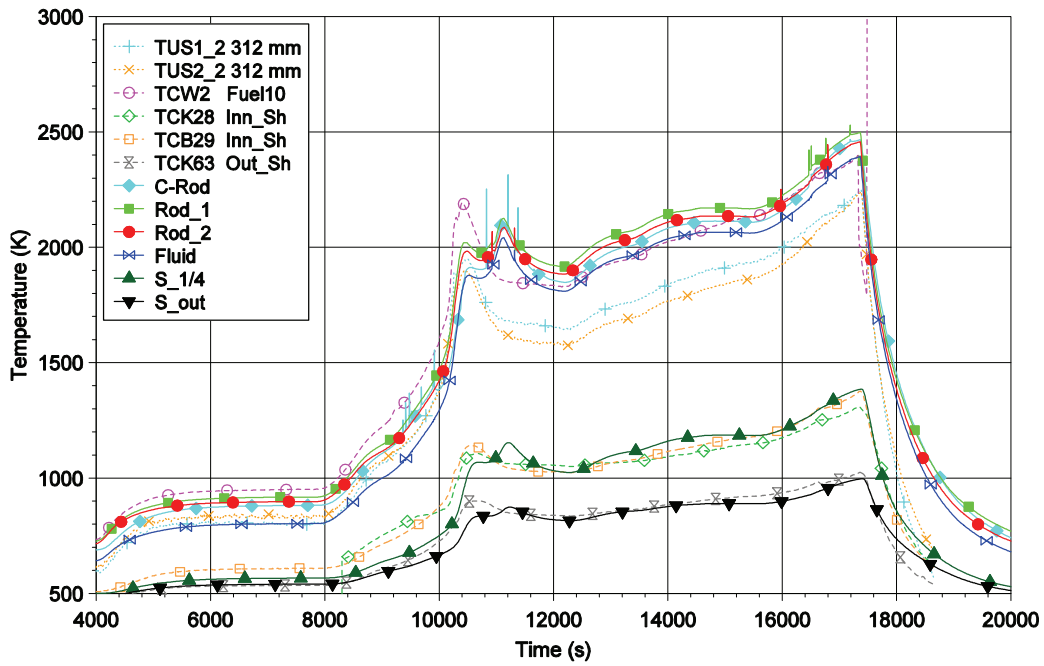


Bild 3-5: Temperaturen in 300 mm Höhe

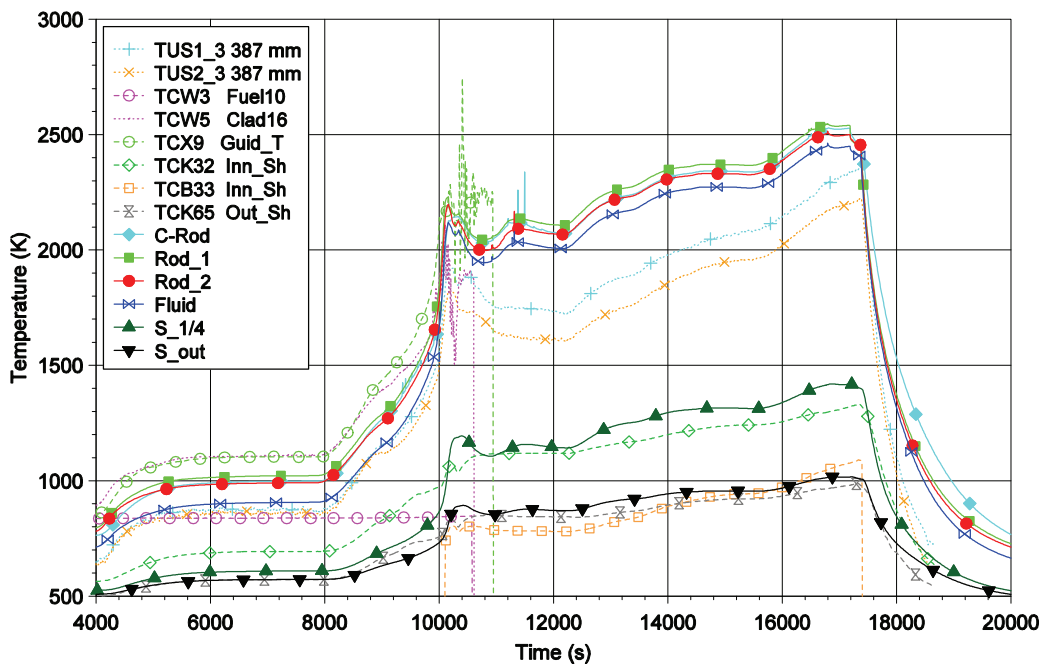


Bild 3-6: Temperaturen in 400 mm Höhe

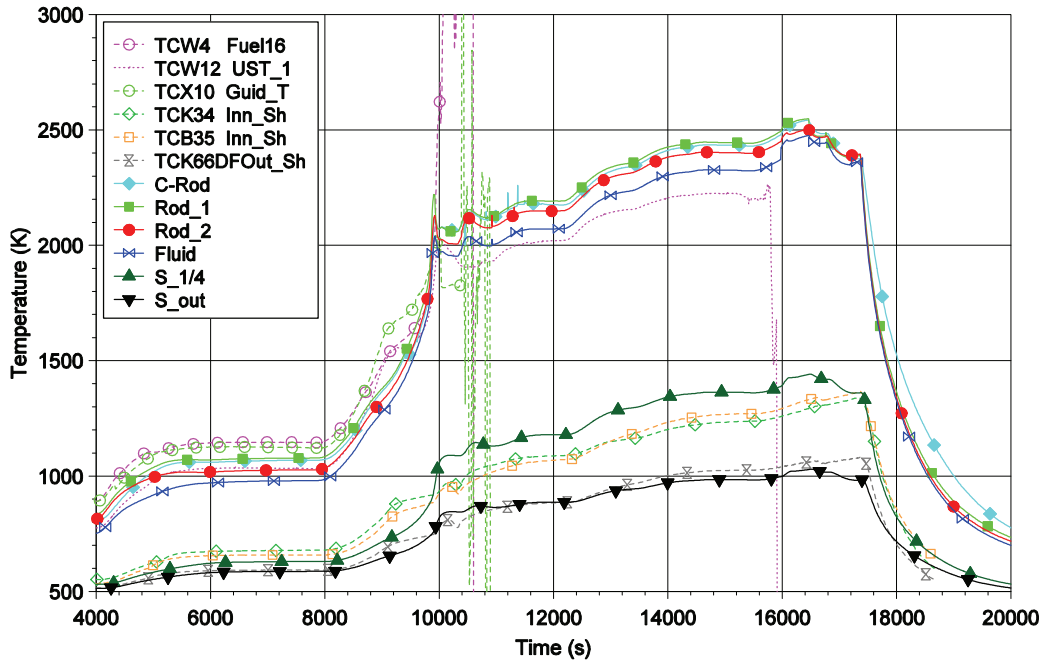


Bild 3-7: Temperaturen in 500 mm Höhe

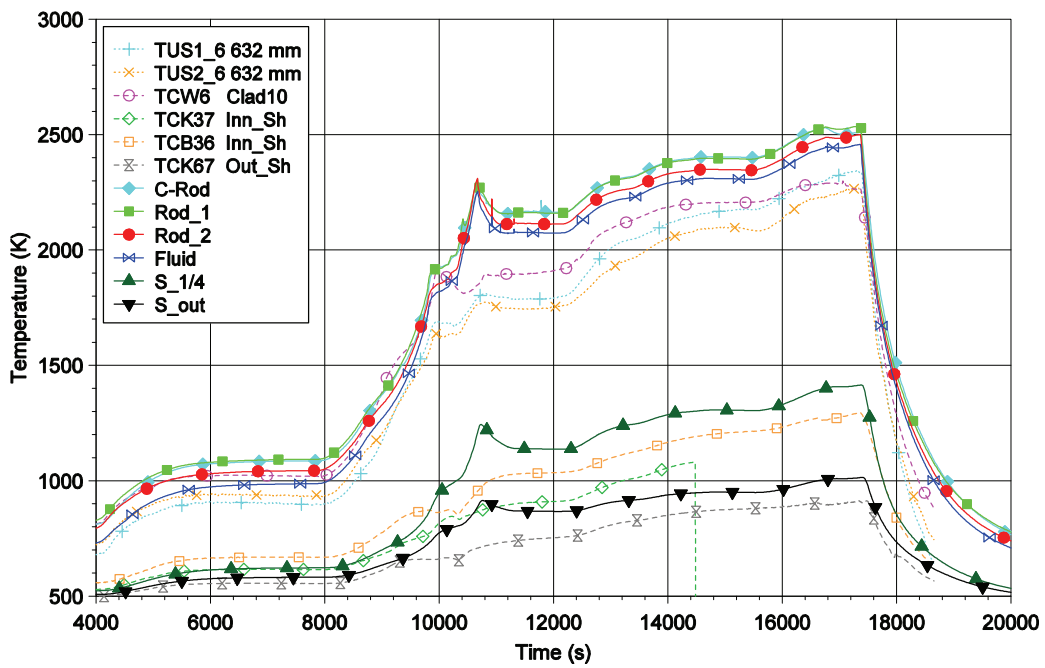


Bild 3-8: Temperaturen in 600 mm Höhe

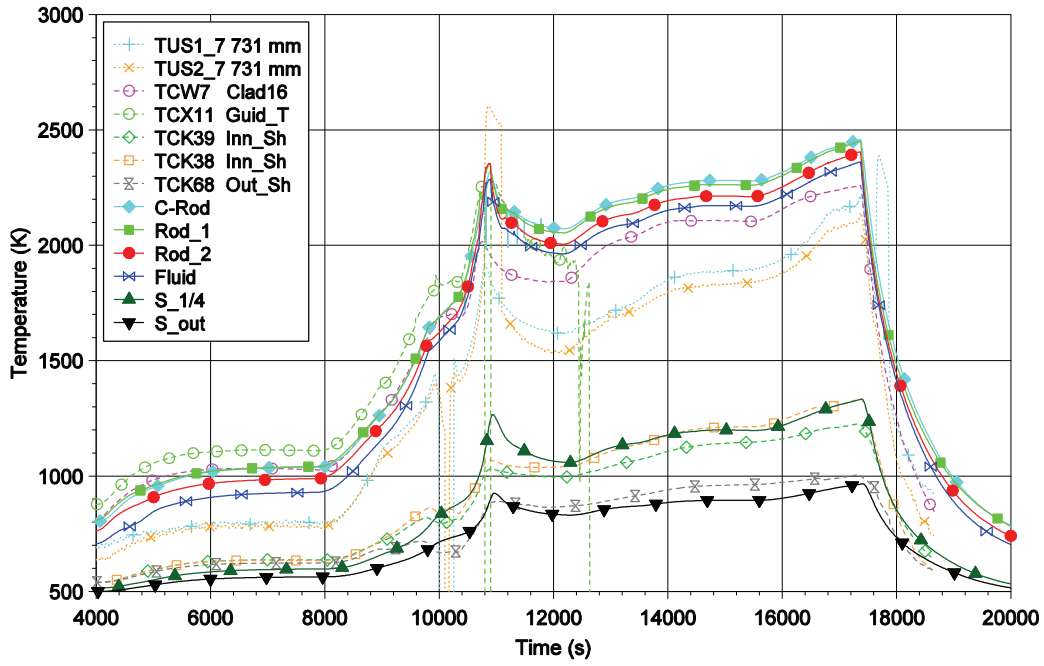


Bild 3-9: Temperaturen in 700 mm Höhe

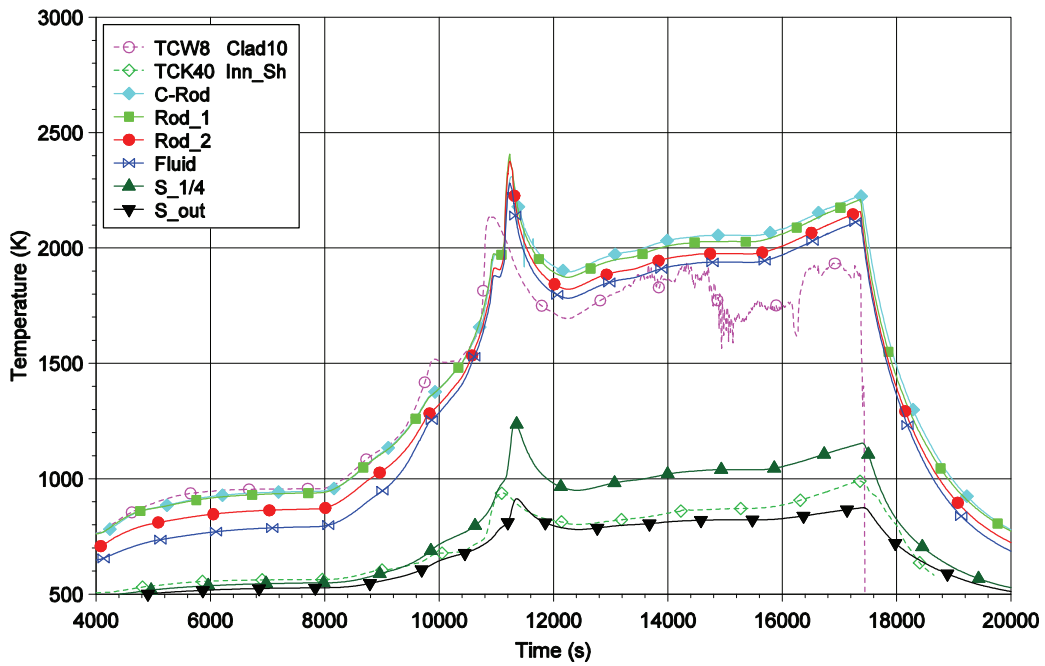


Bild 3-10: Temperaturen in 800 mm Höhe

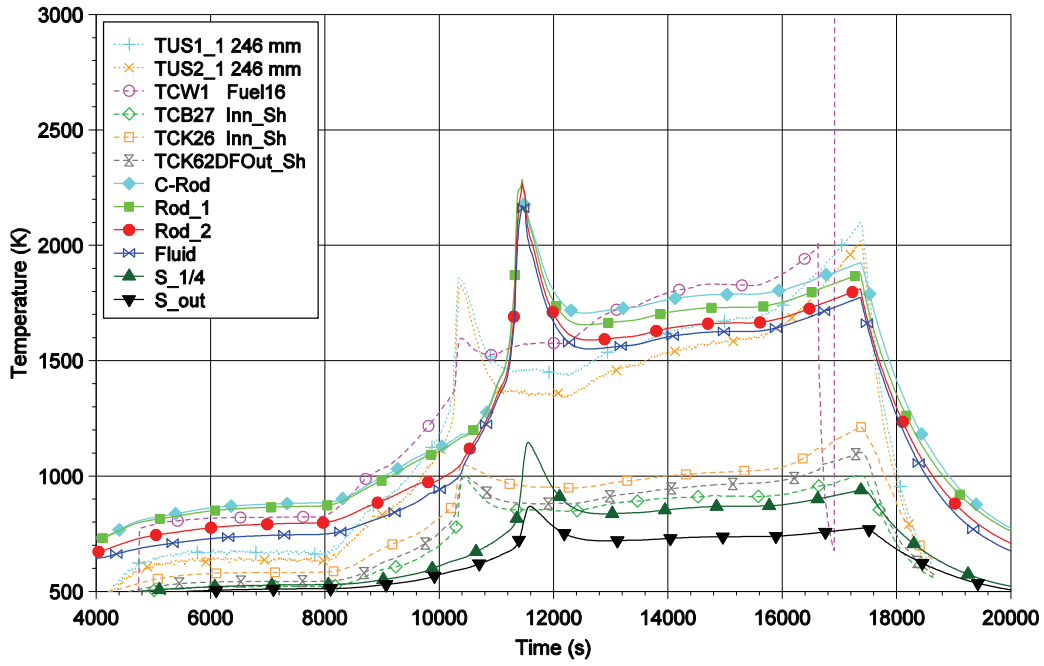


Bild 3-11: Temperaturen in 900 mm Höhe

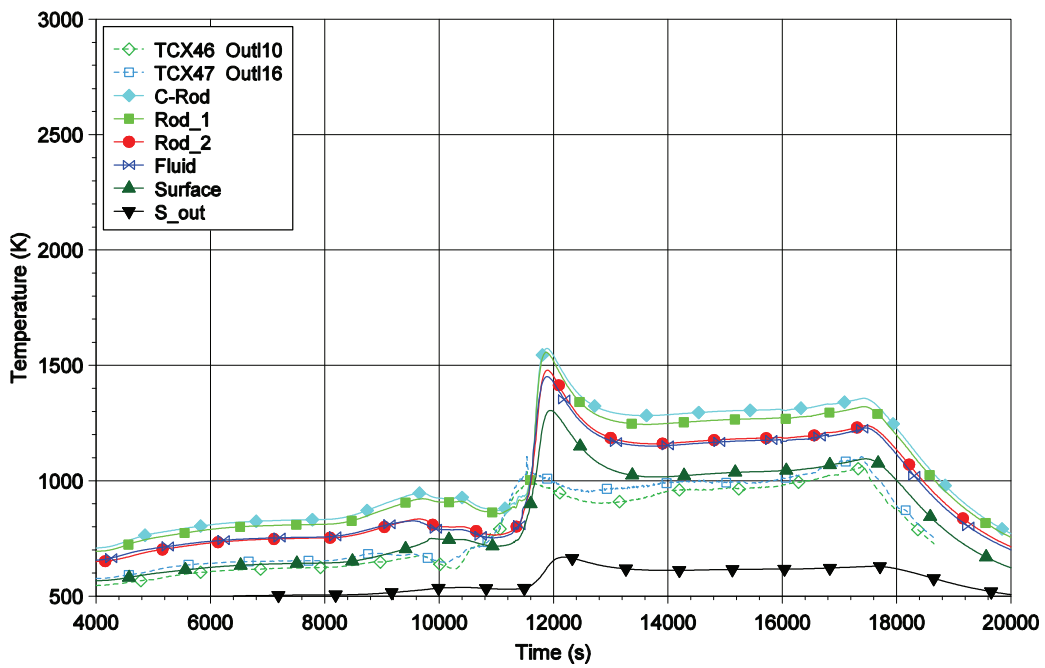


Bild 3-12: Temperaturen in 1061 mm Höhe

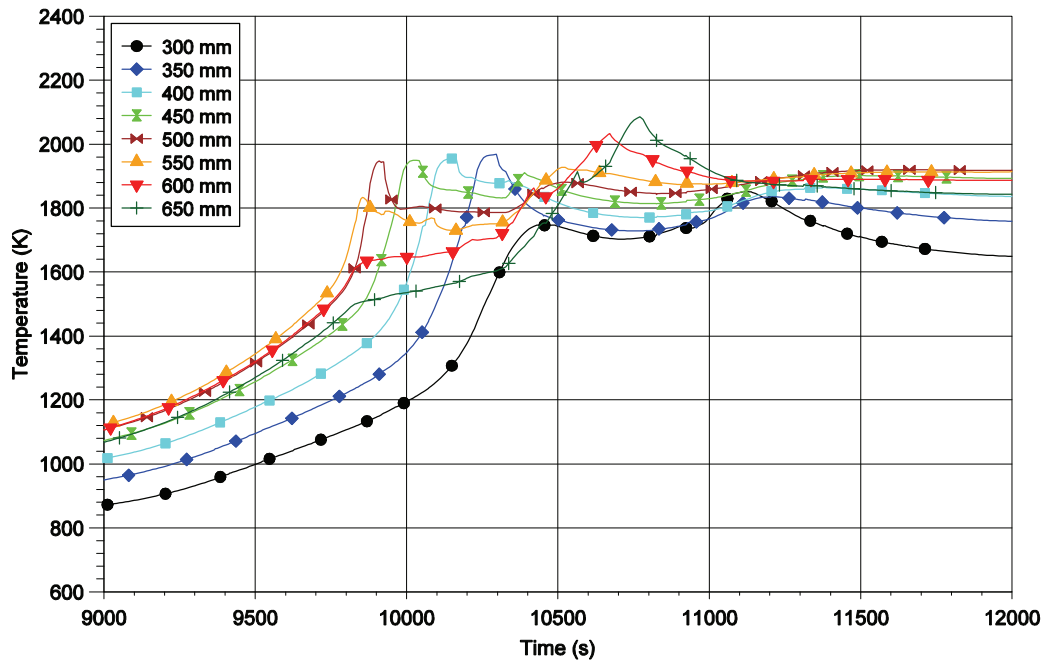


Bild 3-13: Hüllrohrtemperaturen im inneren Ring

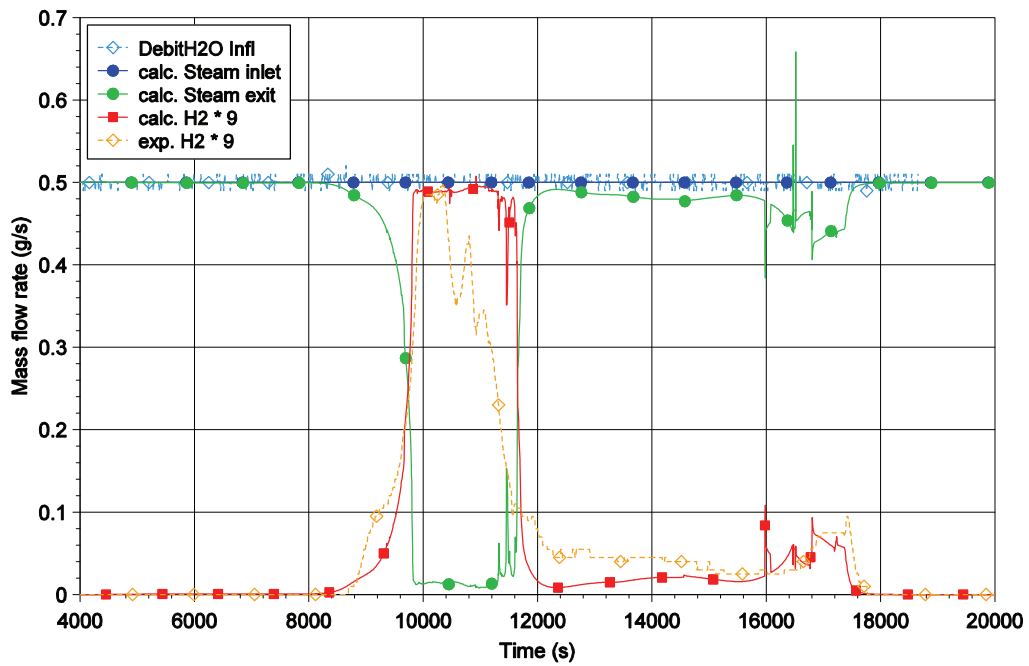


Bild 3-14: Massenströme am Bündelein- und -austritt

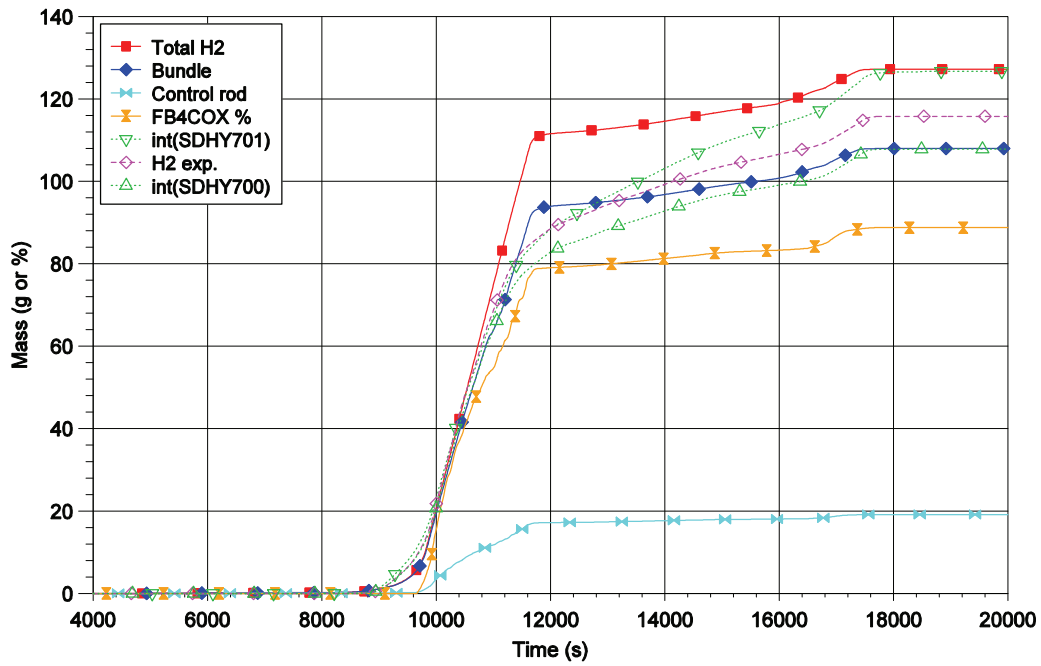


Bild 3-15: Integrierte Wasserstofferzeugung und Borkarbidoxidation

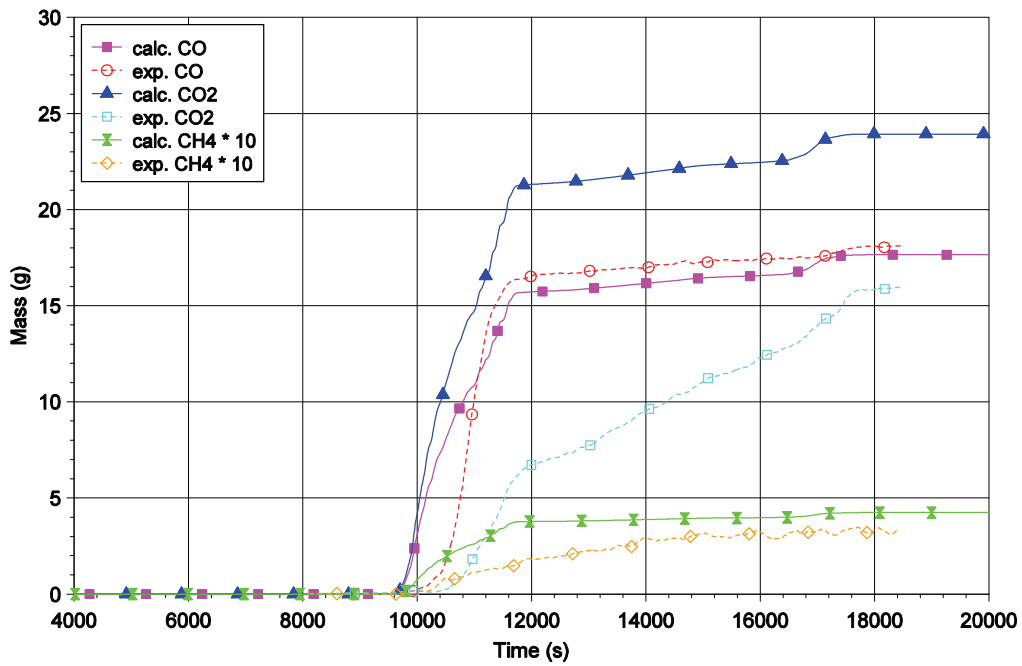


Bild 3-16: Gesamte Freisetzung von CO, CO₂ und CH₄ im Bündel

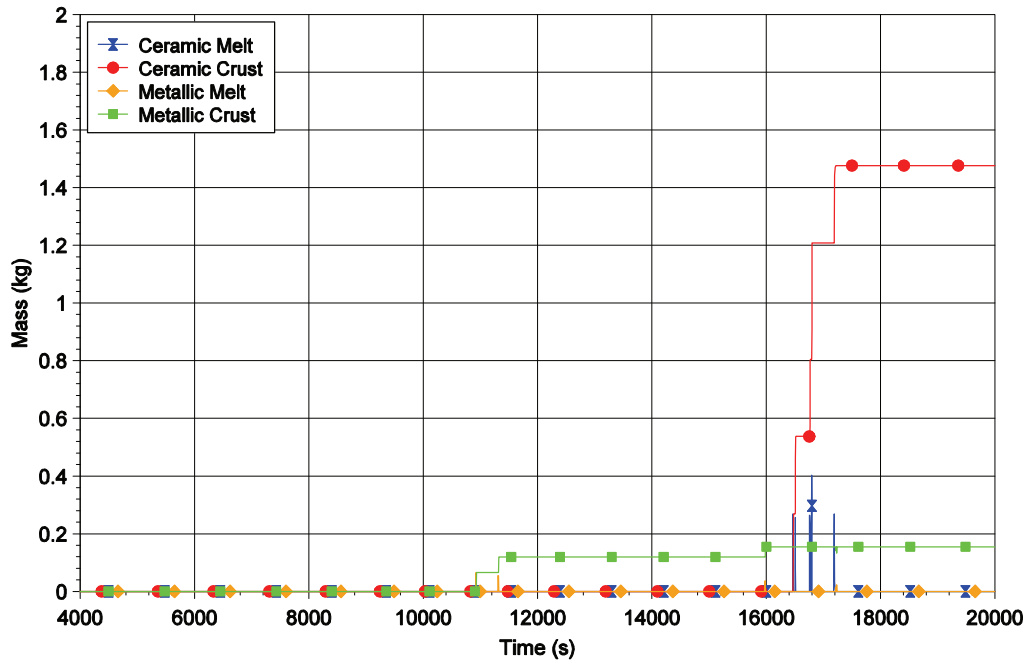


Bild 3-17: Schmelzen- und Krustenmassen der Brennstäbe

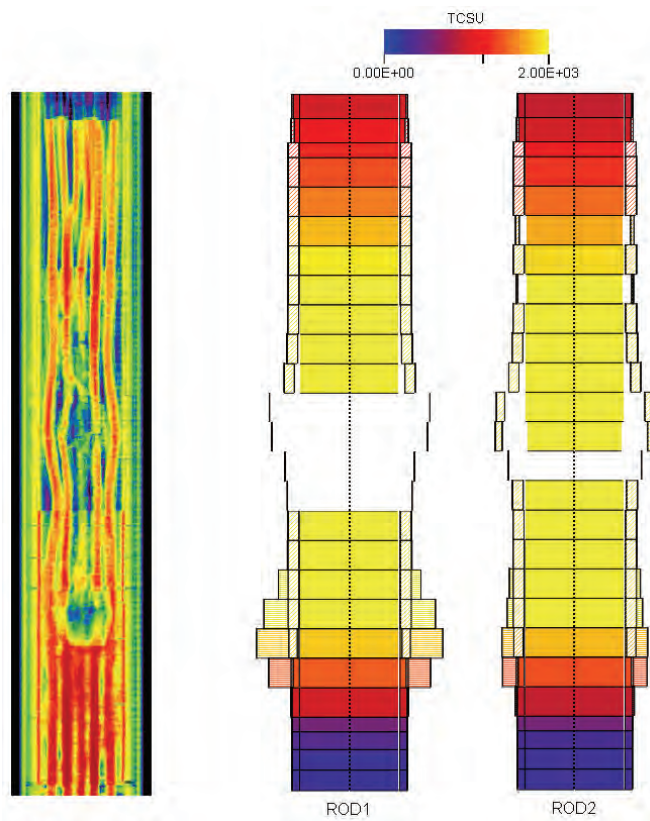


Bild 3-18: Bündelkonfiguration zu Versuchsende
(links: Versuch, rechts: Simulation bei 17338 s)

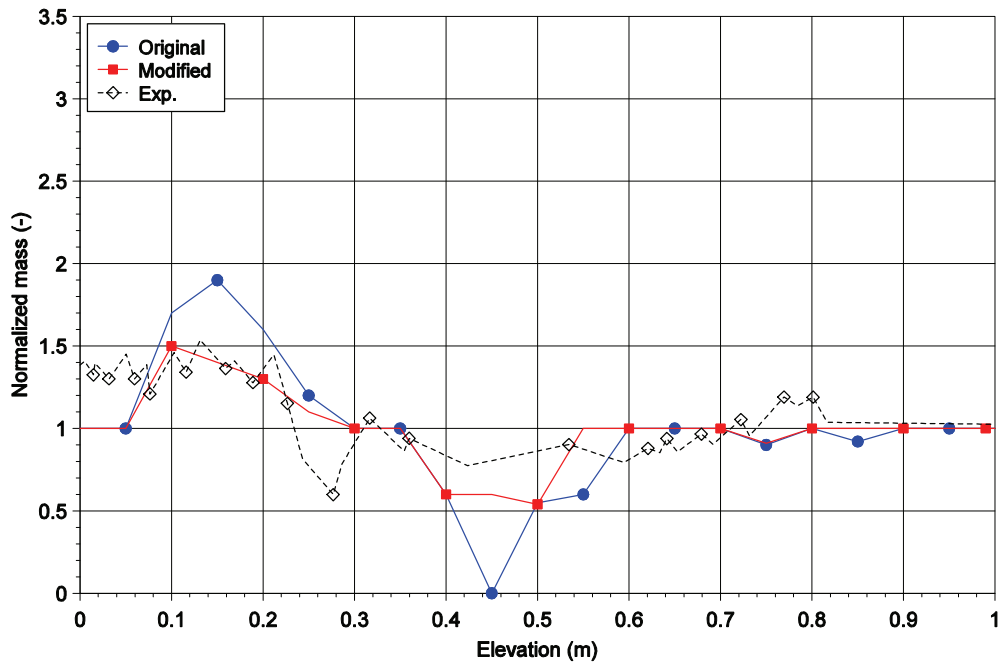


Bild 3-19: Axiale Massenverteilung im Bündel bei der Kernabschaltung (17500 s)

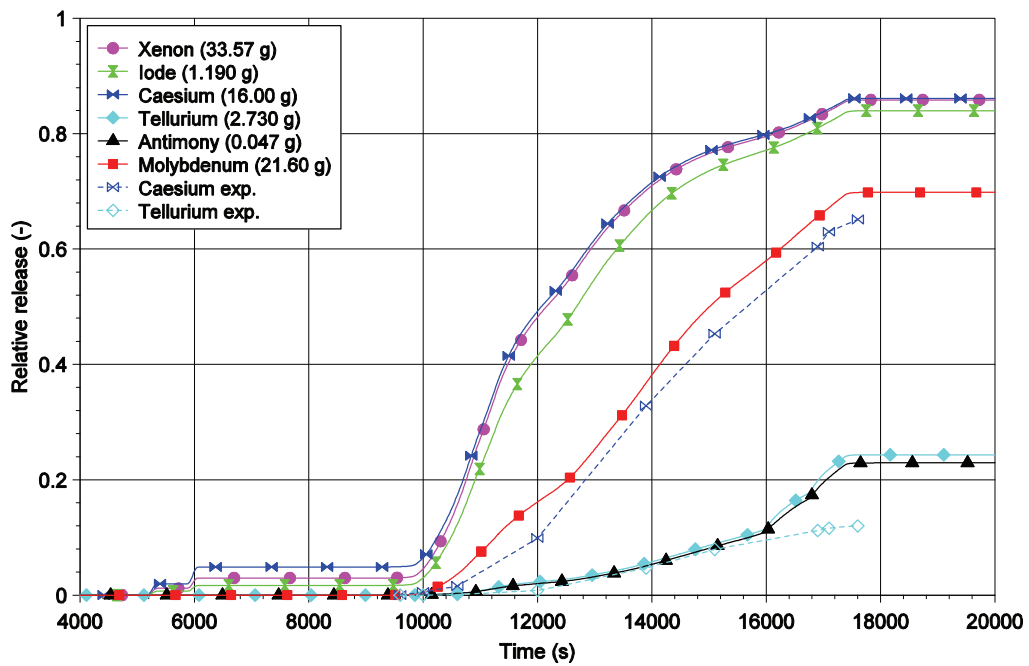


Bild 3-20: Gesamte relative Freisetzung von ausgewählten Spaltprodukten
(in Klammern anfängliches Inventar)

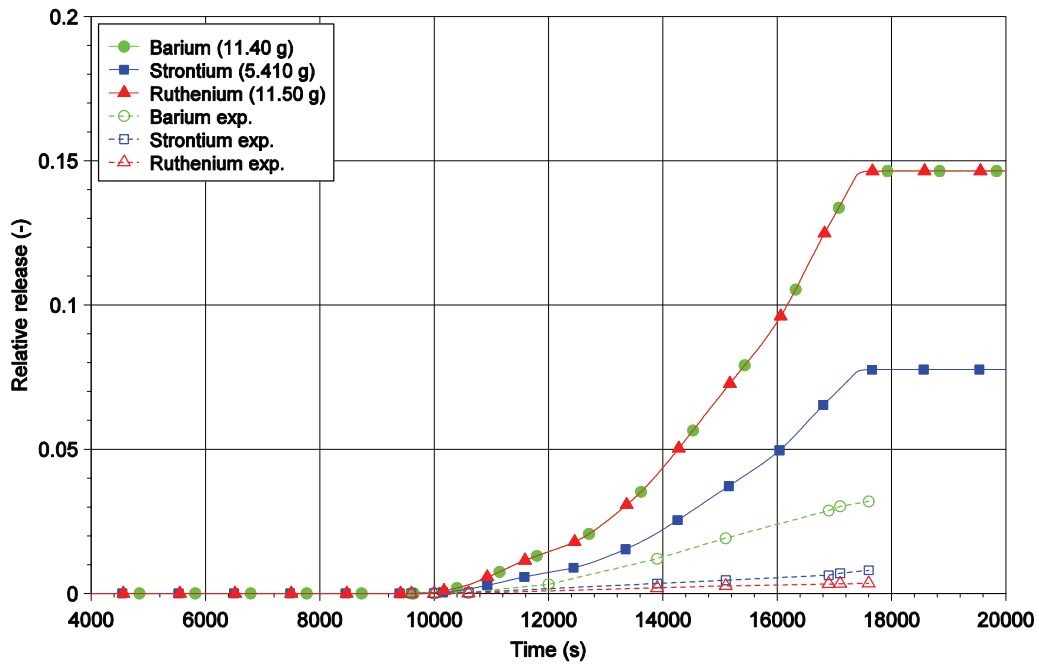


Bild 3-21: Gesamte relative Freisetzung von ausgewählten Spaltprodukten
(in Klammern anfängliches Inventar)

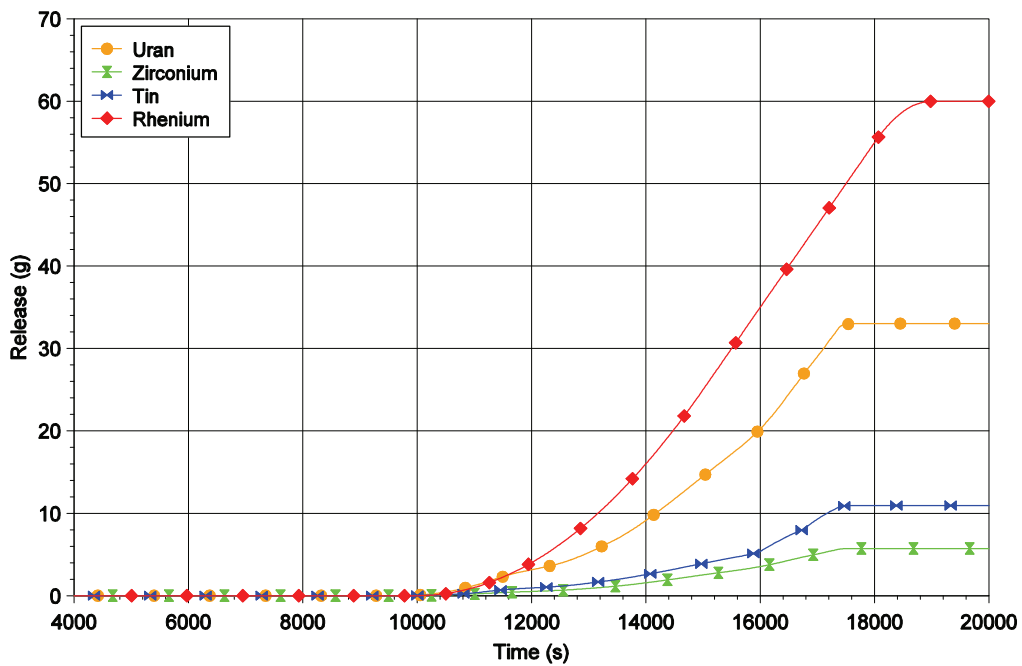


Bild 3-22: Gesamte relative Freisetzung von Uran, Zirkonium, Zinn und Rhenium

4 Anwendung der GRS-Methode zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

4.1 Methodologie

Die von der GRS eingeführte Methode zur Bestimmung der Aussagesicherheit von Rechenprogrammergebnissen (Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse) /KRZ 88, KRZ 90a, KRZ 90b, HOF 93, KRZ 94, GLA 97, GLA 01, GLA 08/ wird national und international zunehmend angewendet. Sie basiert auf der Methode der Monte-Carlo-Simulation, d.h. es wird eine Anzahl von Rechenläufen mit diesem Rechenprogramm durchgeführt, wobei in jedem dieser Rechenläufe die Werte der unsicheren Parameter variiert werden. Unsichere Parameter sind z. B. unsichere Eingabegrößen für den Rechenlauf, Unsicherheiten in den Modellformulierungen, ausgedrückt durch unsichere additive oder multiplikative Korrekturkonstanten in den Modellgleichungen (Korrelationen) oder durch alternative Sätze von Korrelationen, unsichere Anfangs- und Randbedingungen im zu rechnenden Experiment oder in der zu rechnenden Reaktoranlage, unsichere Materialeigenschaften und Stoffwerte, unterschiedliche Nodalisierungen der Anlage und numerische Integrationsparameter wie Genauigkeitsschranken.

Der Stand der Kenntnis eines jeden unsicheren Parameters wird dabei jeweils durch eine geeignete Wahrscheinlichkeitsverteilung quantifiziert. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung drückt hier nicht zufällige Variabilität aus, sondern den Kenntnisstand der Analysten, d.h. einen „Grad an Sicherheit“ über die Lage des zutreffenden Werts dieses Parameters (epistemische Unsicherheit).

Ein wesentliches Merkmal der GRS-Methode ist, dass der Rechenaufwand für die Analyse unabhängig ist von der Anzahl der beteiligten unsicheren Parameter und der zu untersuchenden Ergebnisgrößen. Der Stichprobenumfang N , d. h. die Anzahl der durchzuführenden Rechenläufe, ist lediglich abhängig von der geforderten statistischen Schärfe der Unsicherheitsaussage, ausgedrückt durch zwei statistische Parameter β (= zu erfassende Unsicherheit) und γ (= gewünschtes Vertrauensniveau aufgrund der Beschränktheit des Stichprobenumfangs N).

Für gängige Werte dieser statistischen Parameter β und γ , in der Regel $\beta=95\%$ und $\gamma=95\%$, ergibt sich ein Mindeststichprobenumfang N_{\min} , nämlich $N_{\min}=59$ für einseitige und $N_{\min}=93$ für zweiseitige Unsicherheits-Limits.

Die GRS-Methode ist universell anwendbar, ohne jede Einschränkung hinsichtlich des zugrunde liegenden Rechenprogramms wie auch der zu analysierenden epistemischen Unsicherheiten, so z. B. auch im Falle unstetiger Rechenmodelle, diskreter, nicht unabhängiger Parameter, etc. Das Rechenprogramm kann dabei unverändert bleiben, wenn die zu variierenden Parameter über den Eingabedatensatz übergeben werden.

Mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsverteilungen kann man quantitativ ausdrücken, ob auf Grund von Erkenntnissen aus der Validierung oder aus experimentellen Ergebnissen der für die Codeanwendung zutreffende Parameterwert eher in bestimmten Unterbereichen des Wertebereichs liegt als in anderen. Sind z. B. innerhalb eines Bereichs keine Präferenzen ersichtlich, d. h. jeder Wert innerhalb eines durch Minimum und Maximum gekennzeichneten Bereichs ist in gleichem Maße als zutreffend anzusehen, so wird eine Gleichverteilung als Ausdruck des Kenntnisstandes spezifiziert. Nach dem Prinzip der „Maximalen Entropie“ drückt diese Verteilung am besten aus, dass in diesem Fall keine weiteren Kenntnisse als Minimum und Maximum des Bereichs vorhanden sind. Wird der Kenntnisstand durch Wahrscheinlichkeitsverteilungen ausgedrückt, so hat die mit dem Rechenprogramm ermittelte Ergebnisgröße ebenfalls eine Wahrscheinlichkeitsverteilung. Die Verteilung des Ergebnisses wird in der Regel keine Gleichverteilung sein, selbst wenn für die unsicheren Parameter nur Gleichverteilungen verwendet werden.

Gleichzeitig mit der Unsicherheitsanalyse kann man mit der GRS-Methode auch eine Sensitivitätsanalyse durchführen, wobei Sensitivität im Sinne von „uncertainty importance“ zu verstehen ist. D. h. man erhält auf der Basis derselben Modellrechnungen Angaben darüber, welche der berücksichtigten Eingabeunsicherheiten am meisten zur Ergebnisunsicherheit beitragen. Diese Form der Sensitivitätsinformation gibt die Rangfolge der individuellen Unsicherheitsbeiträge der Parameter zur Unsicherheit des Rechenergebnisses an. Damit ist ein zusätzliches Bewertungskriterium für eine effiziente Verbesserung eines Rechenprogramms und somit zur Verbesserung der Aussagesicherheit von Rechenergebnissen gegeben.

Die Rangfolge unter den unsicheren Parametern gemäß ihres Beitrages zur Ergebnisunsicherheit erhält man mit Hilfe geeigneter Sensitivitätsmaße oder -indizes. Es gibt viele verschiedene Sensitivitätsmaße. Die wichtigsten unter ihnen sind die korrelationsbasierten Sensitivitätsmaße (dazu gehören die verschiedenen Formen der Korrelations- und Regressionskoeffizienten) und die varianzbasierten Sensitivitätsmaße (dazu gehören die verschiedenen Formen der Sobol'schen Sensitivitätsindizes bzw. Korrelationsverhältnisse) /KRB 90b, HOF 99, SAL 00/.

In der vorliegenden Untersuchung wurde als Sensitivitätsmaß für Einzelparameter bei allen Ergebnisgrößen der sog. **Rang-Korrelationskoeffizient nach Spearman** (Spearman's rank correlation coefficient /KRZ 90b, SAL 00/, abgekürzt RCC) gewählt. Der RCC kann bekanntlich als ein Maß für den Grad der monotonen Abhängigkeit der Ergebnisgröße Y vom Eingangsparameter X betrachtet werden, im Unterschied zum sog. gewöhnlichen Korrelationskoeffizienten (nach Pearson), der nur den Grad der linearen Abhängigkeit wiedergibt. Je größer der RCC seinem Betrage nach ist, desto größer sind der Grad dieser Abhängigkeit und damit auch der Einfluss der Unsicherheit des betreffenden Parameters auf die Unsicherheit der Ergebnisgröße. Ein positives Vorzeichen von RCC bedeutet, dass mit zunehmenden Werten des betreffenden Parameters die betrachtete Ergebnisgröße ebenfalls zu größeren Werten tendiert. Entsprechend bedeutet ein negatives Vorzeichen die Umkehrung dieser Tendenz. Diese Eigenschaft ist hilfreich bei der Interpretation der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse. Beim vorliegenden Stichprobenumfang von $N=208$ können Werte dieses Sensitivitätsmaßes, die betragsmäßig unterhalb von ca. 0,15-0,20 liegen, als statistisch nicht signifikant betrachtet werden.

Weiterentwicklungen im Rahmen der GRS-Methode ermöglichen nun die Bestimmung multipler Sensitivitätsindizes, die, analog zu den oben genannten „einfachen“ Sensitivitätsindizes, den Einfluss der Unsicherheit einer ganzen Parametergruppe auf die Unsicherheit im Rechenergebnis quantifizieren /GLA 08/. Mit Hilfe dieser multiplen Sensitivitätsindizes kann man beispielweise abschätzen, welcher Anteil der Ergebnisunsicherheit aus den Unsicherheiten der Versuchsanlagen und welcher aus den Unsicherheiten bei der Modellierung stammt bzw. welchen Beitrag zur Gesamtunsicherheit ein bestimmtes Teilmodell im Rechenprogramm mit allen seinen internen modellspezifischen unsicheren Parametern liefert.

Beispiele solcher multiplen Sensitivitätsindizes sind:

- der **multiple Korrelations- bzw. Rangkorrelationskoeffizient** $R^2_{(1)}$ /GLA 08/. Er kann als ein Maß für den Grad der multiplen linearen bzw. multiplen monotonen Abhängigkeit zwischen der Ergebnisgröße Y und der Gesamtheit der Parameter der Gruppe $X_{(1)}$ interpretiert werden, vergleichbar dem einfachen gewöhnlichen bzw. Rang-Korrelationskoeffizienten im Fall eines einzigen Parameters. Zur Berechnung dieses multiplen (Rang-) Korrelationskoeffizienten sind zusätzliche Modellrechnungen im Allgemeinen nicht erforderlich. Er kann in der Regel auf der Basis derselben Modellrechnungen bestimmt werden wie sie bereits aus der „einfachen“ Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse vorliegen.
- der **Sobol'sche Sensitivitätsindex** $SM_{(1)}$ (Sobol's main effect sensitivity index /SAL 00, GLA 08/), der die relative Varianz der "besten Approximation" von Y in den Parametern der Gruppe $X_{(1)}$ darstellt. $SM_{(1)}$ gibt zugleich an, welche Varianzreduktion zu erwarten wäre, wenn die Werte der Parameter der Gruppe bekannt wären. Falls $X_{(1)}$ nur einen einzigen Parameter enthält, entspricht $SM_{(1)}$ dem einfachen Korrelationsverhältnis ("correlation ratio"). Zur Berechnung des multiplen Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ sind allerdings zusätzliche Modellrechnungen erforderlich, deren Anzahl sich mit der Anzahl der betrachteten Parametergruppen vervielfacht /SAL 00, KRZ 07/: Bei zwei Parametergruppen werden für die Restgruppe $X_{(2)}$ ein zweites Mal Stichprobenwerte aus den entsprechenden Verteilungen unabhängig vom ersten Mal „ausgespielt“. Diese Werte werden dann mit den Werten der Parameter der Hauptgruppe $X_{(1)}$ aus der ersten Ausspielung kombiniert und die entsprechenden neuen Modellrechnungen durchgeführt. Für jede Ergebnisgröße Y liegen dann zwei Stichprobensätze (y_1, \dots, y_N) und (y'_1, \dots, y'_N) bzw. eine zweidimensionale Stichprobe $(y_1, y'_1), \dots, (y_N, y'_N)$ von Modellrechnungen vor. Der Korrelationskoeffizient

$$r(Y, Y') = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}) \cdot (y'_i - \bar{y}')}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \cdot \sum_{i=1}^N (y'_i - \bar{y}')^2}},$$

dieser zweidimensionalen Stichprobe kann dann als Stichprobenversion des gesuchten Sobol'schen Sensitivitätsindex $SM_{(1)}$ betrachtet werden. Dieses Sensitivitätsmaß ist daher bei sehr rechenzeitintensiven Rechenmodellen kaum praktikabel bzw. bestenfalls nur wenn die Anzahl der betrachteten Parametergruppen sehr klein ist.

In der vorliegenden Untersuchung wurde deshalb durchweg der multiple Rangkorrelationskoeffizient $R^2_{(1)}$ als Gruppensensitivitätsindex für die multiple Sensitivitätsanalyse verwendet. Trotzdem wurden zu Test- und Vergleichszwecken auch die Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ und $SM_{(2)}$ für die Gruppe $X_{(1)}$ der „modellbedingten Parameter“ bzw. für die Gruppe $X_{(2)}$ der „versuchsbedingten Parameter“ mit dem entsprechenden Rechenaufwand bestimmt (Stichprobenumfang jeweils $N=100$).

Die Anwendung der GRS-Methode bei der Durchführung einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wird durch das Programmsystem SUSAs unterstützt /KRZ 94, KLO 99/. Das in der GRS entwickelte Programmsystem SUSAs ermöglicht eine vollständige und weitgehend automatisierte Durchführung einer Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse von skalaren sowie von zeit- und ortsabhängigen Modellergebnissen. Mit SUSAs reduziert sich die Aufgabe des Experten im Rahmen dieser Analyse im Wesentlichen auf die Identifizierung der unsicheren Eingangsparameter und auf die Quantifizierung des Kenntnisstandes zu diesen Parametern.

SUSAs bietet eine große Auswahl von Verteilungstypen für unsichere Eingangsparameter zur Quantifizierung der Unsicherheit von Parametern. Zur Quantifizierung der Abhängigkeiten zwischen unsicheren Parametern können sowohl unterschiedliche Abhängigkeitsmaße als auch bedingte Verteilungen (Verwendung einer unterschiedlichen Verteilung für unterschiedliche Modell-Korrelationen im Rechenprogramm) sowie auch funktionale Beziehungen eingegeben werden. Zur Generierung von Parameterstichprobenwerten steht sowohl die einfache Zufallsauswahl („simple random sampling“) als auch das sog. "Latin-Hypercube" – Auswahlverfahren zur Verfügung.

Nachdem mit jedem der ausgewählten Parametervektoren eine ATHLET-CD-Rechnung durchgeführt wurde, die zu jeder der interessierenden Ergebnisgrößen ein Resultat geliefert hat, ermittelt SUSAs daraus quantitative Unsicherheitsaussagen zu diesen Ergebnissen, z. B. in Form von statistischen Toleranzgrenzen. Für die Sensitivitätsanalyse steht eine Auswahl verschiedener Sensitivitätsmaße zur Verfügung. Sämtliche Unsicherheits- und Sensitivitätsaussagen können sowohl für Einzelwerte (Skalare) als auch für den zeitlichen Ablauf der Ergebnisgrößen bestimmt werden. Die Darstellung der Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse erfolgt in der Regel in grafischer Form.

4.2 Auswahl der unsicheren Parameter und Quantifizierung des Kenntnisstandes

Wesentlich für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sind die Auswahl der unsicheren Parameter und die Quantifizierung ihrer Unsicherheit. Die Informationen für diese Festlegungen erhält man aus Experimenten, in denen wichtige physikalische Phänomene untersucht werden, aus der Validierung der Rechenprogramme durch Nachrechnung dieser Experimente sowie aus der Kenntnis der im Rechenprogramm implementierten Erhaltungs- und Schließungsgleichungen.

Für die Quantifizierung der Unsicherheit der Parameter stand die Erfahrung aus der gesamten bisher durchgeführten ATHLET-CD Validierung zur Verfügung, die bis zu diesem Zeitpunkt, neben dem Störfall in TMI-2, 51 Einzeleffekt- und Bündelexperimente umfasst /AUS 08/. Zusätzliche Informationen lieferten die Sensitivitätsstudien, die im Rahmen der Nachrechnung zum Versuch FPT3 durchgeführt wurden /WEB 09/ sowie die Erkenntnisse aus vorhergehenden Unsicherheitsanalysen, insbesondere aus der Analyse des Bündel-Versuchs QUENCH-07, der mit einem Absorberstab aus Borkarbid durchgeführt worden ist /AUS 07/.

Es wurden insgesamt 40 potentiell wichtige unsichere Parameter identifiziert und deren Unsicherheit quantifiziert. Unter ihnen sind 25 Parameter, welche die Unsicherheiten der physikalischen Modellierung und der numerischen Simulation beschreiben, sowie 15, die sich auf die Unsicherheiten der Versuchsanlage und des durchgeführten Experiments beziehen. Die unsicheren Eingabeparameter und die entsprechenden Verteilungen sind in der Tabelle 4-1 zusammengestellt.

4.2.1 Modellbedingte unsichere Parameter

Die Auswahl der modellbedingten Unsicherheiten hat sich grundsätzlich auf die Beschreibung der Thermohydraulik in der Teststrecke (ATHLET-Modelle) sowie auf die Modelle zum Brennstabverhalten und zur Kernzerstörung (Modul ECORE) konzentriert. Die vorhandene experimentelle Datenbasis reicht nicht aus, um unsichere Eingabeparameter bei der Simulation der Freisetzung und des Transports von Spaltprodukten (Module FIPREM und SOPHAEROS) zu bestimmen und insbesondere zu quantifizieren. Da die Brennstabtemperatur jedoch ein wesentlicher Parameter zur Bestimmung der Spaltproduktfreisetzung ist, wirken sich die Unsicherheiten bei der Bestimmung des

thermischen Verhaltens im Testbündel auch auf die Berechnung der Freisetzung und des Transports der Spaltprodukte aus.

Zu den Modellunsicherheiten zählen:

- 7 Parameter zur Simulation der Thermohydraulik in der Teststrecke. Besonderes Augenmerk wurde dabei auf Parameter gelegt, welche die Strömungsverhältnisse innerhalb des Testbündels beeinflussen können, sowie auf die Beschreibung der Wärmeübertragung zwischen den Brennstäben und dem Kühlmittel (Dampf).
- 4 Parameter zur Beschreibung der Zr-Oxidation
- 4 Parameter zur Modellierung des Absorberstabs aus Borkarbid
- 9 Parameter zur Beschreibung der Bildung und der Verlagerung von metallischer und keramischer Schmelze.
- 1 Parameter zur Bestimmung der Wärmeübertragung durch Strahlung.

4.2.2 Versuchsbedingte unsichere Parameter

Insgesamt wurden 15 anlagen- und versuchsspezifische Unsicherheiten identifiziert und quantifiziert (Tab. 4-1, Parameter 26 bis 40). Parameter 26 bis 28 stellen die Unsicherheiten in Bezug auf die Bündelleistung dar. In der Testanlage wird eigentlich nur die Leistung des Treiberkerns gemessen. Die Bündelleistung ergibt sich aus der Leistung des Treiberkerns mittels eines sogenannten Kopplungsfaktors, der aus Neutronik-Berechnungen abgeleitet wird. Im Versuchsbericht werden Unsicherheitsbereiche von $\pm 5\%$ für den Kopplungsfaktor bzw. $\pm 1\%$ für die gemessene Kernleistung angegeben /BIA 07/.

Die axialen und die radiale Leistungsverteilungen werden auch anhand von Neutronik-Berechnungen bestimmt /PHE 02/. Unsicherheiten in Bezug auf diese Verteilungen wurden dadurch berücksichtigt, dass alternativ auch die für den Versuch FPT2 abgeleiteten Verteilungen verwendet wurden. Ein ähnliches Vorgehen wurde in den in /LUZ 06/ beschriebenen Sensitivitätsstudien angewendet.

Parameter 29 bis 38 beschreiben die Unsicherheiten bezüglich der Stoffeigenschaften der Komponenten des Testbündels. Für die Isolationsschichten (ZrO_2 bzw. ThO_2) der Bündelumfassung wurden die in /PHE 02/ angegebenen Unsicherheitsbereiche berücksichtigt. Der Variationsbereich der Materialien der Brennstäbe und des Absorberstabs wurde aus /SIE 00/ abgeleitet, wobei die größere Unsicherheit der Stoffeigenschaften von UO_2 bei höheren Temperaturen mitberücksichtigt wurde.

Schließlich beschreiben Parameter 39 und 40 die Unsicherheiten im Bezug auf die Dampfeinspeisung mit den Genauigkeiten der entsprechenden Messinstrumente.

Tabelle 4-1 Unsichere Eingabe-Parameter zur Nachrechnung des PHÉBUS Versuchs FPT3

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Bereich		Referenz	Verteilung	Bemerkungen - Datenbasis
				Min.	Max.			
Modellbedingte Unsicherheiten (25)								
Thermohydraulik im Kühlkreislauf								
1	PAR01	Anzahl der axialen Nodes im aktiven Bündelbereich	Bündel	1	2	1	Diskret: 1-50%, 2-50% 1: Nodelänge 50 mm 2: Nodelänge 25 mm	Sensitivitätsstudien
2	ITPMO	Auswahl der Modelle zur Wandreibung	Kühlkreislauf	1	2	1	Diskret: 1-50%, 2-50% Log-Rechteck	Ingenieurmäßige Abschätzung
3	ROUO	Wandrauigkeit (m)	Bündel	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	Log-Rechteck	Ingenieurmäßige Abschätzung
4	ZFFJC	Formverlustkoeffizienten für Querverbindungen im Bündelbereich	IN-OUTER, CROSSFLOW	0.1	10.0	1.0	Log-Rechteck	Ingenieurmäßige Abschätzung
5	IHTC3	Auswahl der Korrelationen zur einphasigen Dampfkonvektion	Bündel (mit Shroud)	1	2	2	Diskret: 1-50%, 2-50%	Auswahl der vorhandenen Korrelationen nach Beurteilung der Programmentwickler
6	OHVFC	Einphasige Konvektion in Dampf (Dittus-Boelter II) - Multiplikationsfaktor	Alle Flächen wo Wärmeübertragung stattfindet	0.8	1.2	1.0	Rechteckverteilung Bedingte Verteilung, falls IHTC3=1	Literatur /GOT 85/, Beurteilung der Experten
	OHVFC	Einphasige Konvektion in Dampf (Mc Eligot) - Multiplikationsfaktor	Alle Flächen wo Wärmeübertragung stattfindet	0.85	1.25	1.0	Rechteckverteilung Bedingte Verteilung, falls IHTC3=2	
7	PAR07	Korrekturfaktor zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit im Spaltbereich	Shroud	0.8	1.2	1	Rechteckverteilung	Sensitivitätsstudien /AUS 03/

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Bereich		Referenz	Verteilung	Bemerkungen - Datenbasis
				Min.	Max.			
Zr-Oxidation								
8	IOXM	Auswahl der Korrelationen zur Zr-Oxidation	Bündel (ECORE)	15	19	19	Diskret: 15 – 30% 16 – 30% 19 – 40%	Erfahrung aus der Programmvalidierung
9	OXXLIM	Obere Grenze der Dampfverfügbarkeit zur Begrenzung der Oxidation	Bündel (ECORE)	0.1	0.5	0.1	Log-Rechteck	QUENCH-07 /AUS 07/
10	OXLMO	Anfängliche Oxidschichtdicke der Schmelzsträhne	Bündel (ECORE)	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	10 ⁻⁶	Log-Rechteck	Erfahrung aus der Programmvalidierung
11	OMOXR	Multiplikationsfaktor für die Oxidationsraten	Testbündel (mit Shroud und Gittern)	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	Literatur /FIC 04, VOL 4/, Beurteilung der Experten
Regelstab – B ₄ C Modellierung								
12	GRTVER	Temperaturkriterium zum Versagen des Führungsrohres (K)	Regelstab (ECORE)	1473.	1573.	1523.	Rechteckverteilung	QUENCH-Versuche
13	IB4CSS	Auswahl der Korrelationen zur B ₄ C-Stahl-Lösung	Regelstab (ECORE)	3	7	6	Diskret: 3 – 25% 5 – 25% 6 – 25% 7 – 25%	Erfahrung aus der Programmvalidierung (QUENCH-07,-09)
14	ICRB4C	Auswahl der Korrelationen zur B ₄ C-Oxidation	Regelstab (ECORE)	1	9	7	Diskret: 1 – 25% 5 – 25% 7 – 25% 9 – 25%	Erfahrung aus der Programmvalidierung (QUENCH-07,-09)

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Bereich		Referenz	Verteilung	Bemerkungen - Datenbasis
				Min.	Max.			
15	FAREA	Multiplikationsfaktor für die Oxidationsfläche wg. B ₄ C-Porosität	Regelstab (ECORE)	1.0	3.0	2.0	Rechteckverteilung	QUENCH-07 /AUS 07/
Verlagerungsmodell (Metallische Schmelze)								
16	TALLOW	Temperaturkriterium zum Hüllrohrversagen (K)	Brennstab (ECORE)	2200.	2300.	2250.	Rechteckverteilung	Erfahrung aus der Programmvalidierung
17	DDTAL	Oxidschichtdicke zur Modellierung des Hüllrohrversagens (m)	Brennstab (ECORE)	2·10 ⁻⁴	6·10 ⁻⁴	3·10 ⁻⁴	Dreieck-Verteilung: 2·10 ⁻⁴ - 3·10 ⁻⁴ - 6·10 ⁻⁴	Erfahrung aus der Programmvalidierung
18	WSLMAX	Verlagerungsgeschwindigkeit (m/s)	Brennstab (ECORE)	0.01	0.1	0.06	Dreieck-Verteilung: 0.01 – 0.06 – 0.1	Erfahrung aus der Programmvalidierung und Sensitivitätsstudien /AUS 03/, /AUS 07/
19	ALAMSL	Wärmekapazität der metallischen Kruste (W/m/K)	Brennstab (ECORE)	5.	30.	30.	Rechteckverteilung	Empfehlungswerte aus dem Anwenderhandbuch /ATH 09/
Verlagerungsmodell (Keramische Schmelze)								
20	TCOMP	Temperaturkriterium zur Schmelzeverlagerung (K)	Brennstab (ECORE)	2550	2650	2600	Rechteckverteilung	PHEBUS-Versuche
21	WSLUO	Verlagerungsgeschwindigkeit (m/s)	Brennstab (ECORE)	0.002	0.1	0.06	Dreieck-Verteilung: 0.002 – 0.06 – 0.1	Erfahrung aus der Programmvalidierung und Sensitivitätsstudien /AUS 03/, /AUS 07/
22	DTSLUO	Temperaturdifferenz zum Erstarren der Schmelze (K)	Brennstab (ECORE)	20.	80.	50.	Rechteckverteilung	Sensitivitätsstudien /AUS 03/
23	BUSLUO	Verhältnis zwischen Schmelzumfang und Hüllrohrumfang	Brennstab (ECORE)	0.125	0.25	0.25	Diskret: 0.125 – 50% 0.250 – 50%	Erfahrung aus der Programmvalidierung

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Bereich		Referenz	Verteilung	Bemerkungen - Datenbasis
				Min.	Max.			
24	ALAMUO	Wärmekapazität der keramischen Kruste (W/m/K)	Brennstab (ECORE)	2.	20.	20.	Rechteckverteilung	Empfehlungswerte aus dem Anwenderhandbuch /ATH 09/
Strahlungsmodell								
25	EPS	Emissivität	Testbündel (mit Shroud)	0.6	0.8	0.7	Rechteckverteilung	Sensitivitätsstudie /AUS 07/
Versuchsbedingte Unsicherheiten (15)								
Bündelleistung								
26	PAR26	Multiplikationsfaktor für die Bündelleistung	Bündel	0.85	0.95	0.90	Rechteckverteilung	Sensitivitätsstudie /WES 09/ und Abschätzung der Experimentatoren /BIA 07/
27	PAR27	Radiale Leistungsverteilung	Bündel	0.0	1.0	0.0	Diskret: 0.0 – 50% (FPT3) 1.0 – 50% (FPT2)	Sensitivitätsstudie, /LUZ 06/
28	PAR28	Axiale Leistungsverteilung	Bündel	0.0	1.0	0.0	Diskret: 0.0 – 50% (FPT3) 1.0 – 50% (FPT2)	Sensitivitätsstudie, /LUZ 06/
Materialeigenschaften								
29	PAR29	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (ZrO ₂)	Shroud	0.65	1.35	1.0	Dreieckverteilung	FPT3 Data Book /PHE 02/ und Sensitivitätsstudie /AUS 03/
30	PAR30	Multiplikationsfaktor für die spezifische Wärmekapazität (ZrO ₂)	Shroud	0.88	1.12	1.0	Rechteckverteilung	FPT3 Data Book /PHE 02/
31	PAR31	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (ThO ₂)	Shroud	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	FPT3 Data Book /PHE 02/
32	PAR32	Multiplikationsfaktor für die spezifische Wärmekapazität (ThO ₂)	Shroud	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	FPT3 Data Book /PHE 02/

Nr.	Parameter	Parameterbeschreibung	Komponente / Geometrie	Bereich		Referenz	Verteilung	Bemerkungen - Datenbasis
				Min.	Max.			
33	PAR33	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (B ₄ C)	Absorberstab	0.85	1.15	1.0	Rechteckverteilung	MATPRO-Daten /SIE 00/
34	PAR34	Multiplikationsfaktor für die spezifische Wärmekapazität (B ₄ C)	Absorberstab	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	MATPRO-Daten /SIE 00/
35	PAR35	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (Zircaloy)	Brennstäbe	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	MATPRO-Daten /SIE 00/
36	PAR36	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (ZrO ₂)	Brennstäbe	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung	MATPRO-Daten /SIE 00/
37	PAR37	Multiplikationsfaktor für die Wärmeleitfähigkeit (UO ₂)	Brennstäbe	0.9	1.1	1.0	Rechteckverteilung T < 2000K: 0.9-1.1 T > 2000K: 0.8-1.2	MATPRO-Daten /SIE 00/
38	PAR38	Multiplikationsfaktor für die spezifische Wärmekapazität (UO ₂)	Brennstäbe	0.98	1.02	1.0	Rechteckverteilung T < 1800K: 0.98-1.02 T > 1800K: 0.87-1.13	MATPRO-Daten /SIE 00/
Randbedingungen								
39	PAR39	Multiplikationsfaktor für den Dampfstrom	Bündeleintritt	0.98	1.02	1.0	Rechteckverteilung	Ingenieurmäßige Abschätzung
40	PAR40	Korrekturfaktor für die Dampftemperatur (K)	Bündeleintritt	-2.0	2.0	0.0	Rechteckverteilung	Ingenieurmäßige Abschätzung

4.3 Durchführung der Unsicherheitsrechnungen mit ATHLET-CD und Auswahl der Ergebnisgrößen zur Unsicherheitsanalyse

Auf der Basis der im letzten Abschnitt beschriebenen unsicheren Parameter wurden 208 ATHLET-CD Datensätze mit der kombinierten Variation der Eingabeparameter mit Hilfe des Programmsystems SUSA erzeugt. Die Werte wurden durch einfache Zufallsauswahl aus den jeweiligen Verteilungen bestimmt (Monte-Carlo-Simulation). Gegenüber der bekannten minimal erforderlichen Anzahl der Modellrechnungen $N_{\min} = 93$ weisen die auf der Basis von 208 Rechnungen ermittelten 95% / 95%-Toleranzgrenzen eine deutlich geringere Konservativität /GLA 08/ auf. Darüber hinaus erhöht sich dabei auch die Genauigkeit der abgeleiteten Sensitivitätskoeffizienten.

Zusätzlich wurden 100 Rechnungen durchgeführt, bei denen nur die versuchsbedingten unsicheren Parameter variiert wurden. Die Modellparameter wurden dabei bei den entsprechenden Werten der Referenzrechnung konstant gehalten. Diese zusätzlichen Rechnungen dienten der Bestimmung der im Kap. 5.2 dargestellten Toleranzgrenzen der Ergebnisse aufgrund der versuchsbedingten Unsicherheiten allein.

Zur Überprüfung der Qualität der abgeleiteten multiplen Rangkorrelationskoeffizienten als Sensitivitätsindizes für Parametergruppen wurden auch die Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ und $SM_{(2)}$ für die Gruppe der modellbedingten bzw. für die Gruppe der versuchsbedingten unsicheren Parameter bestimmt. Dazu wurden noch zwei Sätze von je 100 Rechnungen durchgeführt. Bei den ersten 100 Rechnungen wurden die Stichprobenwerte der modellbedingten Unsicherheiten neu „ausgespielt“, und mit den ursprünglichen Werten der versuchsbedingten Unsicherheiten kombiniert, und umgekehrt bei den übrigen 100 Rechnungen.

Die Unsicherheitsrechnungen wurden mit der aktuellen Code-Version ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A auf dem Garching CRAY-Server cs-gar03 durchgeführt. Der Rechenzeitaufwand betrug etwa 3000 bis 27000 CPU-s je Rechenlauf. Sämtliche Rechnungen wurden am vorgesehenen Zeitpunkt (20000 s nach Versuchsbeginn) beendet, ohne einen einzigen fehlerbedingten Programmabbruch.

Insgesamt wurden 13 Einzelwerte, d. h. skalare Ergebnisgrößen, und 14 zeitabhängige Ergebnisgrößen zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse ausgewählt.

Die ausgewählten Einzelwerte sind in der Tab. 4-2 angegeben. Die Einzelwerte 1 bis 4 und 7 kennzeichnen den Ablauf der Bündelzerstörung. Die Skalare 5 und 6 beziehen sich auf die Oxidation der Hüllrohre und des Absorberstabs. Die Freisetzungen einiger repräsentativer Nuklide (in % des Anfangsinventars) werden durch die Einzelwerte 8 bis 11 gekennzeichnet. Schließlich weisen die Skalare 12 und 13 auf den Transport bzw. auf den Rückhalt des Jod-Nuklids im Kühlkreislauf hin, was ein wichtiges Untersuchungsziel dieses Versuchs darstellt.

Tabelle 4-2 Ausgewählte skalare Ergebnisgrößen

Nr.	Skalare	Referenz-Rechnung	Versuch
1	Zeitpunkt zum ersten Hüllrohrversagen (s)	5111	4870
2	Zeitpunkt zum Versagen des Kontrollstabs (s)	9361	9550
3	Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze (s)	10919	14100 - 14500
4	Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze (s)	16465	~16300
5	Gesamte Wasserstoff-Erzeugung (kg)	0,127	0,12
6	Anteil des oxidierten Borkarbid (-)	88,6	77
7	Gesamte Schmelzmasse (kg)	2,0	1,5
8	Gesamte relative Xe-Freisetzung (% ibi)	85,7	81,5
9	Gesamte relative Jod-Freisetzung (% ibi)	83,8	70
10	Gesamte relative Ba-Freisetzung (% ibi)	14,7	3
11	Gesamte relative U-Freisetzung (% ibi)	0,33	0,03
12	Jod-Freisetzung ins Containment (% ibi)	39,9	33
13	Gasförmige Jod-Freisetzung ins Containment (% ibi)	15,2	30

ibi: Anfangsinventar

Die gewählten zeitabhängigen Rechenergebnisse sind in der Tab. 4-3 aufgelistet. In dieser Tabelle sind auch die Bezeichnungen der entsprechenden Messinstrumente in der Anlage angegeben. Die experimentellen Werte bezüglich Freisetzung und Transport von Spaltprodukten sind als vorläufig zu betrachten, da die Auswertung der Messungen noch nicht abgeschlossen ist.

Um die Handhabung der großen Datenmenge (etwa 60 GB) durch SUSAs zu erleichtern, wurden die ausgewählten Ergebnisgrößen mit Hilfe der Option "Select Plot Data" des ATHLET Support Software Pakets /DEI 09/ aus den ATHLET Plot-Dateien extrahiert.

Tabelle 4-3 Ausgewählte zeitabhängige Ergebnisgrößen

Variable	Messwert (Bezeichnung)	Position in Plot-Datei (Runxxx.pd)
Bündeltemperatur – 200 mm (K)	TCW1 Fuel16	1
Bündeltemperatur – 300 mm (K)	TCW2 Fuel10	2
Bündeltemperatur – 500 mm (K)	TCW12 UST_1	3
Shroud-Temperatur (1/4) – 200 mm (K)	TCK25 Inn_Sh	4
Shroud-Temperatur (1/4) – 300 mm (K)	TCB29 Inn_Sh	5
Shroud-Temperatur (1/4) – 500 mm (K)	TCB35 Inn_Sh	6
Max. Hüllrohrtemperatur (K)	- / -	7
Fluidtemperatur am Bündelaustritt (K)	TCK49 Vlin_F	8
Wasserstoff-Erzeugungsrate (g/s)	SDHY700/701	9
Integrale Wasserstoffproduktion (g)	Int(SDHY700/701)	10
Integrale CO-Erzeugung (g)	CO	11
Integrale CO ₂ -Erzeugung (g)	CO ₂	12
Integrale Cs-Freisetzung (g)	CS	13
Integrale CH ₄ -Erzeugung (g)	CH ₄	14

5 Darstellung und Diskussion der Ergebnisse

5.1 Einzelergebnisse

Die wesentlichen Erkenntnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bezüglich der Einzelergebnisse (Skalare) der Nachrechnung des PHÉBUS-Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD werden an Hand von drei verschiedenen Diagrammtypen dargestellt:

- Kumulative Verteilungsfunktion und Häufigkeitsdichte aus den 208 alternativen Ergebnissen, zusammen mit den zweiseitigen statistischen (95%, 95%)-Toleranzgrenzen. Im Diagramm sind auch der in der Referenzrechnung berechnete (**ref**) und der gemessene Wert (**exp**) aufgezeichnet.
- Werte der Sensitivitätsmaße (Spearman's Rangkorrelationskoeffizient /GLA 08/) aller 40 identifizierten unsicheren Eingabeparameter, als Maß ihrer Beiträge zur Unsicherheit des Rechenergebnisses. Ein positives Vorzeichen bedeutet, dass Eingabeparameter und Ergebnisgröße in die gleiche Richtung gehen, d. h. eine Vergrößerung des Eingabeparameters bewirkt tendenziell eine Erhöhung der Ergebnisgröße und umgekehrt. Bei negativem Vorzeichen gehen Eingabeparameter und Ergebnisgröße in die entgegengesetzte Richtung, d. h. eine Vergrößerung des Eingabeparameters bewirkt tendenziell eine Verringerung der Ergebnisgröße und umgekehrt. Rangkorrelationskoeffizienten, die betragsmäßig kleiner als 0,20 sind, werden als statistisch nicht signifikant eingestuft. Im Kopf des Diagramms wird auch der Wert des Bestimmtheitsmaßes RR^2 angegeben, der den Anteil der Variabilität im Rechenergebnis ausdrückt, der von den Sensitivitätsmaßen aller 40 Parameter erklärt wird. Je näher sein Wert bei eins liegt, desto aussagekräftiger sind die einzelnen Rangkorrelationskoeffizienten.
- Werte der multiplen Sensitivitätsmaße (multiple Korrelations- bzw. Rangkorrelationskoeffizient $R^2_{(1)}$ /GLA 08/) für zwei Parametergruppen: die modellbedingten unsicheren Parameter (Gruppe 1) und die versuchsbedingten unsicheren Parameter (Gruppe 2). Im Diagramm wird auch der Wert des Bestimmtheitsmaßes RR^2 (total) aufgetragen, welcher den Anteil der Variabilität im Rechenergebnis angibt, der von den Sensitivitätsmaßen beider Parametergruppen erklärt wird. Je näher sein Wert bei eins liegt, desto aussagekräftiger sind die multiplen Sensitivitätsmaße.

5.1.1 Ablauf der Bündelzerstörung

Der Ablauf der Bündelzerstörung wird anhand von fünf Einzelergebnissen gekennzeichnet:

1. Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens
2. Zeitpunkt zum Versagen des B_4C -Absorberstabs
3. Zeitpunkt zum Beginn der metallischen Schmelze
4. Zeitpunkt zum Beginn der keramischen Schmelze
5. Gesamte Schmelzmasse am Ende des Versuchs

Die Häufigkeitsdichte und die Verteilungsfunktion für die berechneten Zeitpunkte des ersten Hüllrohrversagens sind in Abb. 5.1-1a dargestellt. Der im Versuch beobachtete Zeitpunkt liegt innerhalb der 95% / 95%-Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse, deren Streuband gering ist. Ein maßgebender Unsicherheitsparameter ist die Bündelleistung (Parameter 26) mit negativem Vorzeichen (Abb. 5.1-1b): je größer sie angenommen wird, desto früher ist das berechnete Versagen des Brennstabhüllrohrs. Weitere wichtige Unsicherheitsfaktoren sind die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht der Bündelumfassung (Parameter 29), die axiale Leistungsverteilung (Parameter 27), die zur Berechnung der Wärmeübertragung durch Strahlung verwendete Emissivität (Parameter 25) und die Wärmeleitfähigkeit im Spaltbereich der Bündelumfassung (Parameter 7). Die versuchsbedingten Unsicherheiten sind also bestimmend für die Gesamtunsicherheit dieser Ergebnisgröße (Abb. 5.1-1c).

Im Allgemeinen berechnet ATHLET-CD einen früheren Zeitpunkt zum Versagen des Absorberstabs. Der experimentell ermittelte Zeitpunkt liegt nah an der oberen Toleranzgrenze der Rechenergebnisse (Abb. 5.1-2a). Wesentliche Unsicherheitsparameter sind (Abb. 5.1-2b): die ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung (Parameter 29), das Temperaturkriterium zum Versagen des Führungsrohres (Parameter 12), die Bündelleistung (Parameter 26) sowie die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit im Spaltbereich der Bündelumfassung (Parameter 7). Auch für diese Ergebnisgröße sind die versuchsbedingten unsicheren Parameter maßgebend (Abb. 5.1-2c).

Abb. 5.1-3a zeigt, dass das Rechenprogramm tendenziell einen sehr frühen Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze berechnet. Die Streubreite der Rechenergeb-

nisse ist beträchtlich. In über 5 % der Rechnungen wurde bis zur Reaktorabschaltung keine metallische Schmelze gebildet. Die abgeleiteten Sensitivitätsmaße weisen auf den Parameter 29 (ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit im Shroud) als maßgebende Unsicherheit für diese Ergebnisgröße hin (Abb. 5.1-3b). Weitere wichtige unsichere Parameter sind die Auswahl der Nodalisierung im Bündelbereich (Parameter 1) und die Oxidschichtdicke, die zur Bestimmung des Versagenskriteriums verwendet wird (Parameter 17). Das negative Vorzeichen für diese modellbedingten Parameter bedeutet, dass je größer der Eingabewert für die Oxidschichtdicke bzw. je detaillierter die Nodalisierung im Bündelbereich desto früher ist der berechnete Beginn der metallischen Verlagerung und somit größer ist die Abweichung zum Versuch.

Insgesamt überwiegt der Beitrag der modellbedingten unsicheren Eingabeparameter zur Gesamtunsicherheit dieser Ergebnisgröße (Abb. 5.1-3c). Es ist jedoch anzumerken, dass sowohl für die Rangkorrelationskoeffizienten als auch für die multiplen Sensitivitätsmaße die berechneten Bestimmtheitsmaße RR^2 relativ niedrig sind. Dies ist ein Hinweis, dass zusätzliche Modellunsicherheiten, die hier nicht berücksichtigt wurden, einen bedeutenden Einfluss auf diese Ergebnisgröße haben könnten.

Auch im Bezug auf den Start der Verlagerung der keramischen Schmelze ist die Streubreite der Rechenergebnisse groß (Abb. 5.1-4a). Hier ist die ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung (Parameter 29) ebenfalls der weitaus dominierende Unsicherheitsfaktor (Abb. 5.1-4b). Weitere bedeutende Parameter sind die Bündelleistung (Parameter 26), die axiale Leistungsverteilung (Parameter 27) sowie das Temperaturkriterium zur Schmelzeverlagerung (Parameter 20).

Überwiegend durch den Beitrag der Wärmeleitfähigkeit des Zirkoniumoxids sind die versuchsabhängigen Unsicherheiten maßgebend für die Gesamtunsicherheit des berechneten Zeitpunkts zum Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze (Abb. 5.1-4c).

Schließlich zeigt die Abb. 5.1-5a die Häufigkeitsdichte und die Verteilungsfunktion für die berechneten Schmelzmassen bei Versuchsende. Der experimentelle Wert liegt nah an der unteren Toleranzgrenze der berechneten Ergebnisse, und auch hier ist die Streubreite der Rechenergebnisse groß, was die große Unsicherheit bei der Simulation der Schmelzebildung und -Verlagerung belegt.

Der dominierende Unsicherheitsparameter für diese Ergebnisgröße ist hier ebenso die ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung (Parameter 29, Abb. 5.1-5b), gefolgt von den Parametern 26 (Bündelleistung), 21 (Verlagerungsgeschwindigkeit der keramischen Schmelze) und 20 (Temperaturkriterium zur Verlagerung der keramischen Schmelze). Das negative Vorzeichen für Parameter 21 bestätigt die Erfahrung aus früheren Sensitivitätsstudien /AUS 03/: je kleiner die angegebene Verlagerungsgeschwindigkeit desto größer die berechnete Gesamtmasse der Schmelze.

Insgesamt liefern die versuchsbedingten Unsicherheiten den weitaus größten Beitrag zur Gesamtunsicherheit der berechneten Schmelzmasse (Abb. 5.1-5c).

5.1.2 Oxidationsprozesse

Zwei Einzelergebnisse wurden ausgewählt, um den Einfluss der unsicheren Eingabeparameter auf die Güte der Simulation der Oxidationsvorgänge im Testbündel zu untersuchen: die gesamte Masse des erzeugten Wasserstoffs und der Anteil des oxidierten Absorbermaterials. Diese Auswertung wird durch die Analyse der entsprechenden zeitabhängigen Größen im Kap. 5.2.2 ergänzt.

Abb. 5.1-6a zeigt die Häufigkeitsdichte und die entsprechende Verteilungsfunktion für die berechnete Wasserstoffproduktion. Der entsprechende Messwert liegt etwa in der Mitte der 95% / 95%-Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse mit einem Streuband von $\pm 20\%$, was als ein sehr gutes Ergebnis zu betrachten ist, insbesondere in Anbetracht des breiten Variationsbereichs der unsicheren Parameter.

Die abgeleiteten Sensitivitätsmaße weisen die Auswahl der Nodalisierung im Bündelbereich (Parameter 1) als die dominierende Unsicherheit - mit negativem Vorzeichen - für diese Ergebnisgröße aus (Abb. 5.1-6b). Wie im Kap. 5.2.2 gezeigt wird, führt eine detailliertere Nodalisierung zu einer besseren Wiedergabe der in diesem Versuch verkürzten Dampfzugsperiode und daher zu einer Verringerung der gesamten H_2 -Erzeugung. Die Auswahl der Korrelationen zur Beschreibung der Zr-Oxidation (Parameter 8) spielt eher eine untergeordnete Rolle. Insgesamt überwiegt der Beitrag der modellbedingten unsicheren Parameter zur Gesamtunsicherheit der berechneten H_2 -Erzeugung gegenüber dem der versuchsbedingten Parameter (Abb. 5.1-6c).

Im Allgemeinen überschätzt das Rechenprogramm die B_4C -Oxidation. Der experimentell ermittelte Anteil des oxidierten Borkarbid liegt nah an der unteren Toleranzgrenze der berechneten Ergebnisse (Abb. 5.1-7a). Die maßgeblichen Unsicherheitsparameter sind einerseits die Auswahl der Nodalisierung im Bündelbereich (Parameter 1), andererseits die Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht in der Bündelumfassung (Parameter 29), beide mit negativem Vorzeichen (Abb. 5.1-7b): je kleiner die als Funktion der lokalen Temperatur angegebene ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit, desto geringer der Wärmeverlust über die Umfassung und umso höher werden die Bündeltemperaturen, was eine stärkere Oxidation des Borkarbid ergibt.

Weitere wichtige Unsicherheitsfaktoren sind die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten bei einphasiger Dampfkonvektion (Parameter 6), die Auswahl der Korrelationen zur B_4C -Oxidation (Parameter 14) und der Multiplikationsfaktor für die Oxidationsfläche zur Berücksichtigung der B_4C -Porosität (Parameter 15). Insgesamt gleichen sich die Beiträge der modellbedingten und der versuchsbedingten unsicheren Parameter zur Gesamtunsicherheit der berechneten B_4C -Oxidation aus (Abb. 5.1-7c).

Sowohl für die erzeugte Wasserstoffmenge als auch für den Anteil des oxidierten Borkarbid sind die Bestimmtheitsmaße RR^2 relativ niedrig, was die Aussagekraft der abgeleiteten Sensitivitätsmaße beeinträchtigt. Ein möglicher Grund dafür ist die große Anzahl von diskreten Werten der spezifizierten unsicheren Eingabeparameter, insbesondere bei der Auswahl von Korrelationen zur Oxidation und zur B_4C -Stahl-Wechselwirkung (Parameter 8, 13 und 14). Der Stichprobenumfang von 208 Rechnungen reicht nicht aus, um alle möglichen Kombinationen der diskreten Parameterwerte (insgesamt 3072) abzudecken. Durch Verbesserung des Kenntnisstandes soll dies in zukünftigen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen vermieden werden. Den Programmentwicklern wäre dann zu empfehlen, die Anzahl der angebotenen Modellkorrelationen auf der Basis der bisherigen Erkenntnisse aus der Programmvalidierung weitgehend zu verringern.

5.1.3 Freisetzung von Spaltprodukten

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse in Bezug auf die berechnete Spaltproduktfreisetzung werden anhand der Auswertung von drei Nukliden exemplarisch dargestellt: Xe (Edelgas, flüchtig), Ba (halbflüchtig) und U (Actinid, schwer). Es ist dabei anzumerken, dass hier nur der Einfluss der Simulation des thermischen Verhaltens im

Testbündel betrachtet wird, da in der Analyse keine potentiell unsicheren Parameter bei der Modellierung der Freisetzung im Modul FIPREM berücksichtigt wurden.

Die kumulativen Verteilungsfunktionen in den Abb. 5.1-8a, -9a und -10a zeigen, dass die experimentell ermittelte Freisetzung des flüchtigen Spaltprodukts Xe innerhalb der 95%-95% Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse liegt, während sich die entsprechenden Messwerte für Ba und U deutlich darunter befinden. Diese Ergebnisse belegen die Tendenz des Rechenprogramms, die Freisetzung von halbflechtigen und schweren Spaltprodukten zu überschätzen.

Der dominierende unsichere Parameter zur Simulation der Spaltproduktfreisetzung ist die ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung (Abb. 5.1-8b, -9b und 10b). Je kleiner die Wärmeleitfähigkeit ist, desto kleiner ist die Wärmeabfuhr aus dem Testbündel, was zu höheren Brennstabtemperaturen und zu größeren Freisetzungen führt. Weitere wichtige Parameter sind Parameter 26 (Bündelleistung) und 21 (Verlagerungsgeschwindigkeit der keramischen Schmelze). Je niedriger diese Geschwindigkeit, desto länger bleibt die Schmelze in den heißen Bereichen des Testbündels, was eine stärkere Spaltproduktfreisetzung ergibt.

Für die Freisetzung von flüchtigen Spaltprodukten spielt die gewählte Nodalisierung im Bündelbereich (Parameter 1) eine wichtige Rolle (Abb. 5.1-8c). Wie in Abs. 5.1.1 schon gesehen, führt eine detailliertere Nodalisierung tendenziell zu einem früheren Versagen der Brennstäbe durch Bersten und somit zu insgesamt größeren Mengen freigesetzter Spaltgase.

Überwiegend durch den Beitrag der Wärmeleitfähigkeit des Zirkoniumoxids sind auch hier die versuchsabhängigen Unsicherheiten maßgebend für die Gesamtunsicherheit der berechneten Spaltproduktfreisetzung (Abb. 5.1-8c, -9c und -10c).

5.1.4 Jod-Transport im Kühlkreislauf

Ein bedeutsamer Unterschied zwischen den Experimenten FPT2 (mit Ag-Cd-In als Absorbermaterial) und FPT3 (Borkarbid) liegt im Anteil der gasförmigen Jod-Verbindungen, der in den Containment-Behälter freigesetzt wurde. Im Versuch FPT3 ist dieser Anteil (etwa 30% des Jod-Anfangsinventars) deutlich größer als im Versuch FPT2 (< 1% des Anfangsinventars), obwohl die gesamten Jod-Freisetzungen aus dem

Bündel in beiden Versuchen ähnlich waren. Es gibt noch keine abschließende Erklärung für dieses Verhalten, das aber vom Rechenprogramm zumindest qualitativ wiedergegeben wird: etwa 2% Iod für den Versuch FPT2 /TRA 08, AUS 08a/, gegenüber 15% für FPT3.

Eine Auswertung der Rechenergebnisse beider Nachrechnungen zeigt, dass die Jod-Freisetzung ins Containment während des Versuchs FPT2 maßgeblich durch die Aerosolverbindung AgI (Silberjodid) erfolgt, die im Versuch FPT3, mit Borkarbid als Absorbermaterial, kaum vorhanden ist.

In der vorliegenden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurde ausschließlich der Einfluss der Simulation des thermischen Bündelverhaltens und der Thermohydraulik im Kühlkreislauf berücksichtigt. Die vorhandene Datenbasis reicht nicht aus, um potentielle Unsicherheiten bei der Modellierung des Spaltprodukttransports im Modul SOPHAEROS zu quantifizieren.

Die im Versuch ermittelte gesamte Jod-Freisetzung ins Containment liegt innerhalb der 95%/95%-Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse (Abb. 5.1-11a). Der Jod-Rückhalt im Kühlkreislauf kann also vom Rechenprogramm zufriedenstellend nachgebildet werden. Eine detaillierte Analyse der Jod-Ablagerung in den verschiedenen Komponenten der Teststrecke kann aber erst durchgeführt werden, wenn die entsprechenden experimentellen Ergebnisse verfügbar sind.

Die dominierenden Unsicherheiten für diese Ergebnisgröße sind die Parameter 5 und 6, die den Wärmeübergang zwischen Kühlmittel und metallischen Strukturen entlang der Teststrecke steuern (Abb. 5.1-11b), konsistent mit der Tatsache, dass sie maßgebend für die Berechnung der Jod-Ablagerung sind. Auch zu berücksichtigen ist der Einfluss des Parameters 9 (Obere Grenze der Dampfverfügbarkeit zur Begrenzung der Oxidation), da die Jod-Freisetzung aus dem Bündel während der Oxidationsphase infolge der hohen Brennstabtemperaturen größer wird. Insgesamt liefern die modellbedingten Unsicherheiten den weitaus größten Beitrag zur Gesamtunsicherheit dieser Ergebnisgröße (Abb. 5.1-11c).

Bezüglich des gasförmigen Anteils der Jod-Freisetzung ins Containment zeigt die Abb. 5.1-12a, dass das Rechenmodell den experimentell ermittelten Wert deutlich überschätzt. Die abgeleiteten Sensitivitätsmaße (Abb. 5.1-12b) weisen auf die Parameter 29 (ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit im Shroud) und Parameter 6 (Wärmeübergangskoeffizient

für einphasige Dampfkonvektion) als dominierende Unsicherheitsfaktoren für diese Ergebnisgröße hin. Der niedrige Wert des entsprechenden Bestimmtheitsmaßes ($RR^2 = 0,36$) stellt jedoch diese Aussage in Frage. Dasselbe gilt für die Bestimmung der multiplen Sensitivitätskoeffizienten (Abb. 5.1-12c). Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die hier betrachteten unsicheren Parameter, die sich auf die Simulation der Bündelzerstörung beziehen, einen geringen Einfluss auf die Nachbildung der gasförmigen Jod-Verbindungen im Kühlkreislauf mit dem Modul SOPHAEROS haben.

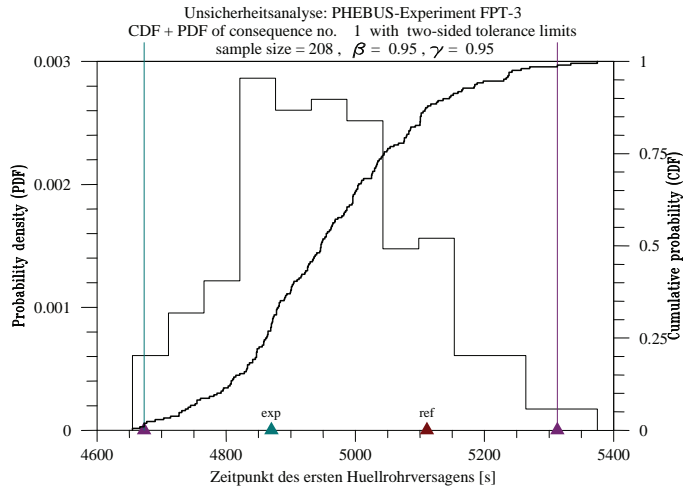


Bild 5.1-1a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens

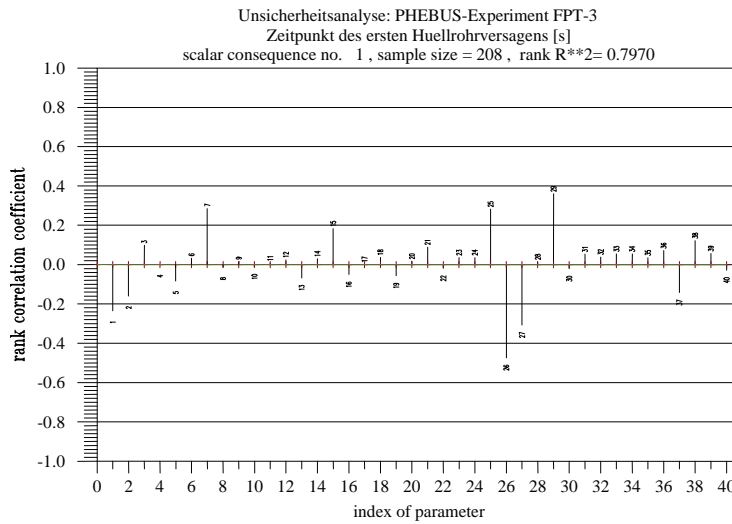


Bild 5.1-1b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens

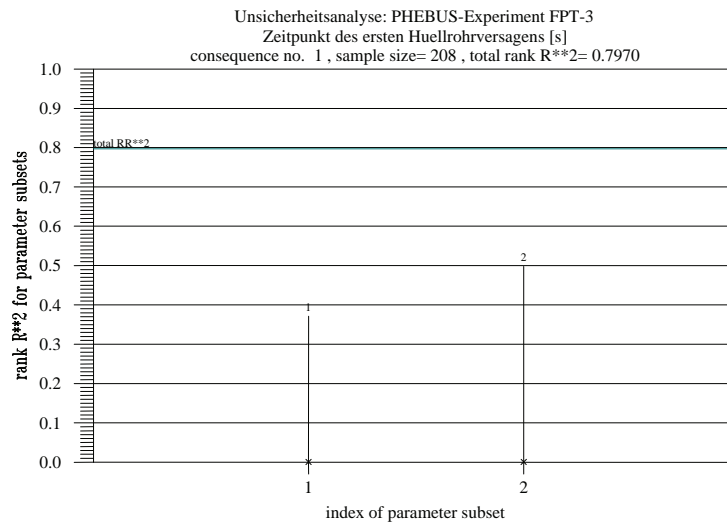


Bild 5.1-1c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des ersten Hüllrohrversagens

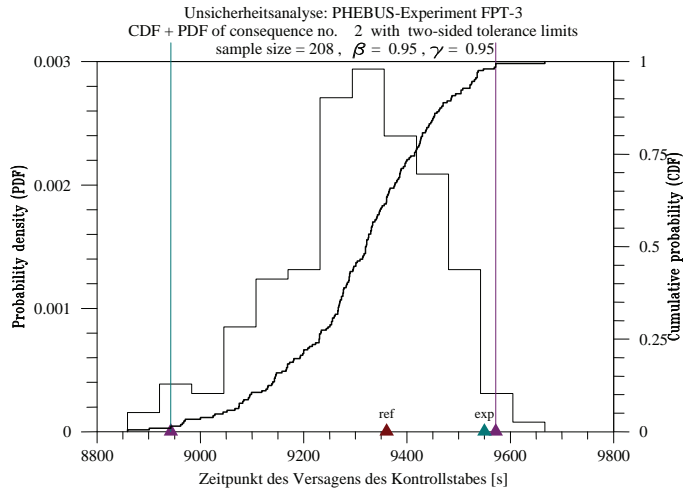


Bild 5.1-2a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs

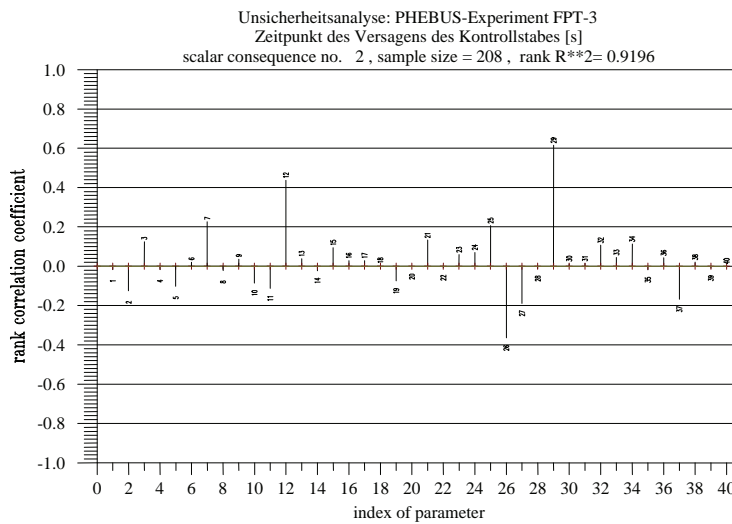


Bild 5.1-2b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs

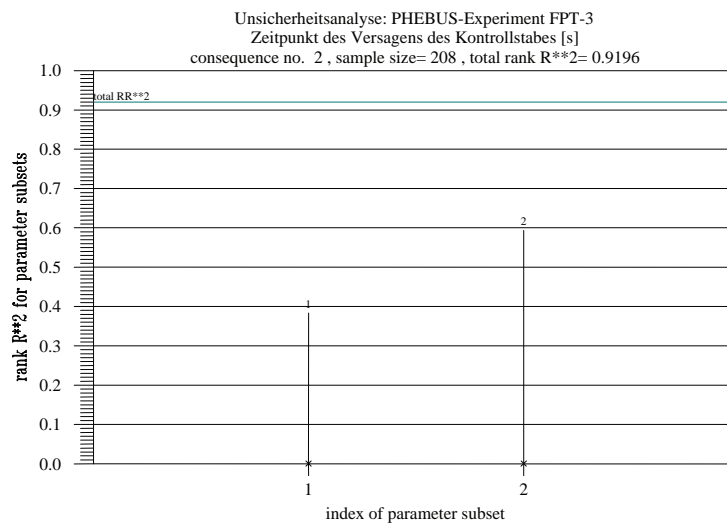


Bild 5.1-2c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Zeitpunkt des Versagens des Kontrollstabs

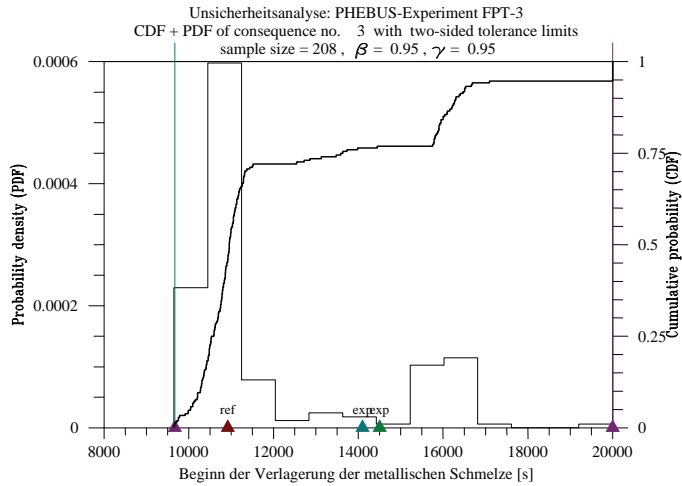


Bild 5.1-3a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze

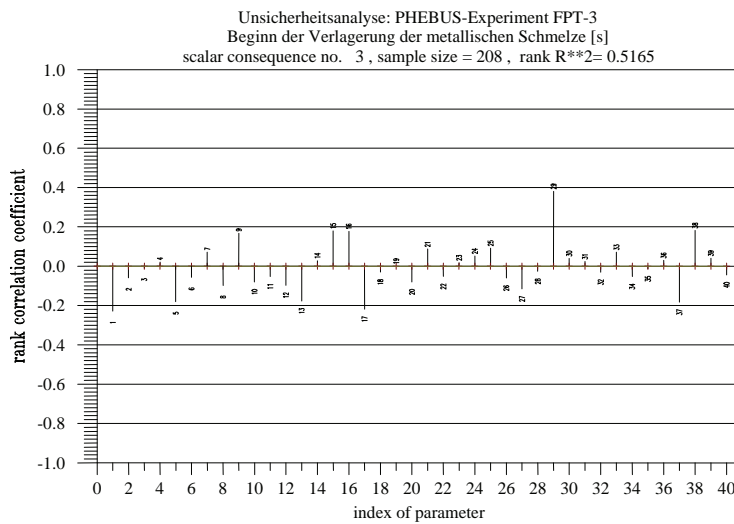


Bild 5.1-3b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze

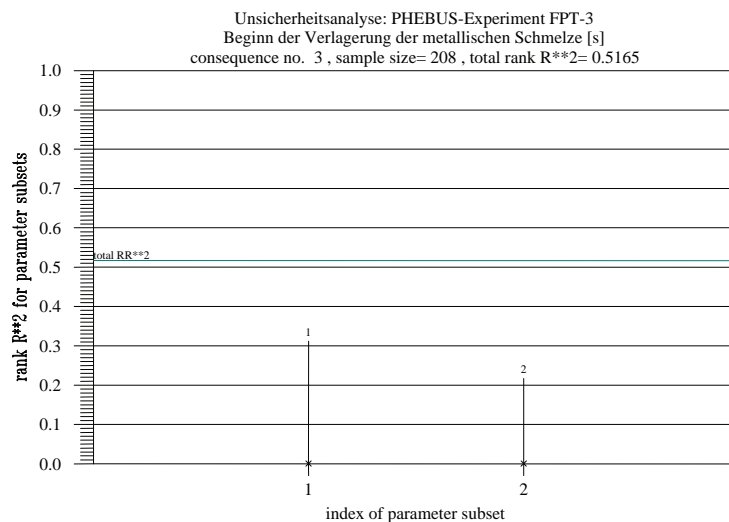


Bild 5.1-3c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der metallischen Schmelze

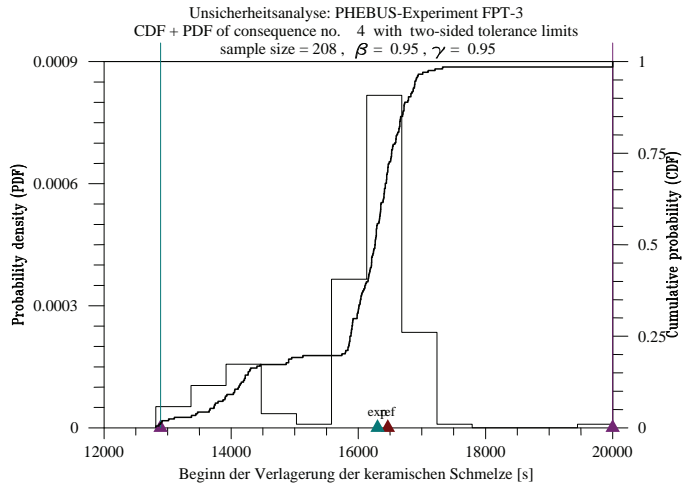


Bild 5.1-4a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze

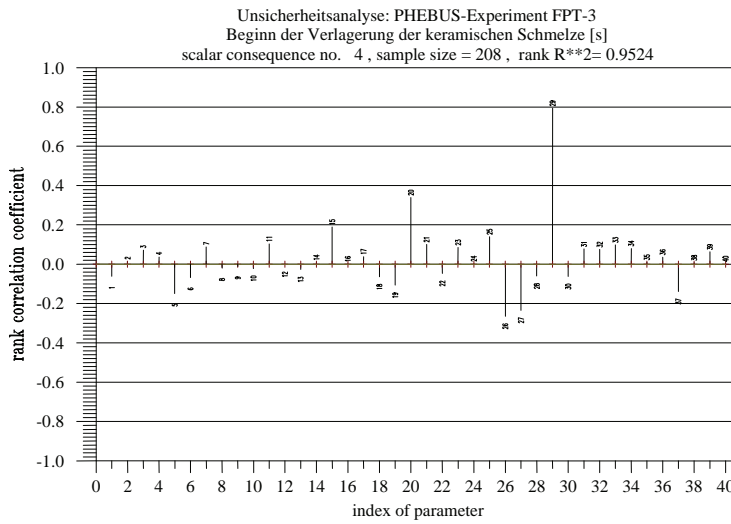


Bild 5.1-4b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze

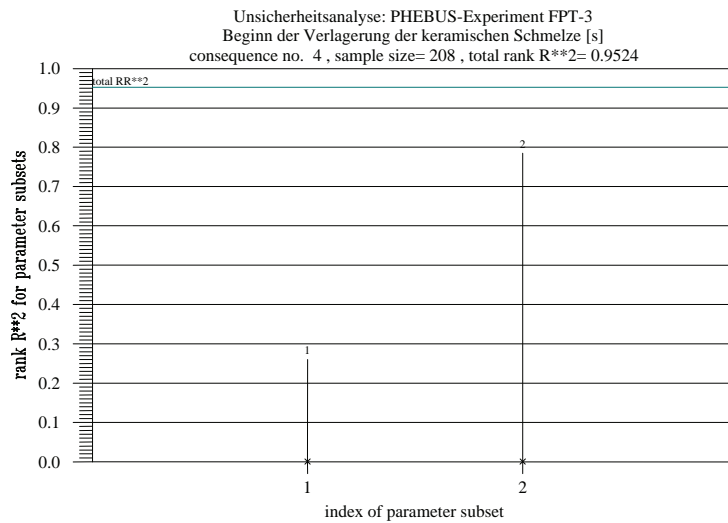


Bild 5.1-4c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Beginn der Verlagerung der keramischen Schmelze

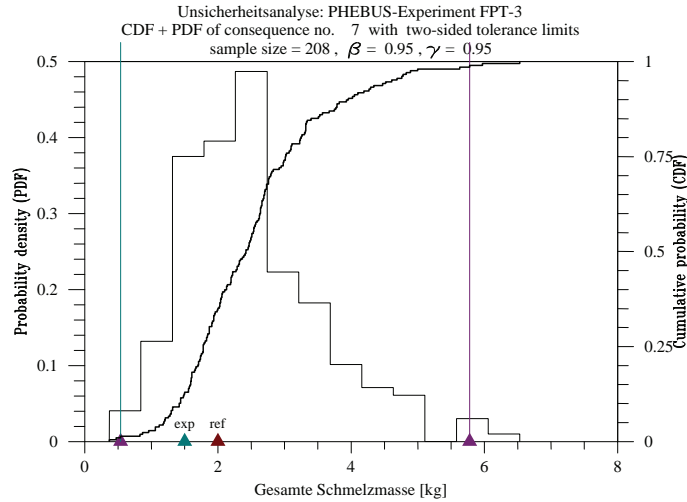


Bild 5.1-5a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze

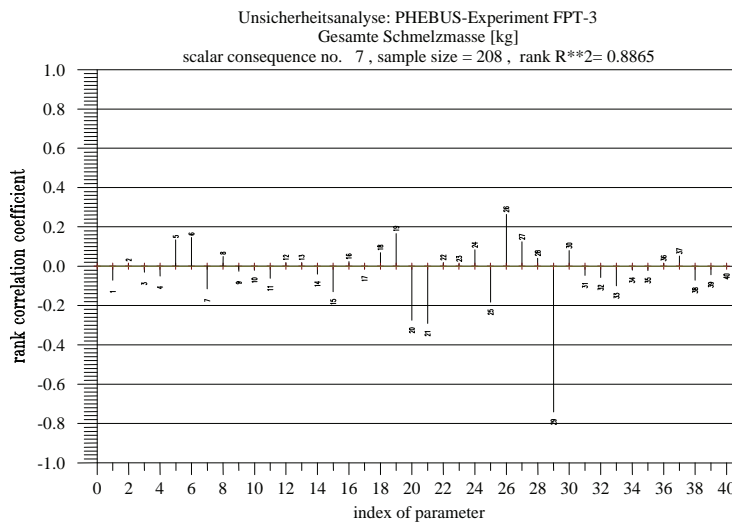


Bild 5.1-5b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze

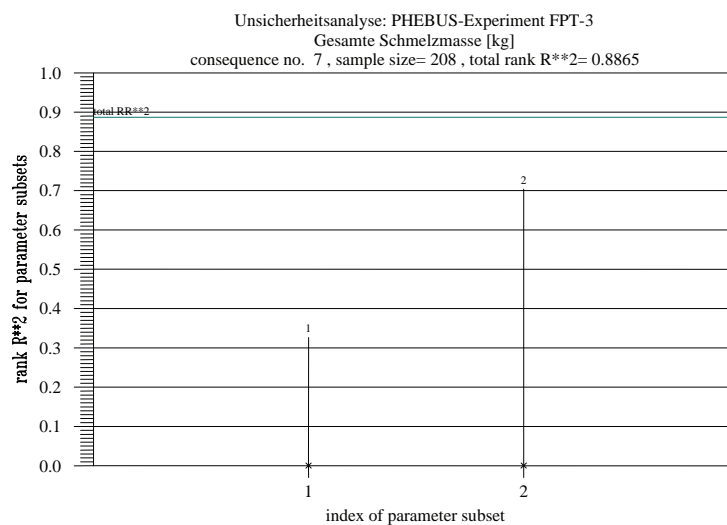


Bild 5.1-5c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Gesamtmasse der Schmelze

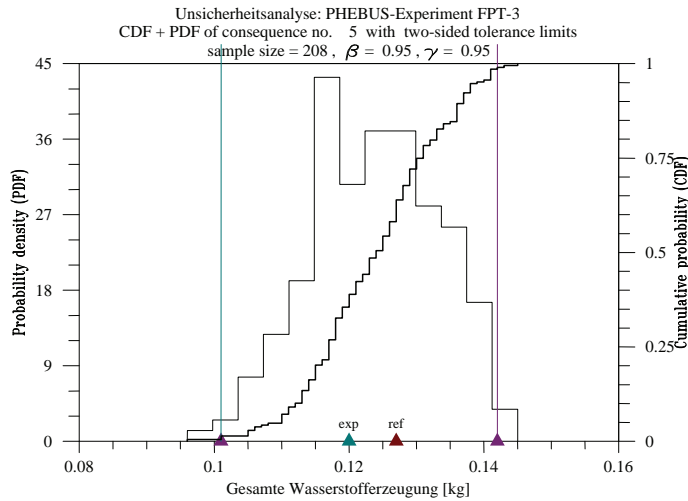


Bild 5.1-6a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete gesamte Wasserstoffzeugung

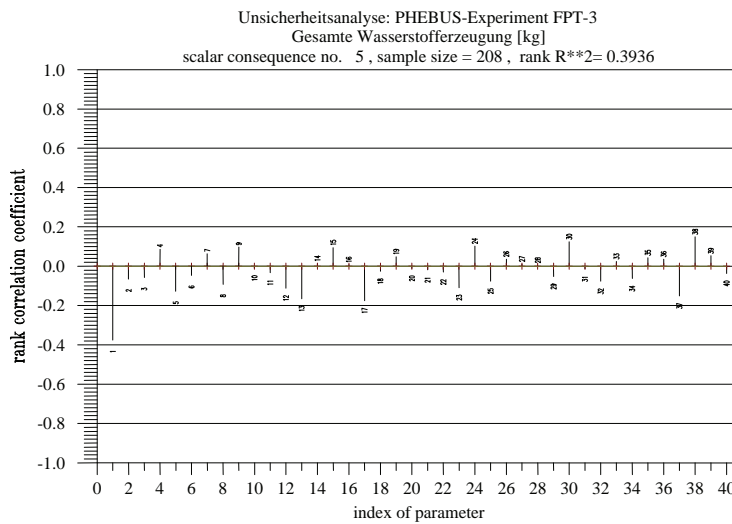


Bild 5.1-6b: Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstoffzeugung

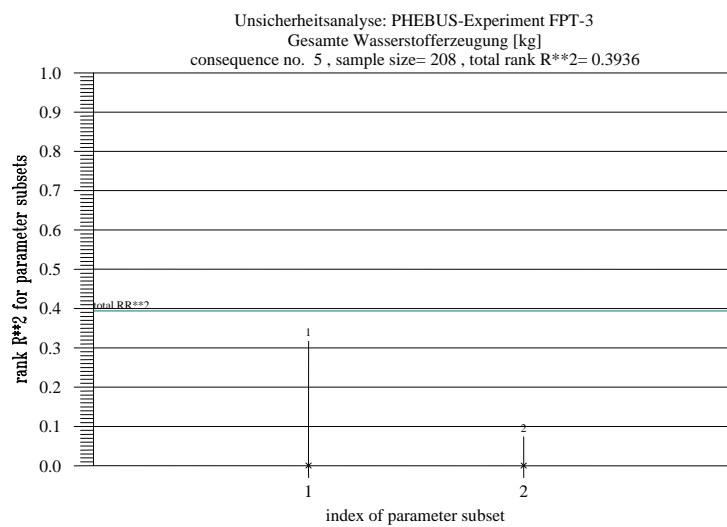


Bild 5.1-6c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstoffzeugung

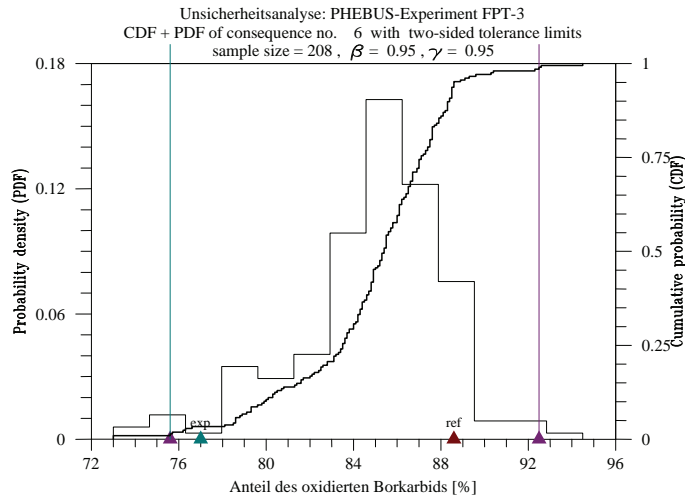


Bild 5.1-7a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid

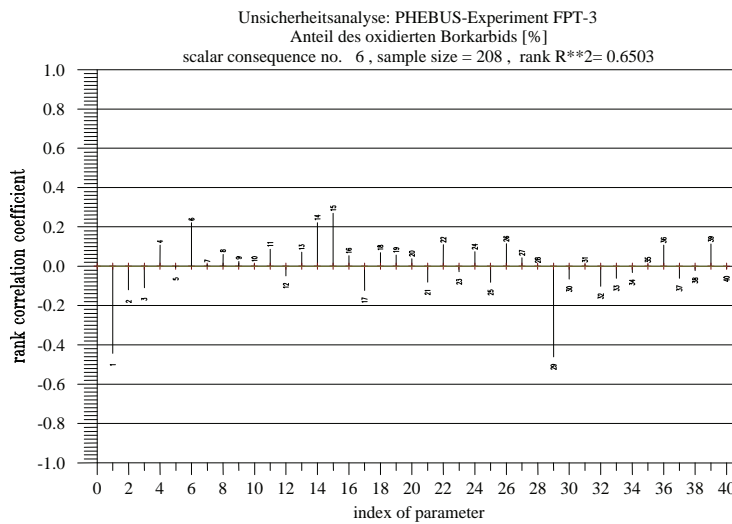


Bild 5.1-7b: Sensitivitätsmaße für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid

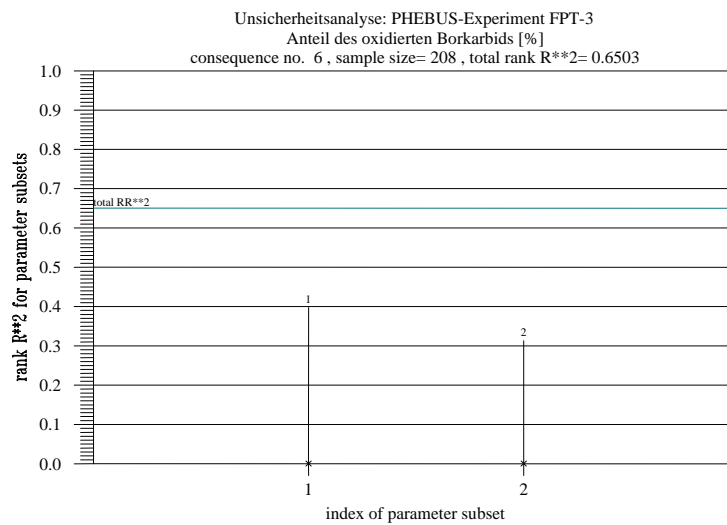


Bild 5.1-7c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten Anteil des oxidierten Borkarbid

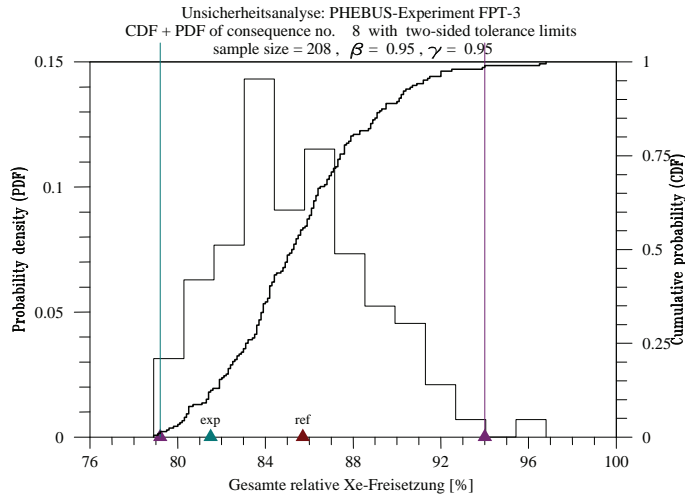


Bild 5.1-8a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Xe-Freisetzung

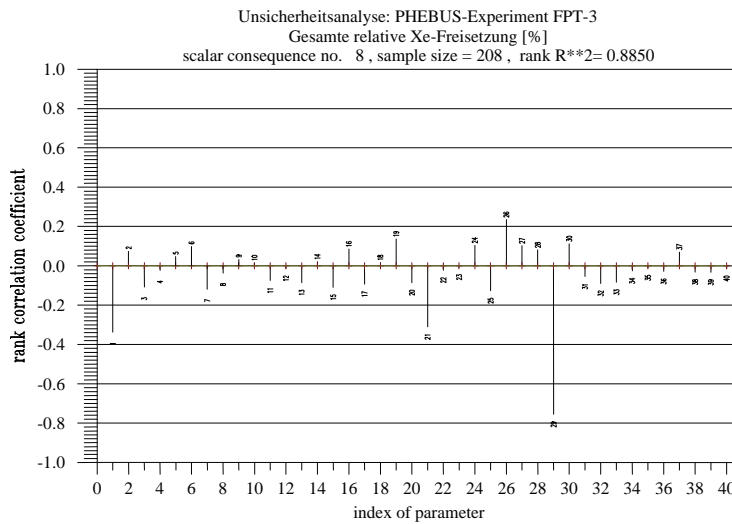


Bild 5.1-8b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Xe-Freisetzung

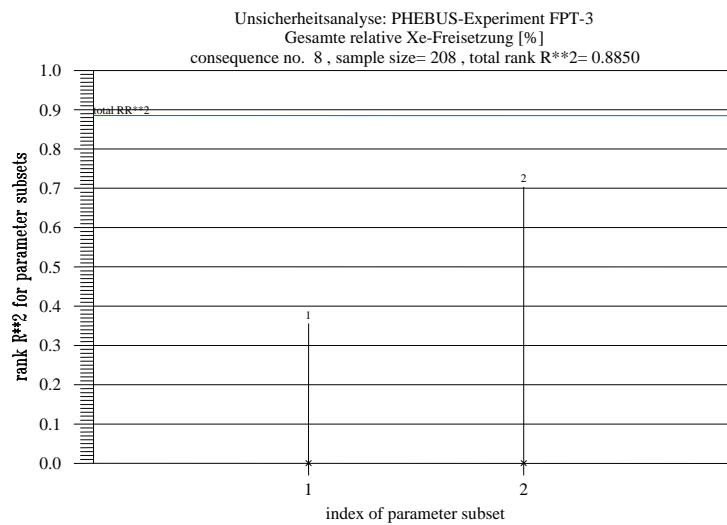


Bild 5.1-8c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Xe-Freisetzung

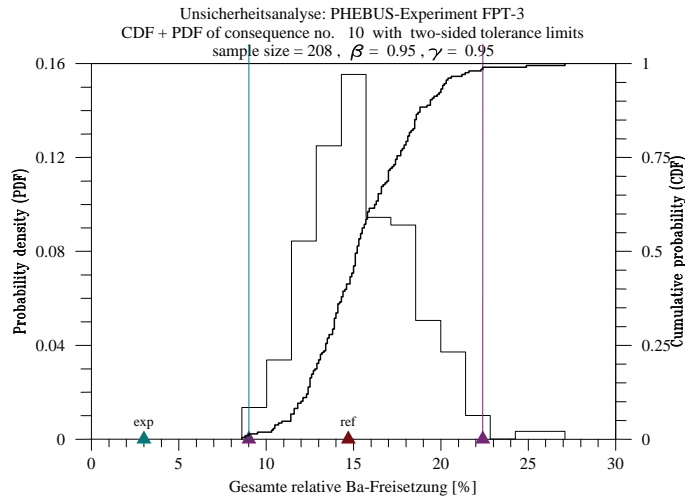


Bild 5.1-9a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Ba-Freisetzung

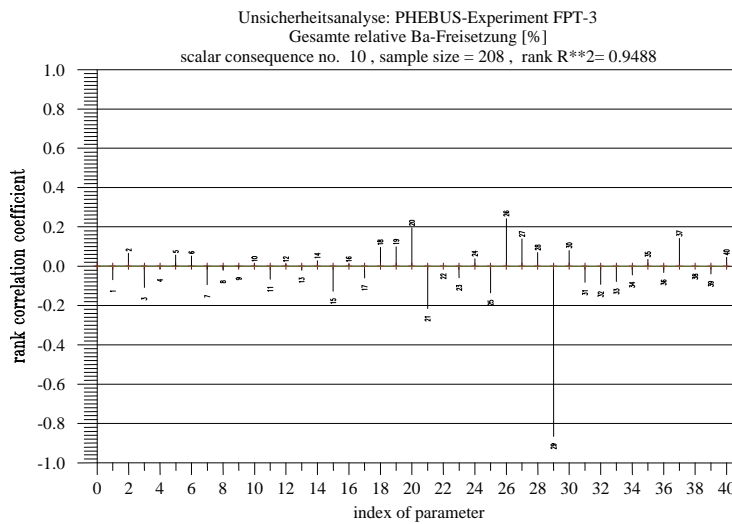


Bild 5.1-9b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Ba-Freisetzung

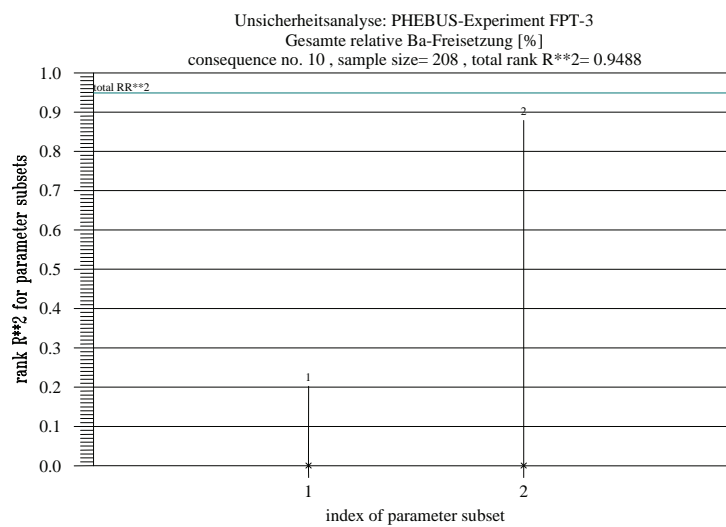


Bild 5.1-9c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Ba-Freisetzung

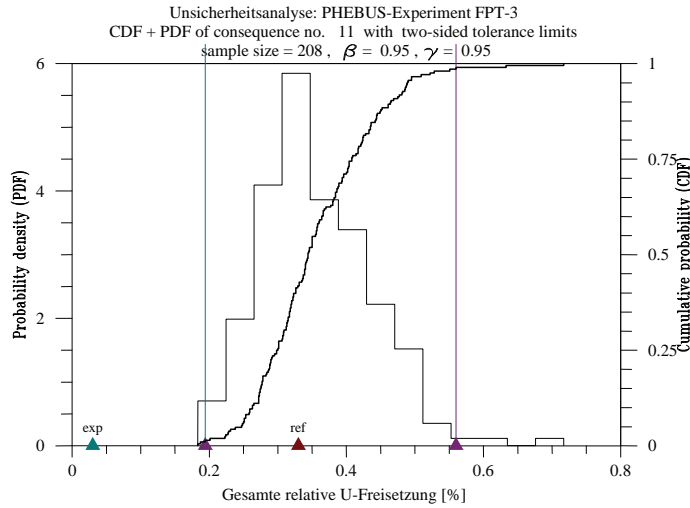


Bild 5.1-10a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete U-Freisetzung

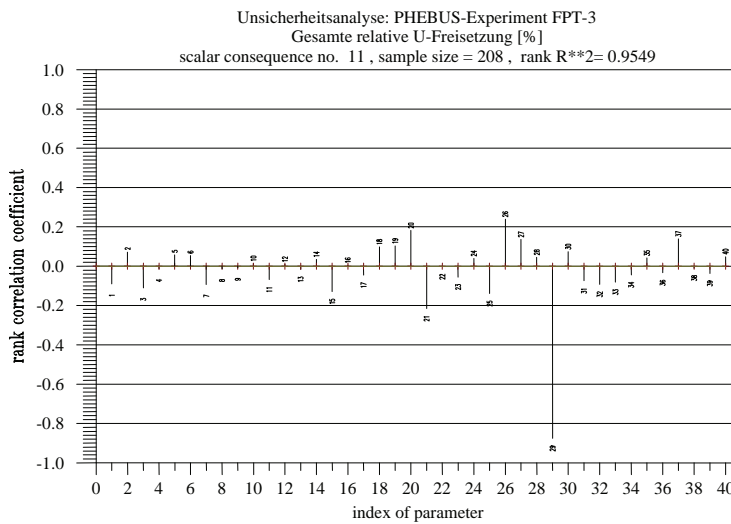


Bild 5.1-10b: Sensitivitätsmaße für die berechnete U-Freisetzung

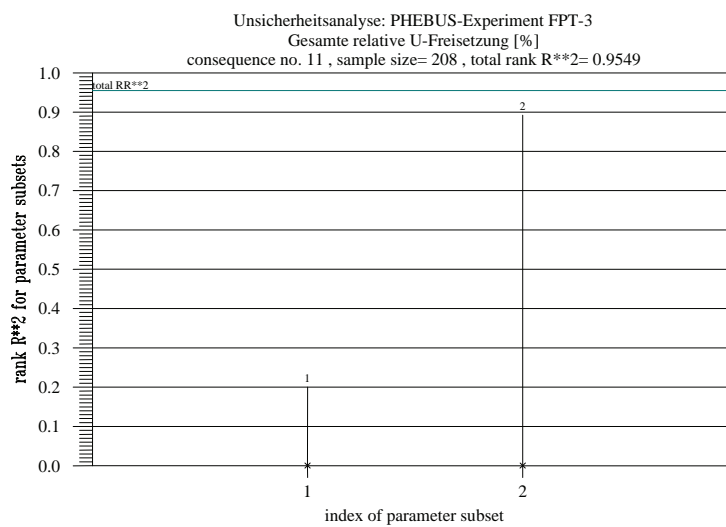


Bild 5.1-10c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete U-Freisetzung

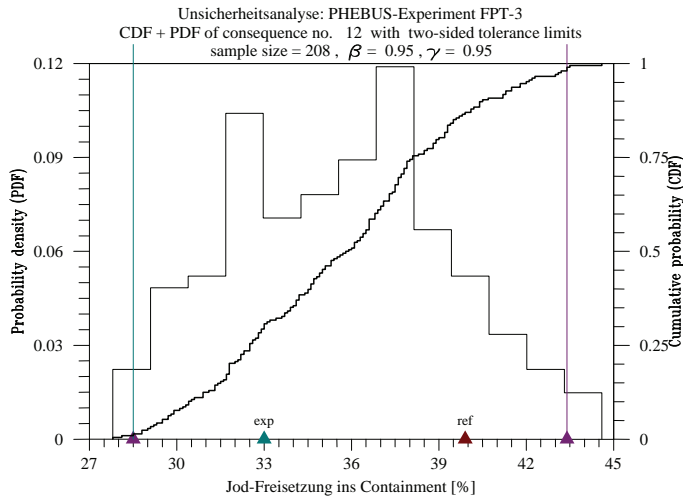


Bild 5.1-11a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment

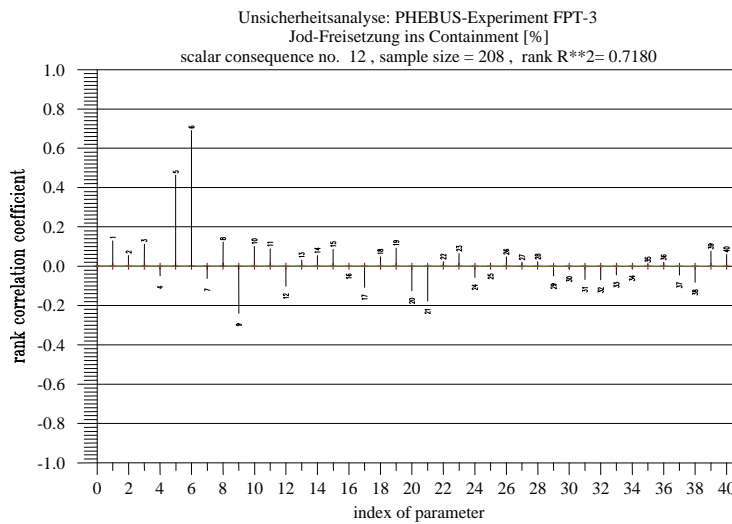


Bild 5.1-11b: Sensitivitätsmaße für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment

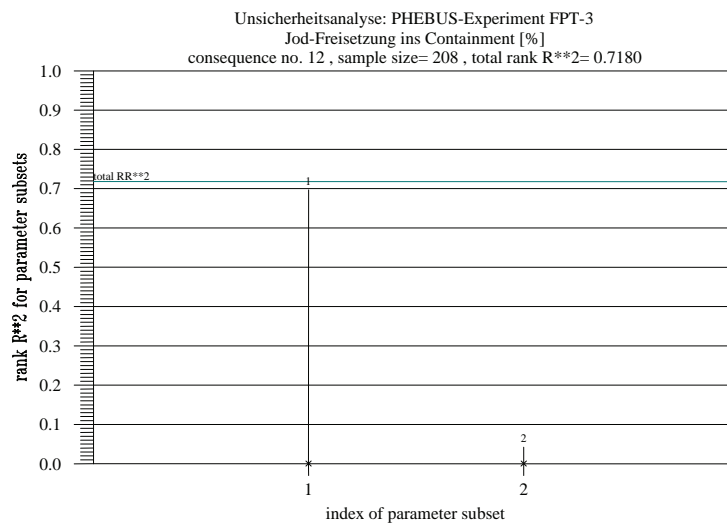


Bild 5.1-11c: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Jod-Freisetzung ins Containment

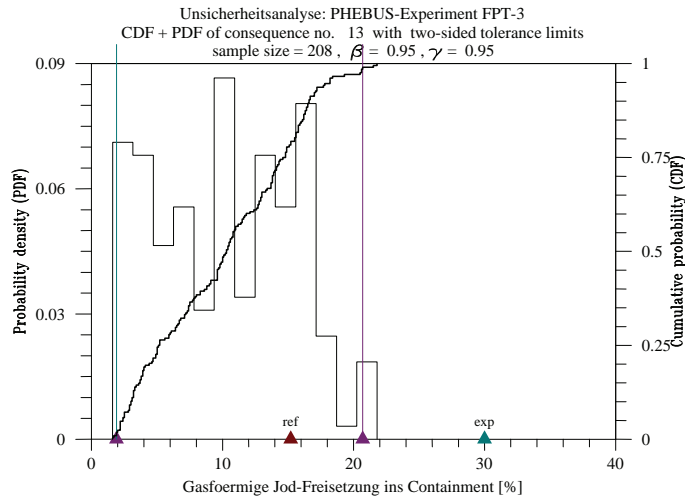


Bild 5.1-12a: Häufigkeitsdichte und kumulative Verteilungsfunktion für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment

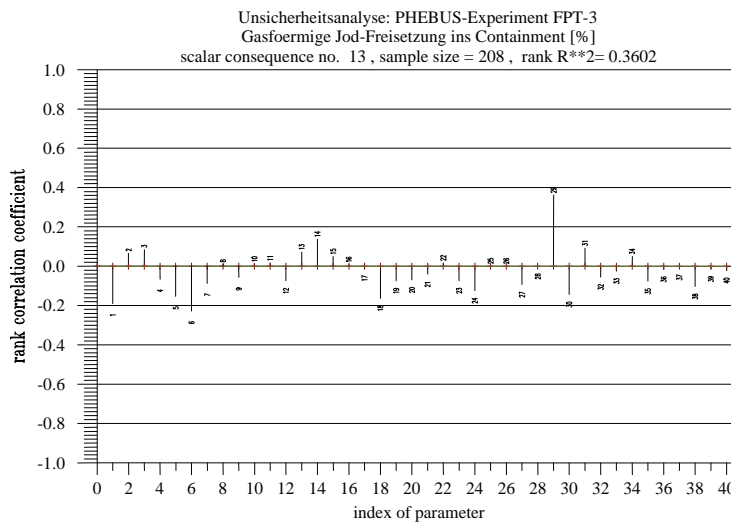


Bild 5.1-12b: Sensitivitätsmaße für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment

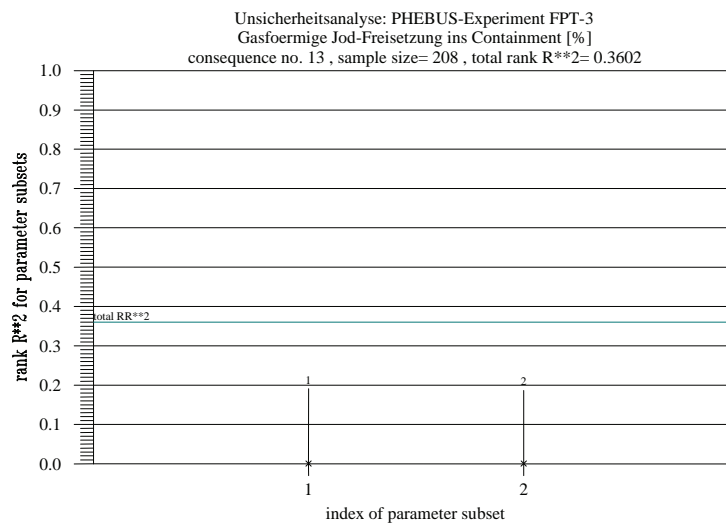


Bild 5.1-12c: Multiple Sensitivitätsmaße für den berechneten gasförmigen Anteil der Jod-Freisetzung ins Containment

5.2 Zeitabhängige Ergebnisgrößen

Die wesentlichen Erkenntnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse von zeitabhängigen Ergebnissen der Nachrechnung des PHÉBUS-Versuchs FPT3 mit ATHLET-CD werden mit Hilfe von vier verschiedenen Diagrammtypen zusammengefasst:

- Zeitlicher Verlauf des zweiseitigen (95%, 95%)- Toleranzintervalls der mit Berücksichtigung aller unsicheren Parameter berechneten Ergebnisgröße (in **rot**). Im Diagramm werden auch die Ergebnisse der Referenzrechnung (in schwarz) und die entsprechenden Messwerte (in **blau**) aufgetragen;
- Zeitlicher Verlauf des zweiseitigen (95%, 95%)- Toleranzintervalls der mit Berücksichtigung der experimentell bedingten unsicheren Parameter berechneten Ergebnisgröße (in **rot**). Im Diagramm werden auch die Ergebnisse der Referenzrechnung (in schwarz) und die entsprechenden Messwerte (in **blau**) aufgetragen;
- Zeitlicher Verlauf der Sensitivitätsmaße (Spearman's Rangkorrelationskoeffizient /KRZ 90b, HOF 93, SAL 00/) aller 40 identifizierten unsicheren Parameter für die jeweilige Ergebnisgröße. Positives Vorzeichen bedeutet, dass Eingabeparameterwert und Ergebnisgröße in die gleiche Richtung gehen, d.h. eine Vergrößerung des Eingabeparameterwerts bewirkt tendenziell eine Erhöhung der Ergebnisgröße und umgekehrt. Bei negativem Vorzeichen gehen Eingabeparameterwert und Ergebnisgröße in die entgegengesetzte Richtung, d.h. eine Vergrößerung des Parameterwerts bewirkt tendenziell eine Verringerung der Ergebnisgröße und umgekehrt. Je größer der Betrag des jeweiligen Maßes, desto bedeutsamer ist die Unsicherheit des Eingabeparameters für die Ergebnisunsicherheit. Bei dem Stichprobenumfang von 208 Rechnungen sind Werte des Rangkorrelationskoeffizienten, die betragsmäßig kleiner als etwa 0,15 bis 0,20 sind, statistisch nicht signifikant. Sie können daher vernachlässigt werden.
- Zeitlicher Verlauf der beiden multiplen Rangkorrelationskoeffizienten $R^2_{(1)}$ und $R^2_{(2)}$ für zwei Parametergruppen: die modellbedingten Parameter (Gruppe 1) und die experimentell bedingten Parameter (Gruppe 2). Im Diagramm wird auch der zeitliche Verlauf der Werte des gesamten Bestimmtheitsmaßes RR^2 (total) als gestrichelte Linie dargestellt. RR^2 (total) gibt den Anteil der Variabilität im Rechenergebnis an, der von den Sensitivitätsmaßen der beiden Parametergruppen zusammen erklärt

wird. Je näher sein Wert bei eins liegt, desto aussagekräftiger sind die Sensitivitätsmaße.

Zusätzlich zu den beiden obigen zeitabhängigen multiplen Rangkorrelationskoeffizienten wurden mit dem entsprechenden Rechenaufwand (Stichprobenumfang jeweils $N=100$) auch die zeitabhängigen Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ und $SM_{(2)}$ für die beiden Parametergruppen 1 und 2 bestimmt. Da sich eine weitgehende Übereinstimmung der Ergebnisse dieser beiden Formen der Sensitivitätsanalyse ergab, wurde auf eine vollständige Darstellung der Sobol'schen Sensitivitätsindizes in diesem Bericht verzichtet. Lediglich die Bilder 5.2-1e und 5.2-4e zeigen beispielhaft die entsprechenden Sensitivitätsergebnisse für die Ergebnisgrößen Nr. 2: „Bündeltemperatur in der Höhe 300 mm“ und .Nr. 9: „Wasserstofferzeugungsrate“.

Bei der Auswertung der zeitabhängigen Größen wurde auf die Analyse der ersten 4000 s (erstes Bündelaufheizen bis zum Ende des Plateaus 1, Abb. 2-3) verzichtet, da diese Phase ohne Bedeutung für den Gesamtverlauf des Versuchs ist.

5.2.1 Thermisches Verhalten

Die Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bezüglich des berechneten thermischen Verhaltens im Testbündel werden hier anhand der Temperaturverläufe des Brennstabs im inneren Ring (ROD1) und in der Bündelumfassung (innere ZrO_2 -Schicht) in der Höhe 300 mm exemplarisch dargestellt. Sie entsprechen weitgehend den Ergebnissen, die für die Höhen 200 und 500 mm erlangt wurden.

Die Abb. 5.2-1a und 5.2-1b zeigen den Zeitverlauf der zweiseitigen (95% / 95%)-Toleranzgrenzen der berechneten Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm mit Berücksichtigung aller unsicheren Parameter bzw. nur der versuchsbedingten Parameter. Die Messwerte (Thermoelement TCW2 Fuel10 /BIA 07/) liegen weitgehend im Unsicherheitsbereich der Rechenergebnisse, abgesehen von einer relativ kurzen Zeitspanne während des Plateaus P4b (zwischen 12000 und 13500 s, vgl. Abb. 2-3), in der die Rechenergebnisse die Messwerte geringfügig überschätzen. Das Messinstrument versagt bei etwa 17000 s, kurz vor der Reaktorabschaltung.

Der Vergleich zwischen beiden Diagrammen zeigt, dass die versuchsbedingten Parameter einen beträchtlichen Beitrag zu den Unsicherheiten bei der Berechnung der

Brennstabtemperatur liefern. Die Sensitivitätsmaße in Abb. 5.2-1c zeigen, dass folgende Eingabeparameter von Bedeutung für den Unsicherheitsbereich dieser Ergebnisgrößen sind:

- Parameter 29 (ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung), mit zunehmender Bedeutung nach der Oxidationsphase (ab etwa 11500 s) bis zum Ende des Versuchs. Die negativen Werte der Sensitivitätsmaße bedeuten, dass je kleiner die temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit, desto geringer die Wärmeabfuhr durch die Bündelumfassung und umso höher die berechneten Brennstabtemperaturen;
- Parameter 28 (Axiale Leistungsverteilung) und Parameter 26 (Bündelleistung), während des gesamten Versuchs bis auf die Oxidationsphase zwischen 9800 und 11500 s;
- Parameter 1 (Auswahl der Nodalisierung im Bündelbereich), während der Voroxidation bis zum Beginn der Temperatureskalation durch Oxidation (9800 s), sowie während der Dampfmangelphase zwischen 10000 und 11500 s. Je detaillierter die Nodalisierung im Bündelbereich ist, desto tendenziell niedriger sind die berechneten Brennstabtemperaturen.

Die multiplen Sensitivitätsmaße bestätigen (Abb. 5.2-1d), dass die versuchsbedingten Unsicherheiten (Gruppe 2) den größten Beitrag zu den Unsicherheiten der berechneten Brennstabtemperaturen leisten. Die modellbedingten unsicheren Parameter, insbesondere die Nodalisierung im Bündelbereich, sind nur während der Oxidationsphase von Bedeutung.

Bild 5.2-1e zeigt repräsentativ die zeitabhängigen Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ und $SM_{(2)}$ entsprechend den beiden Parametergruppen 1 und 2 für diese Ergebnisgröße. Wie man sieht, besteht eine weitgehende qualitative Übereinstimmung mit den Sensitivitätsergebnissen auf der Basis multipler Rangkorrelationskoeffizienten aus Bild 5.2-1d.

Das Rechenprogramm unterschätzt im Allgemeinen die Temperatur der Bündelumfassung bis zum Beginn der Oxidationsphase im Brennstabbündel, bei $t = 9800$ s. Danach und bis zum Ende des Versuchs liegen die Messwerte (Thermoelement TCB29 Inn_Sh) innerhalb des Unsicherheitsbereiches der Rechenergebnisse (Abb. 5.2-2a). In dieser Phase dominieren die versuchsbedingten unsicheren Parameter, wie der Vergleich mit der Abb. 5.5-2b zeigt.

Die abgeleiteten Sensitivitätsmaße in Abb. 5.2-2c zeigen vor allem die Beiträge der folgenden Eingabeparameter:

- Parameter 1 (Nodalisierung im Bündelbereich) und 7 (Multiplikationsfaktor zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit im Spaltbereich der Bündelumfassung), insbesondere in der Voroxidationsperiode (bis 9800 s) und während der Dampfangelphase zwischen 10000 und 11000 s. Je detaillierter die Nodalisierung ist, desto niedriger sind die Bündeltemperaturen und somit auch die Temperaturen in der Bündelumfassung. Je größer die Wärmeleitfähigkeit im Spaltbereich ist, desto größer ist die Wärmeabfuhr aus dem Testbündel und desto niedriger sind die Temperaturen in der Bündelumfassung;
- Parameter 26 (Bündelleistung) und Parameter 28 (Axiale Leistungsverteilung), während des gesamten Versuchs bis auf die Oxidationsphase zwischen 9800 und 11500 s;
- und Parameter 29 (Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht in der Bündelumfassung), insbesondere nach der Oxidationsphase.

Die multiple Sensitivitätsmaße (Abb. 5.2-2d) bestätigen diese Ergebnisse: In der Anfangsphase des Versuchs bis zum Beginn der Oxidationseskalation sowie während der Dampfangelphase sind die modellbedingten unsicheren Parameter (Gruppe 1) maßgebend für die Gesamtunsicherheit der berechneten Temperatur der Bündelumfassung. Nach der Oxidationsphase und bis zur Reaktorabschaltung dominieren dann die versuchsbedingten Unsicherheiten (Gruppe 2).

5.2.2 Oxidationsprozesse

Die Abb. 5.2-3a und -3b zeigen den zeitlichen Verlauf der zweiseitigen (95% / 95%)-Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Wasserstoffmasse mit Berücksichtigung aller unsicheren Parameter bzw. nur der versuchsbedingten Parameter. Die experimentellen Werte liegen weitestgehend im Unsicherheitsbereich der Rechenergebnisse. Besonders hervorzuheben ist die relativ geringe Streuung der Ergebnisse im Bezug auf den Beginn der Oxidationseskalation, die hauptsächlich von den versuchsbedingten Unsicherheiten herrühren, und der insgesamt erzeugten H_2 -Masse (etwa $\pm 20\%$ im Vergleich zum gemessenen Wert), insbesondere in Anbetracht der breiten Variation der Eingabeparameter.

Die dominierenden Parameter für die Gesamtunsicherheit dieser Ergebnisgröße sind (Abb. 5.2-3c):

- Parameter 29 (ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung), insbesondere während der Oxidationsphase zwischen 9800 und 11500 s, mit negativem Vorzeichen, d. h. je größer dieser Parameter ist, desto größer ist die Wärmeabfuhr aus dem Testbündel und damit die integrale H_2 -Erzeugung niedriger;
- Parameter 26 (Bündelleistung), während der Oxidationsphase und mit positivem Vorzeichen;
- Parameter 1 (Nodalisierung im Bündelbereich), mit zunehmendem Einfluss während der Dampf-mangelphase und als maßgebender Parameter während des Plateaus 4 bis zur abschließenden Aufheizphase. Wie im vorherigen Abschnitt schon gesehen, führt eine detailliertere Nodalisierung im Bündelbereich tendenziell zu niedrigeren Brennstabtemperaturen und somit zu einer geringeren Wasserstoff-erzeugung;
- Parameter 16 (Temperaturkriterium zum Hüllrohrversagen), ab der Dampf-mangelphase bis zum Ende des Plateaus 4. Das positive Vorzeichen besagt, dass je größer dieser Eingabeparameter ist, desto später beginnt die Bildung von metallischer Schmelze und somit bleibt das nicht-oxidierte Zirkonium umso länger in den heißen Bereichen des Testbündels, was eine erhöhte H_2 -Erzeugung ergibt.

Aufgrund des Beitrags während der Oxidations- eskalation (Abb. 5.2-3d) sind die versuchsspezifischen unsicheren Parameter insgesamt maßgebend für diese Ergebnisgröße.

Von größter Bedeutung für die Simulation der Abläufe von schweren Störfällen ist eine realistische Wiedergabe der Kinetik der Wasserstoff-erzeugung. Die entsprechenden zweiseitigen Toleranzgrenzen mit Berücksichtigung aller unsicheren Parameter bzw. nur der experimentellen Unsicherheiten, sind in Abb. 5.2-4a und -4b dargestellt. Auch hier liegen die Messwerte weitestgehend im Unsicherheitsbereich der Rechnungen. Die Streubreite im Bezug auf die Dauer der Dampf-mangelphase (zwischen 350 und 2400 s im Vergleich zu etwa 1000 s im Versuch) ist jedoch beträchtlich.

Am Beginn der Zr-Oxidation sind die Parameter 29 (ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung) und 26 (Bündelleistung) von Bedeutung im Hinblick auf die Gesamtunsicherheit der berechneten H_2 -Erzeugungsraten (Abb. 5.2-4c). Ab dem Start der Dampf-mangelperiode, etwa 10000 s nach Versuchsbeginn, wird die Gesamtunsicher-

heit maßgeblich durch die Parameter 1 (Nodalisierung im Bündelbereich) und 9 (obere Grenze der Dampfverfügbarkeit zur Begrenzung der Dampfoxidation) bestimmt. Je detaillierte die Nodalisierung im Bündelbereich bzw. je größer der Eingabeparameter OXXLIM ist, desto kürzer ist die Dampfangelphase.

Im weiteren Verlauf der Simulation werden die berechneten H_2 -Erzeugungsraten hauptsächlich von den Parametern 1, 16 (Temperaturkriterium zum Hüllrohrversagen) und 29 beeinflusst. Es ist anzumerken, dass die Auswahl der Korrelationen zur Beschreibung der Zr-Oxidation (Parameter 8) eine eher untergeordnete Rolle bei der Berechnung der H_2 -Erzeugung spielt.

Die multiplen Sensitivitätsmaße zeigen (Abb. 5.2-4d), dass die Modellunsicherheiten (Gruppe 1) den größten Beitrag zu den Unsicherheiten der berechneten H_2 -Erzeugungsraten ab dem Start der Dampfangelphase bis zum Beginn der Schmelzeverlagerung leisten. Dennoch sind die experimentellen Unsicherheiten (Gruppe 2), insbesondere die ZrO_2 -Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung, maßgebend während der Oxidationseskalation.

Bild 5.2-4e zeigt die zeitabhängigen Sobol'schen Sensitivitätsindizes $SM_{(1)}$ und $SM_{(2)}$ für die beiden Parametergruppen 1 und 2 für diese Ergebnisgröße. Auch hier besteht eine weitgehende qualitative Übereinstimmung mit den Sensitivitätsergebnissen auf der Basis multipler Rangkorrelationskoeffizienten aus Bild 5.4-1d, wobei der Einfluss der modellbedingten Unsicherheiten ab dem Start der Dampfangelphase noch deutlicher ausgedrückt wird.

Von der insgesamt erzeugten Wasserstoffmasse im Verlauf des Versuchs FPT3 sind etwa 11,6 bis 13,3% aus der Oxidation des Borkarbid entstanden /BIA 07/. Wie im Abschnitt 5.1.2 schon gezeigt, wird der Anteil des oxidierten Borkarbid im Allgemeinen vom Rechenprogramm überschätzt. Die Kinetik der B_4C -Oxidation kann nur anhand der gemessenen integralen Freisetzungen der Reaktionsprodukte CO , CO_2 und CH_4 abgeleitet werden.

Die Erkenntnisse aus der Unsicherheitsanalyse im Bezug auf die Simulation der B_4C -Oxidation werden anhand der Ergebnisgröße „ CO -Freisetzung“ exemplarisch dargestellt. Es ist dabei anzumerken, dass in ATHLET-CD die Aufteilung der gesamten, in der Oxidation umgesetzten Kohlenstoffmasse auf die einzelnen Reaktionsprodukte per Eingabedaten vorgegeben ist. Das molare Verhältnis der Reaktionsprodukte bleibt also

während der gesamten Simulation konstant. Diese vereinfachte Modellierung hat jedoch keinen nennenswerten Einfluss auf die Berechnung der H₂-Erzeugung /DRA 06/.

Die gemessene CO-Erzeugung liegt innerhalb des Unsicherheitsbereiches der Rechenergebnisse (Abb. 5.2-5a). Während der Oxidationseskalation zeigt das Rechenprogramm die Tendenz, den Anstieg der Erzeugungsrate zu überschätzen. In dieser Phase ist der Einfluss der versuchsbedingten unsicheren Parameter maßgebend (Abb. 5.2-5b und -5d). Im weiteren Verlauf des Versuchs liegen die Messwerte nah an der oberen Toleranzgrenze der Rechenergebnisse.

Von Bedeutung für diese Ergebnisgröße sind Parameter 29 (ZrO₂-Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung), Parameter 1 (Nodalisierung im Bündelbereich), Parameter 14 (Auswahl der Korrelationen zur B₄C-Oxidation) und Parameter 15 (Multiplikationsfaktor für die Oxidationsfläche auf Grund der B₄C-Porosität), wie aus Abb. 5.2-5c zu ersehen ist. Ähnliche Ergebnisse wurden für die übrigen Reaktionsprodukte CO₂ und CH₄ erzielt. Im Allgemeinen führt die Anwendung der modifizierten Steinbrück-Korrelation (Option ICRB4C=1) zu niedrigeren Oxidationsraten und zu einer besseren Übereinstimmung mit den gemessenen Werten.

5.2.3 Freisetzung von Cäsium

In der vorliegenden Unsicherheitsanalyse wurden keine potentiell unsicheren Eingabeparameter im Freisetzungsmodul FIPREM berücksichtigt, aufgrund der fehlenden experimentellen Datenbasis zur Quantifizierung der Unsicherheiten. Da aber die Brennstabtemperatur maßgebend zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung beiträgt, wirken sich die Unsicherheiten bei der Modellierung des thermischen Verhaltens im Testbündel auch auf die Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus.

Die zweiseitigen (95%, 95%)- Toleranzgrenzen der berechneten Freisetzung des flüchtigen Spaltproduktes Cäsium sind in Abb. 5.2-6a dargestellt. Die entsprechenden Messwerte beziehen sich auf die Messstelle C im heißen Strang. Eventuelle Ablagerungen von Cs-Verbindungen am Bündelaustritt werden somit nicht berücksichtigt. Insgesamt betrachtet haben die experimentellen unsicheren Parameter den größten Einfluss auf die Unsicherheitsbreite der Rechenergebnisse (Abb. 5.2-6b und -6d).

Der dominierende unsichere Parameter für diese Ergebnisgröße ist Parameter 29 (ZrO₂-Wärmeleitfähigkeit in der Bündelumfassung), der auch zur Simulation des gesamten thermischen Verhaltens im Testbündel bestimmend ist. Von Bedeutung sind auch:

- Parameter 26 (Bündelleistung);
- Parameter 1 (Nodalisierung im Bündelbereich): eine detailliertere Nodalisierung führt tendenziell zu niedrigeren Freisetzungsraten;
- Parameter 21 (Verlagerungsgeschwindigkeit der keramischen Schmelze): je niedriger diese Geschwindigkeit, desto länger bleibt die Schmelze in den heißen Bereichen des Testbündels, was eine stärkere Spaltproduktfreisetzung zur Folge hat.

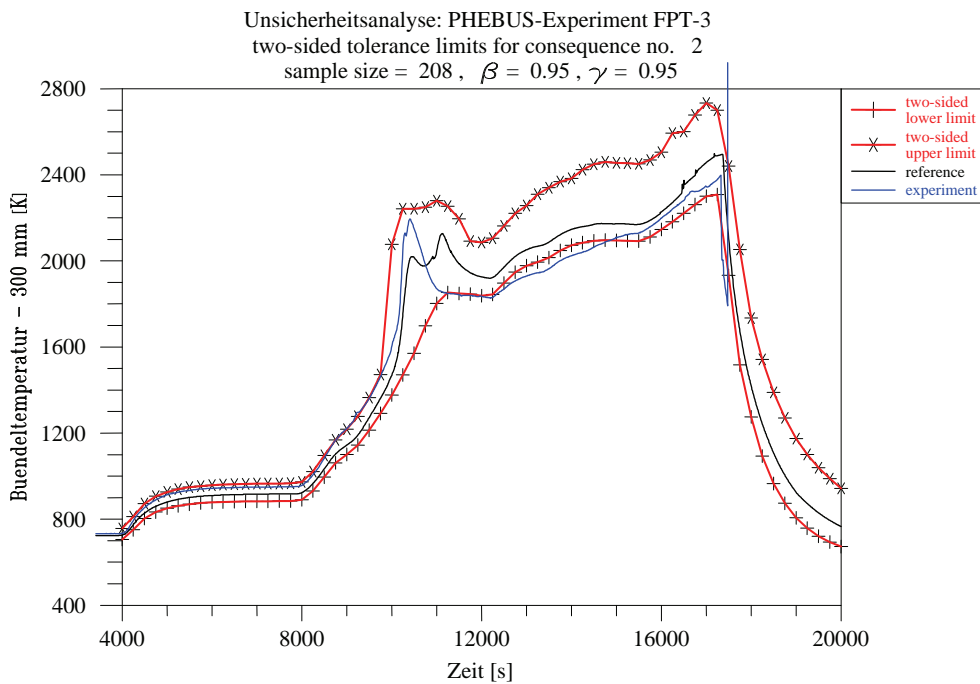


Bild 5.2-1a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

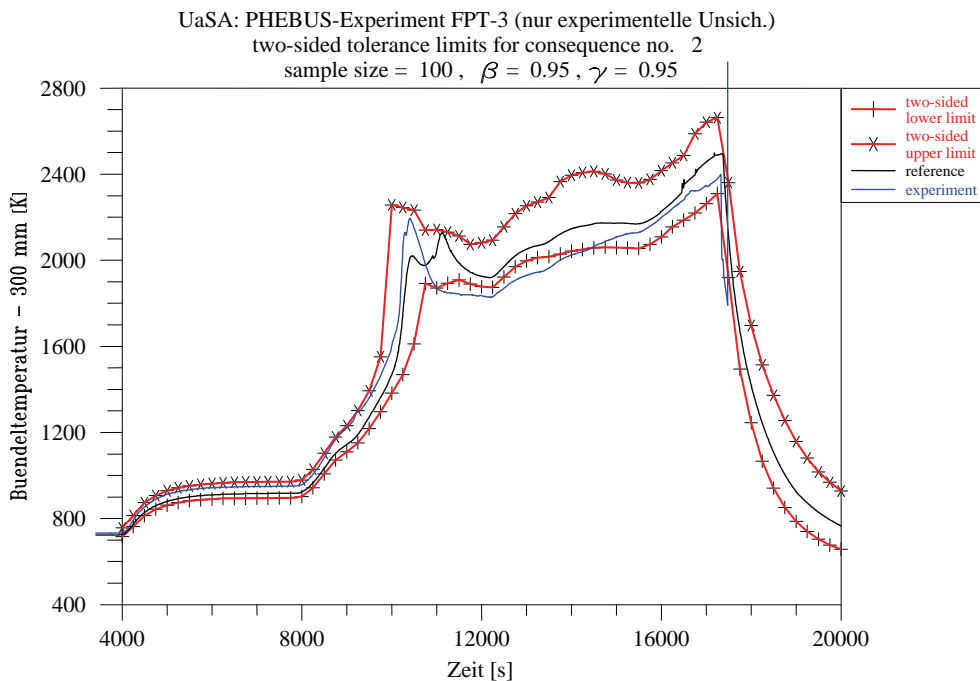


Bild 5.2-1b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

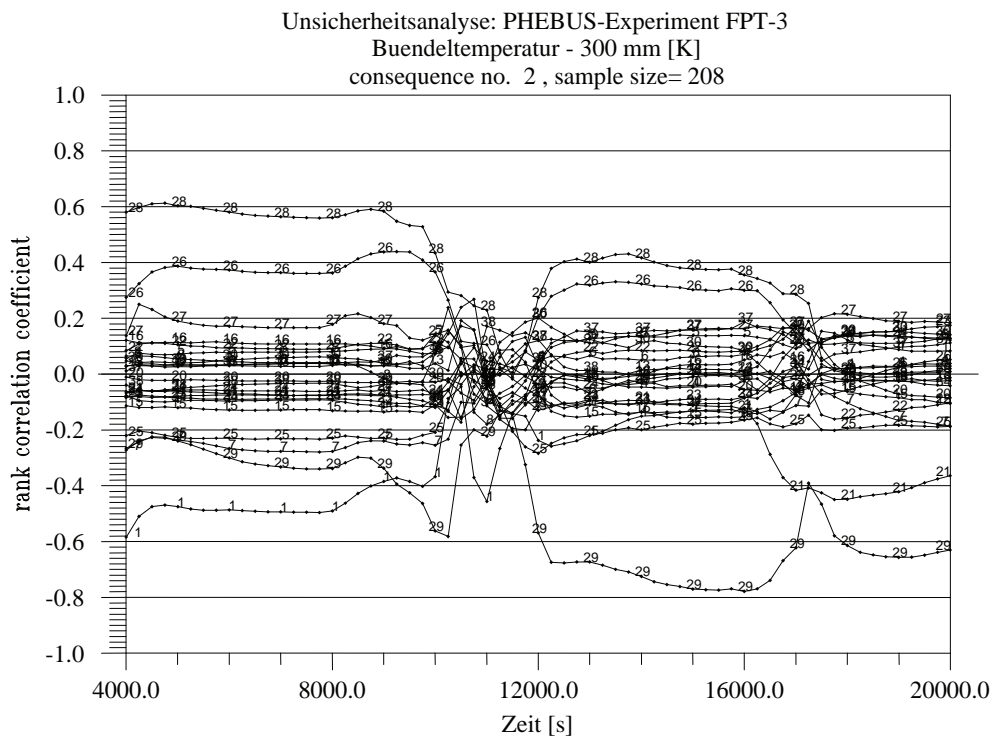


Bild 5.2-1c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm

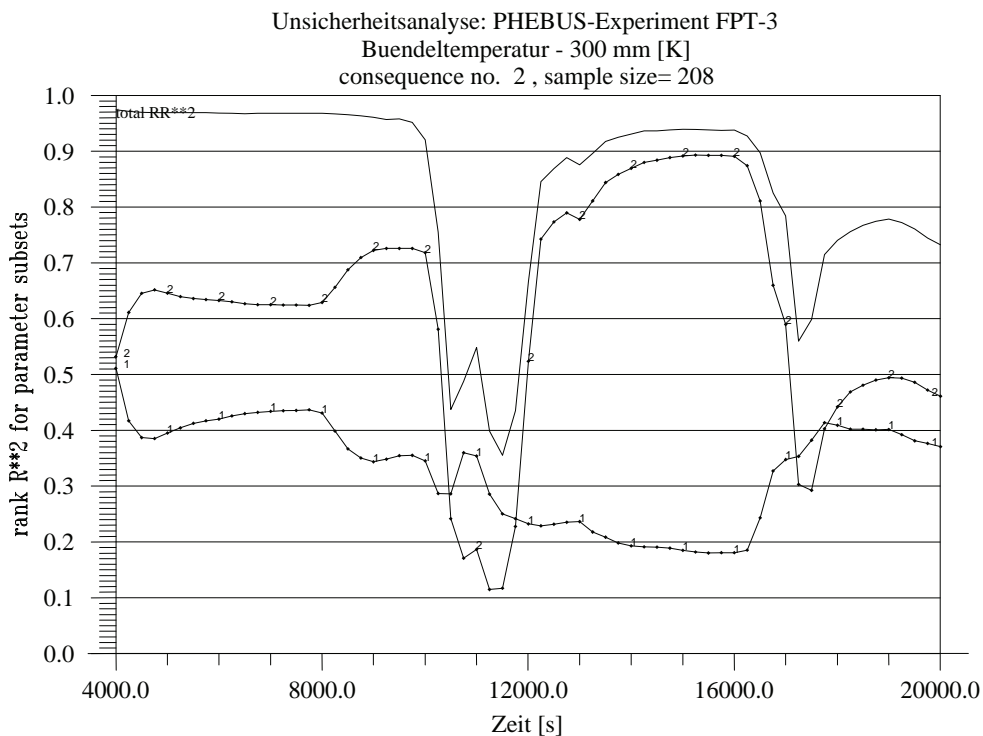


Bild 5.2-1d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm

Unsicherheitsanalyse: PHEBUS-Experiment FPT-3
Buindeltemperatur - 300 mm [K]
consequence no. 2 , sample size= 100

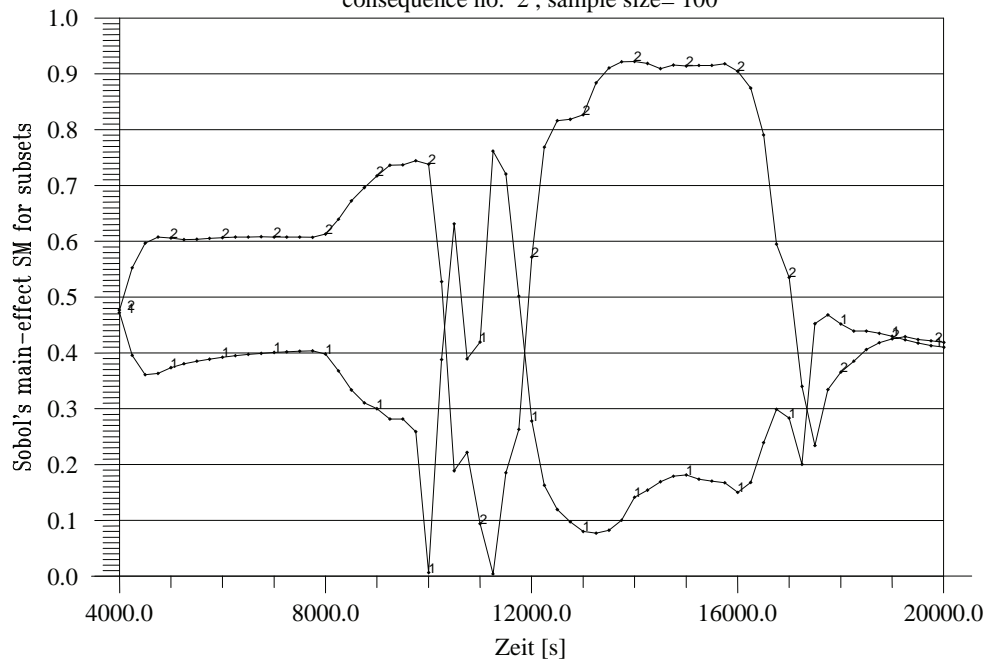


Bild 5.2-1e: Sobol'sche multiple Sensitivitätsindizes für die berechnete Brennstabtemperatur in der Höhe 300 mm

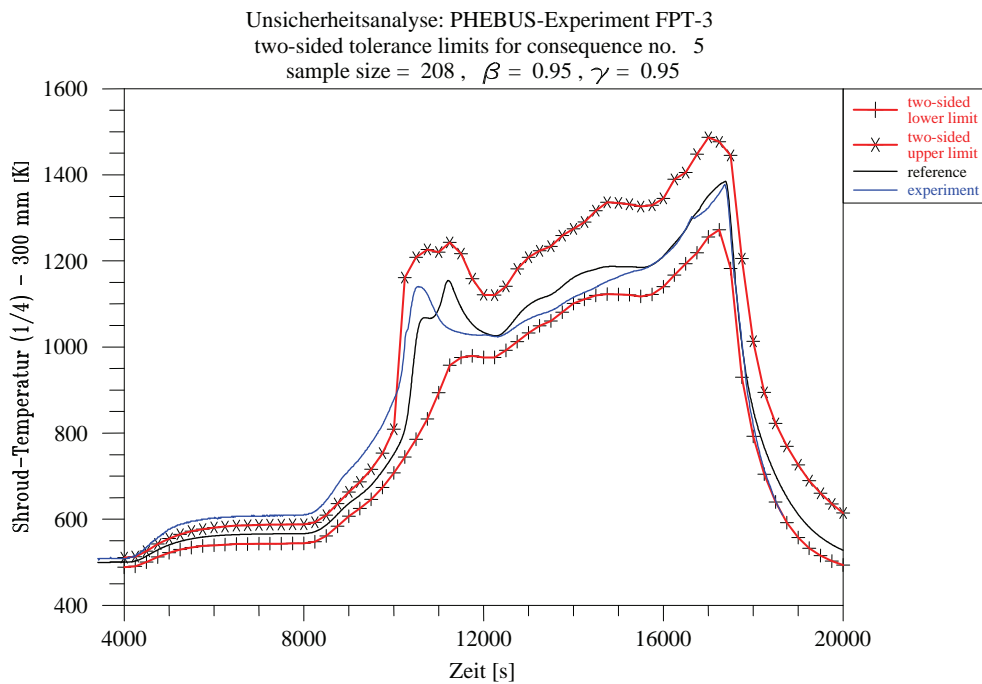


Bild 5.2-2a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Temperatur der Bündelumfassung in der Höhe 300 mm unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

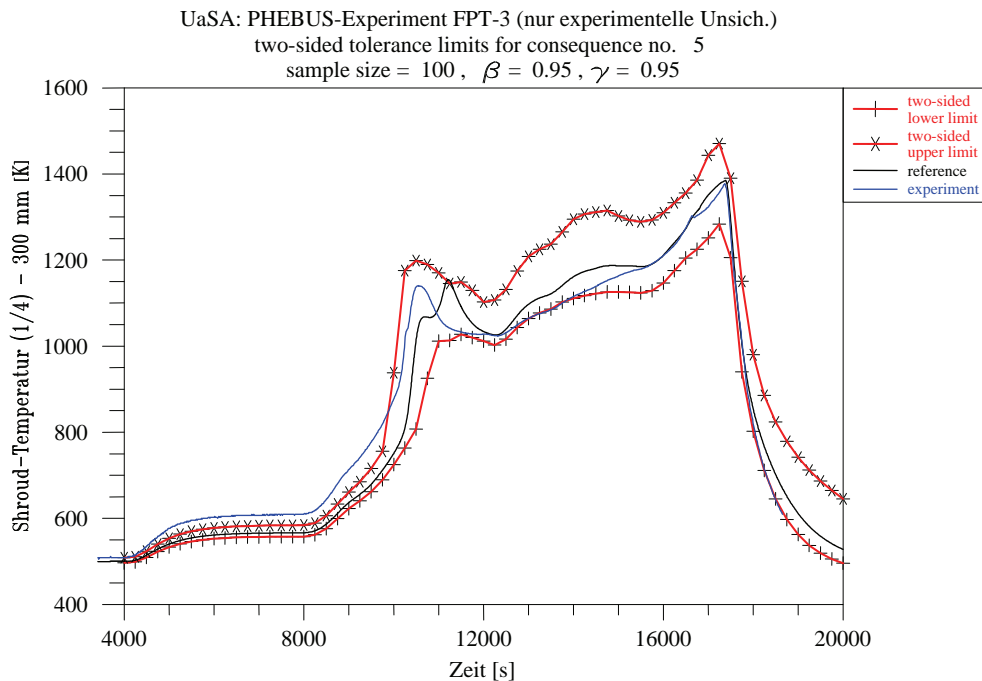


Bild 5.2-2b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten Temperatur der Bündelumfassung in der Höhe 300 mm (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

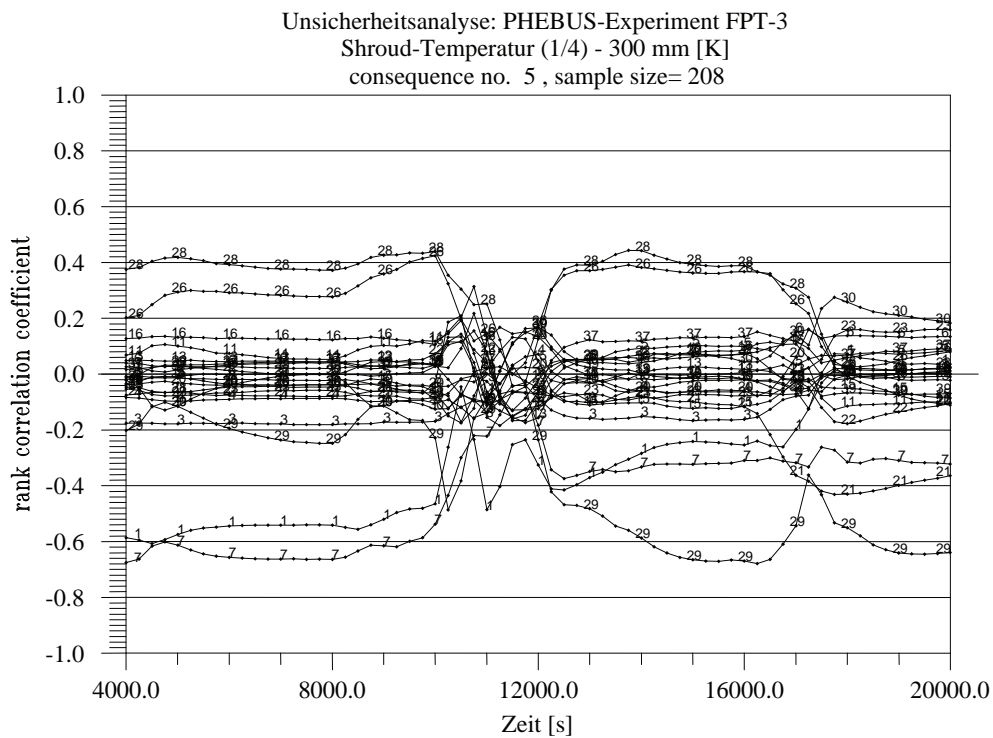


Bild 5.2-2c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete Shroud-Temperatur in der Höhe 300 mm

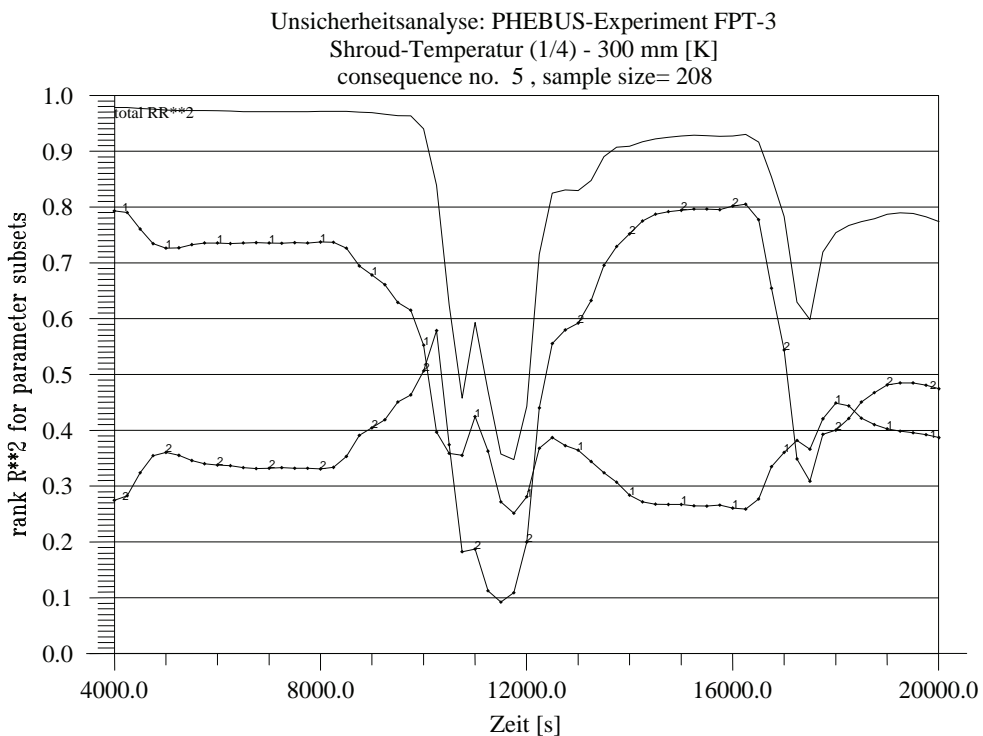


Bild 5.2-2d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete Shroud-Temperatur in der Höhe 300 mm

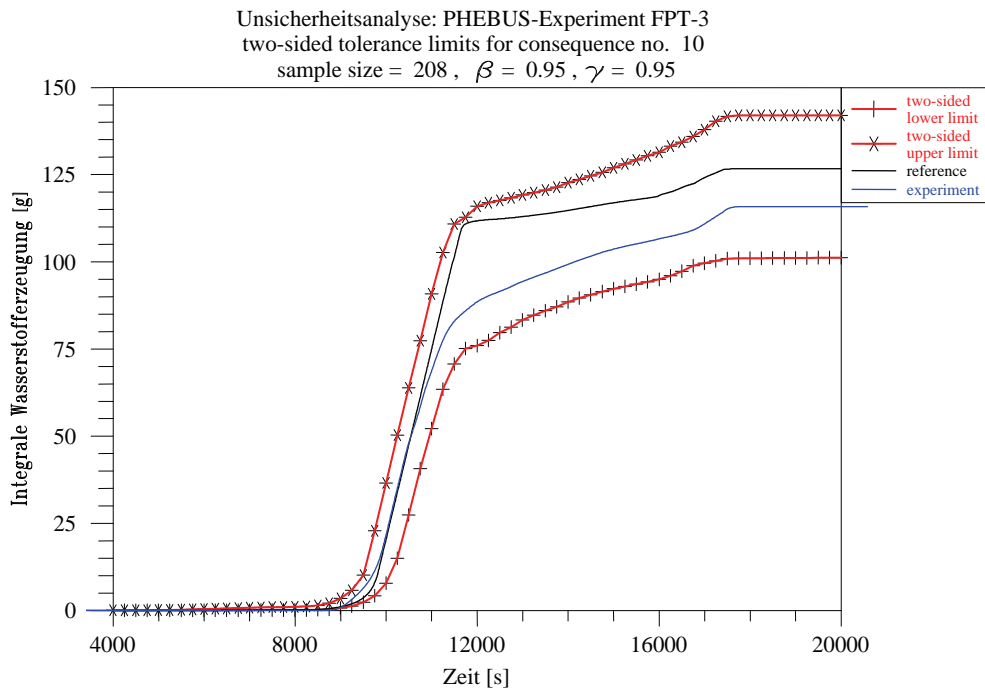


Bild 5.2-3a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Wasserstoffmasse unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

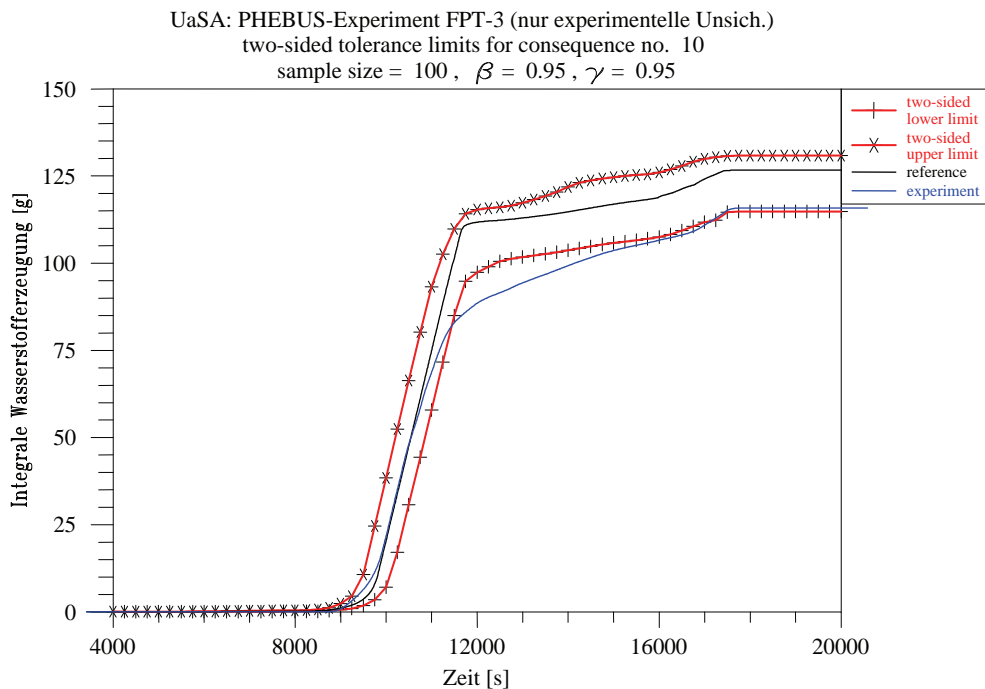


Bild 5.2-3b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Wasserstoffmasse (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

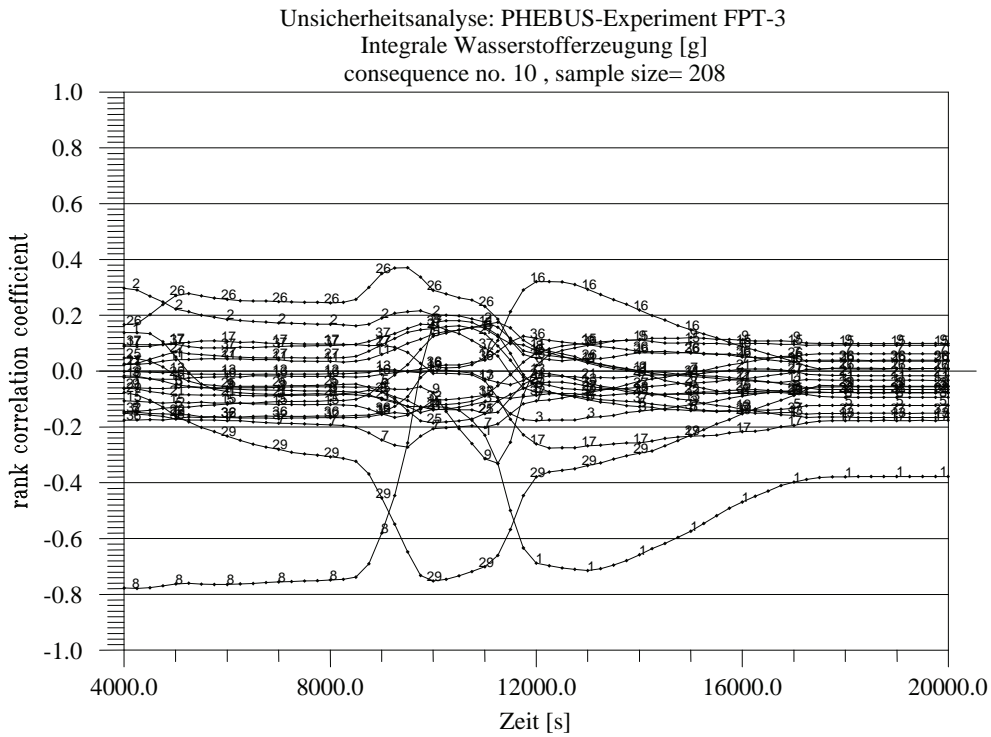


Bild 5.2-3c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte Wasserstoffmasse

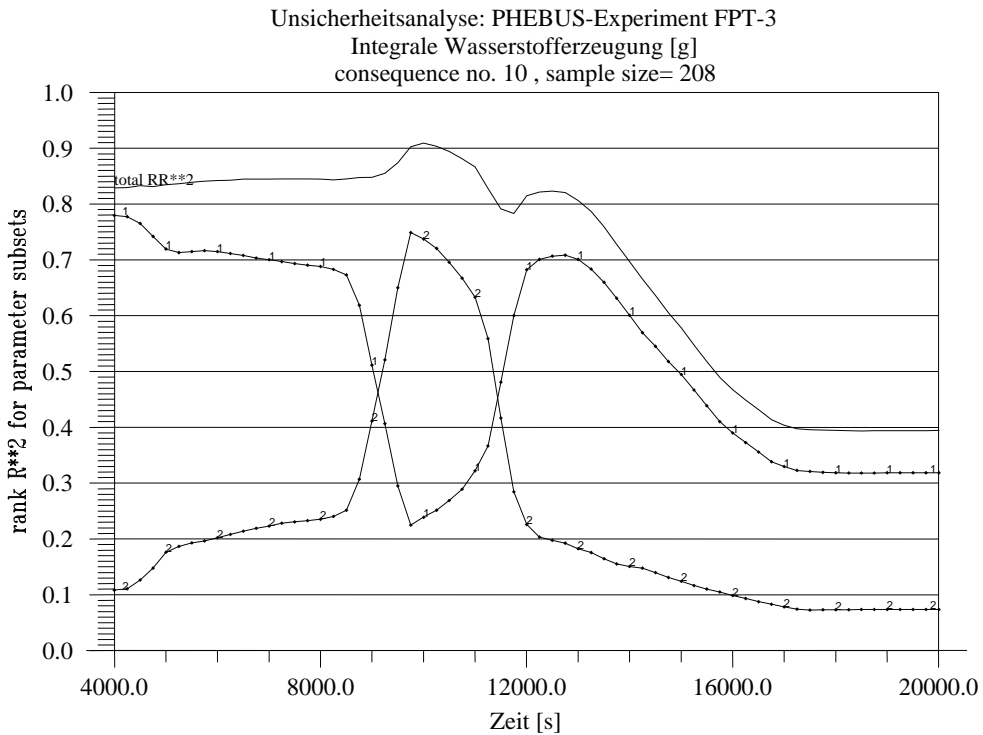


Bild 5.2-3d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Wasserstoffmasse

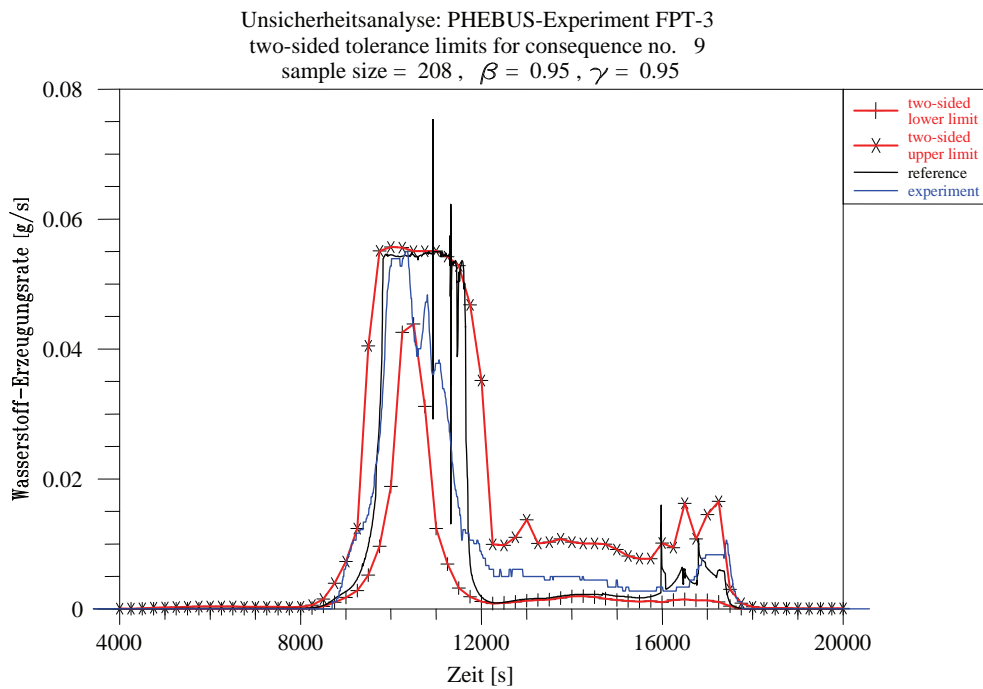


Bild 5.2-4a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten H_2 -Erzeugungsrate unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

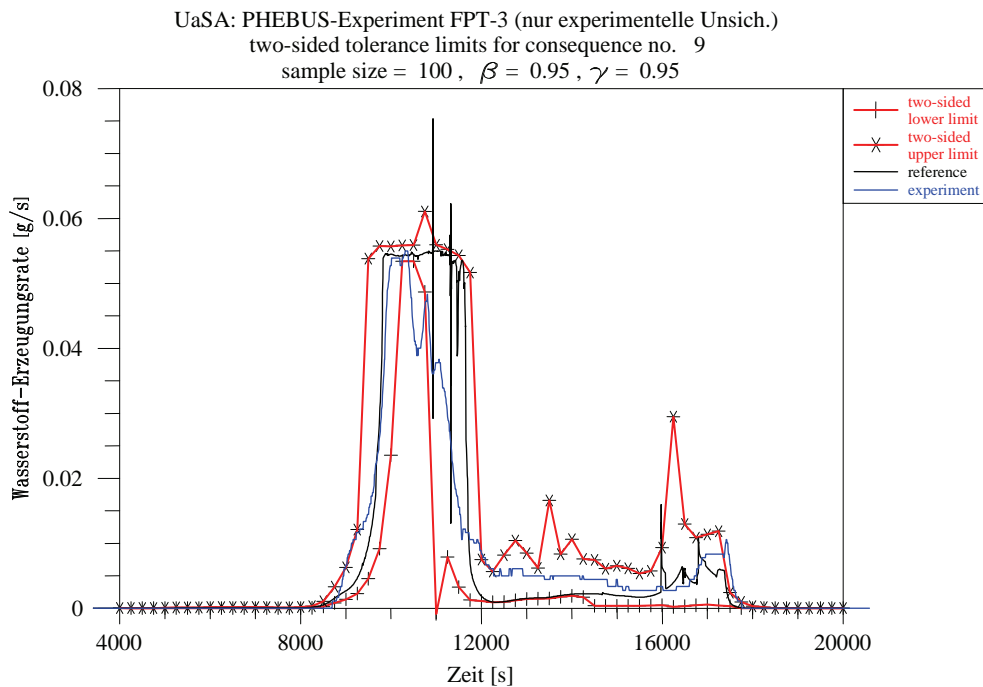


Bild 5.2-4b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten H_2 -Erzeugungsrate (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

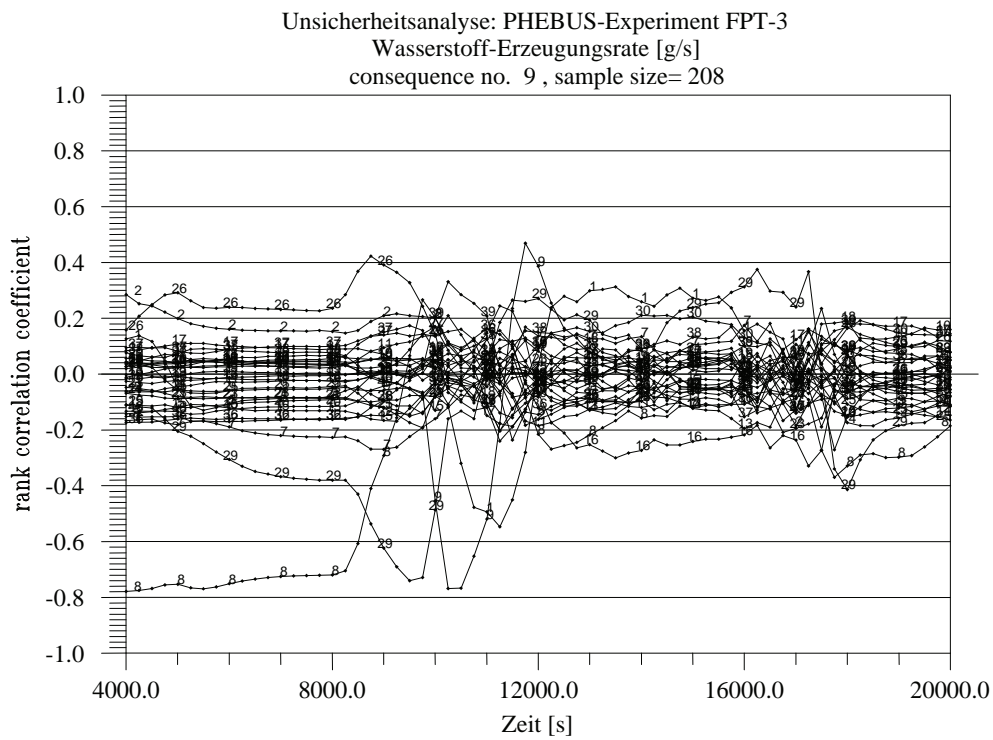


Bild 5.2-4c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete H₂-Erzeugungsrate

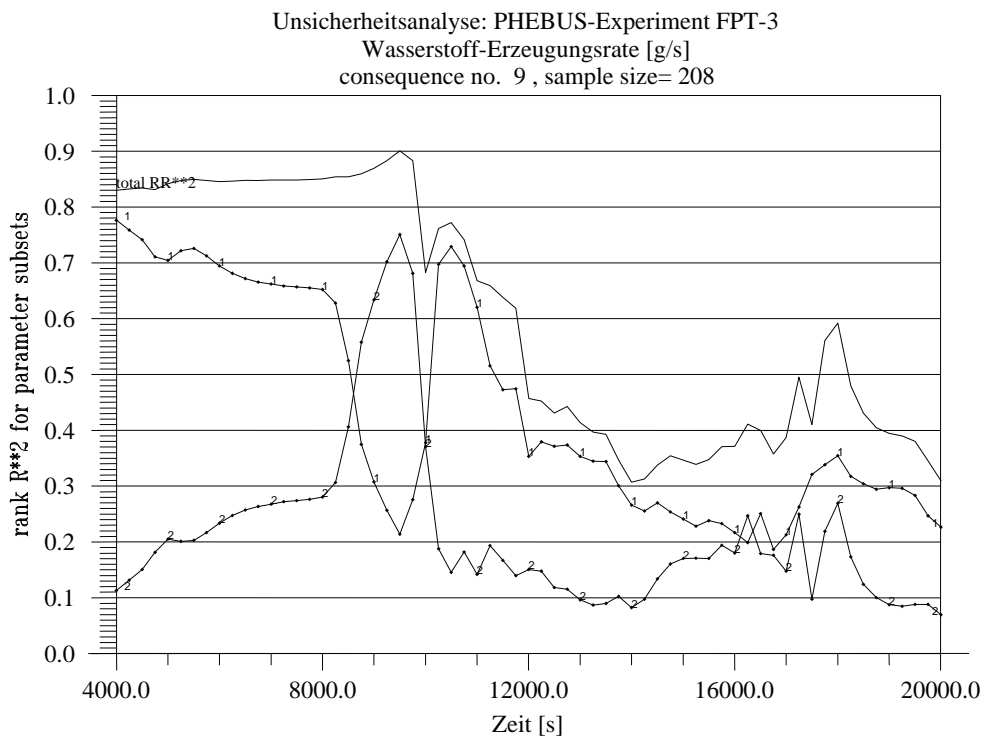


Bild 5.2-4d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete H₂-Erzeugungsrate

Unsicherheitsanalyse: PHEBUS-Experiment FPT-3
Wasserstoff-Erzeugungsrate [g/s]
consequence no. 9 , sample size= 100

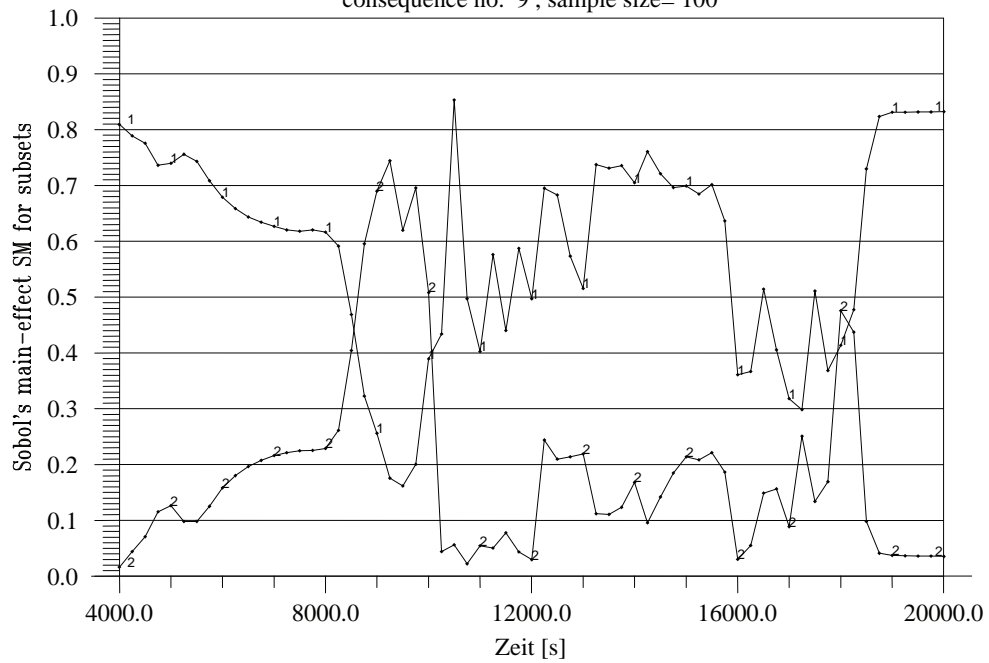


Bild 5.2-4e: Sobol'sche multiple Sensitivitätsindizes für die berechnete H₂-
Erzeugungsrate

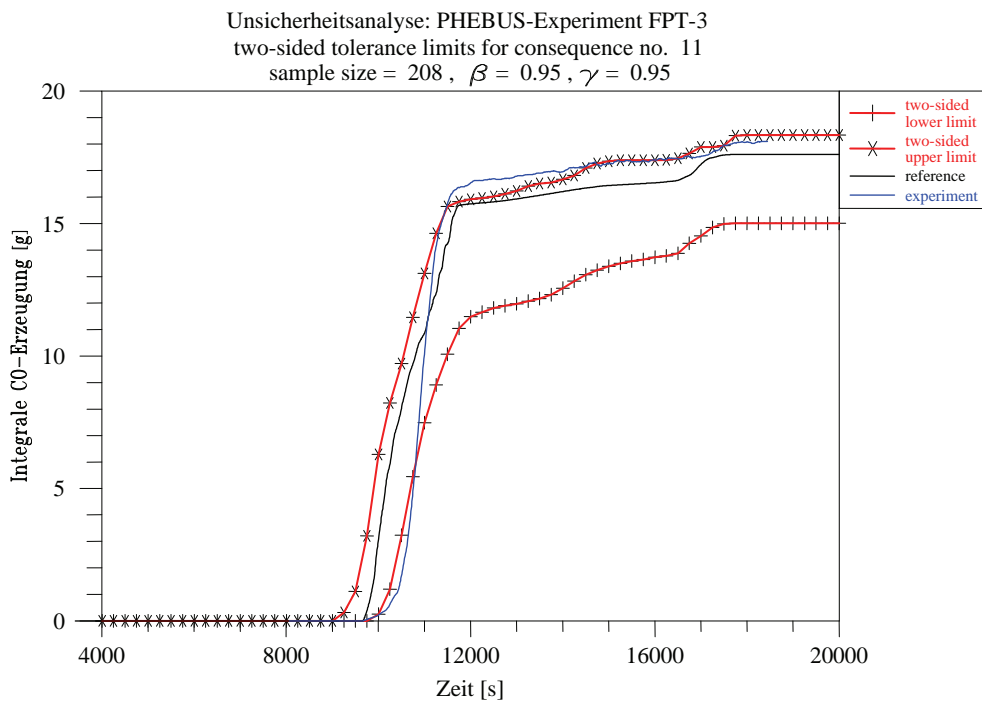


Bild 5.2-5a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten CO-Masse unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

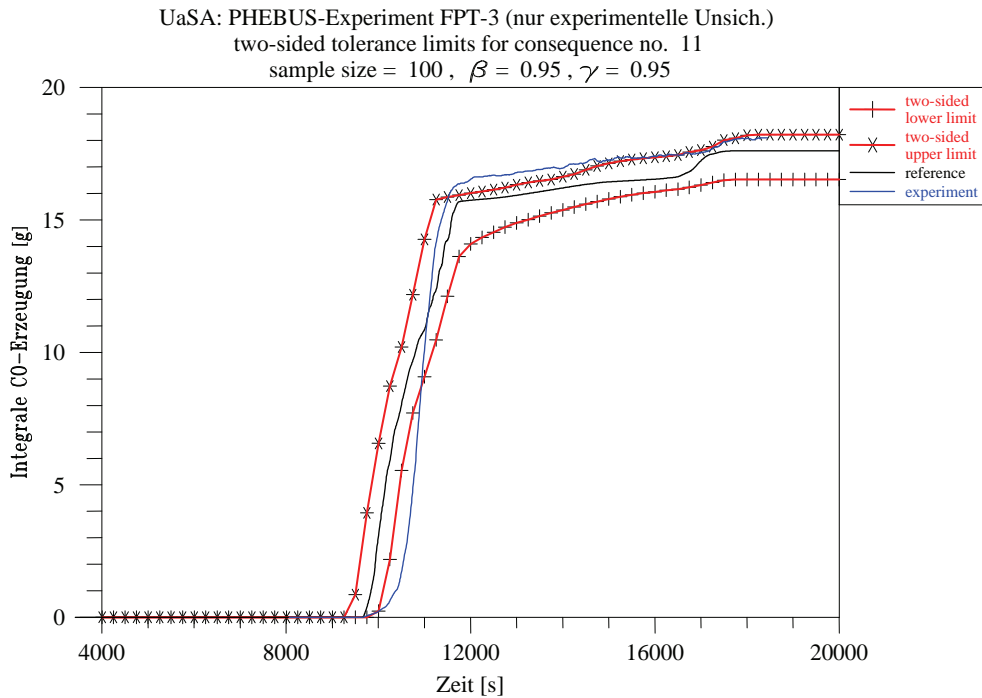


Bild 5.2-5b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten CO-Masse (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

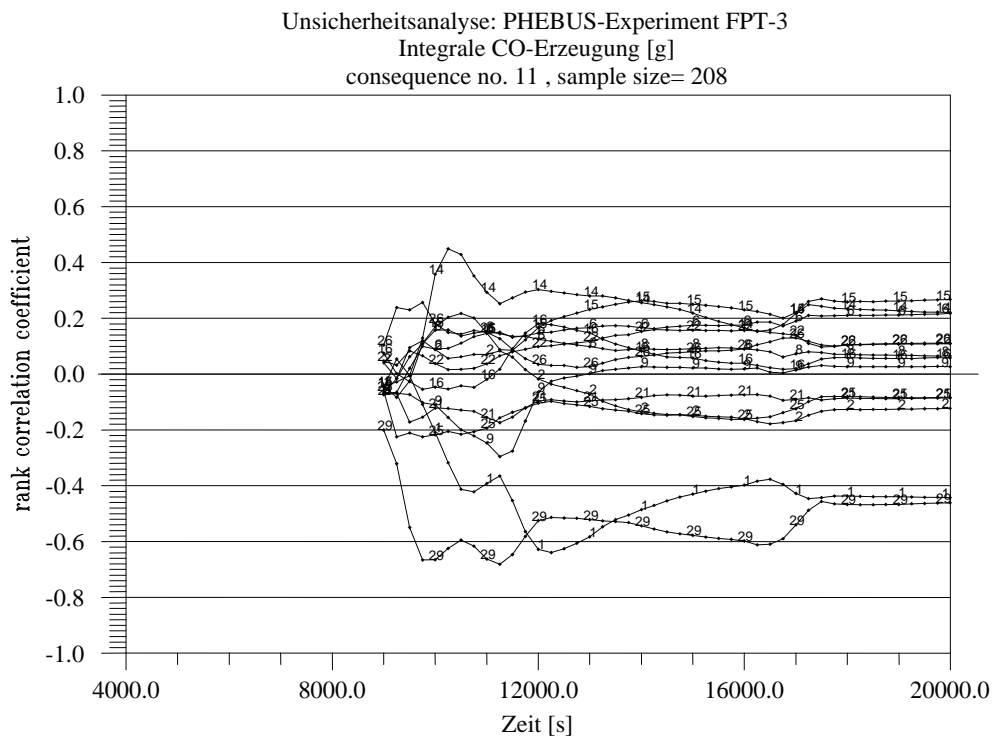


Bild 5.2-5c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte CO-Masse

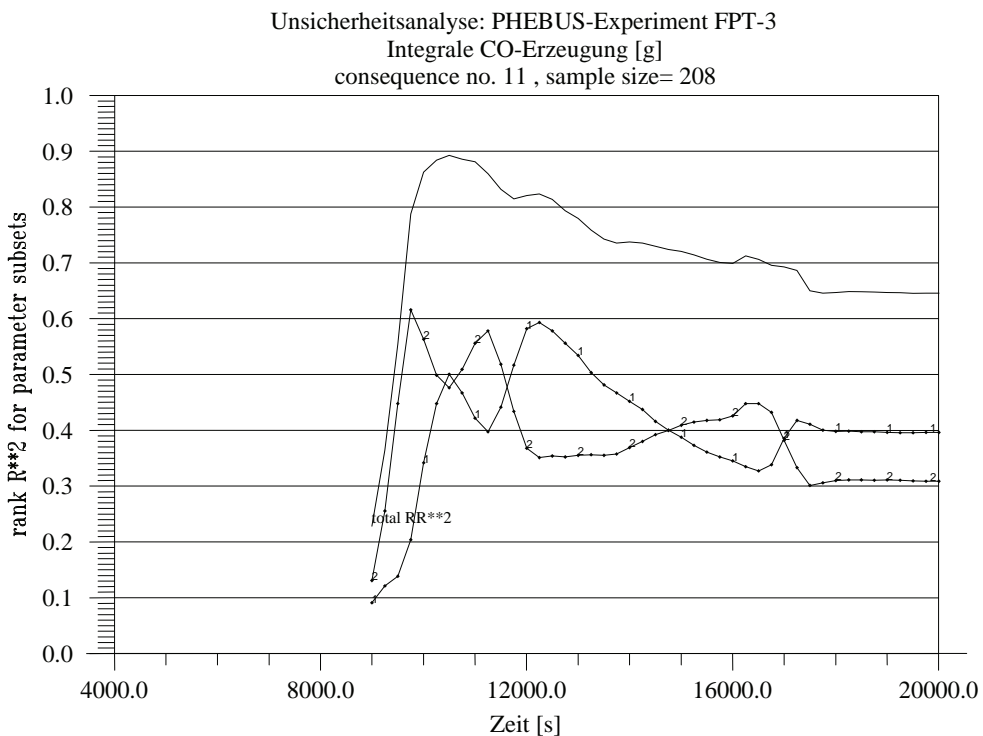


Bild 5.2-5d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte CO-Masse

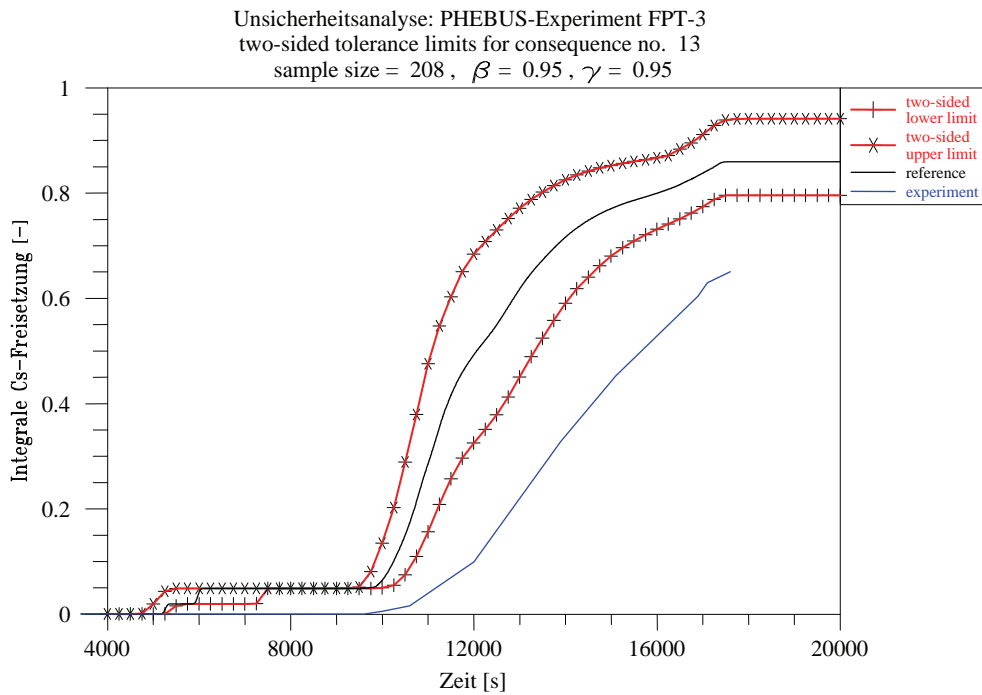


Bild 5.2-6a: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Cs-Freisetzung unter Berücksichtigung aller unsicheren Parameter

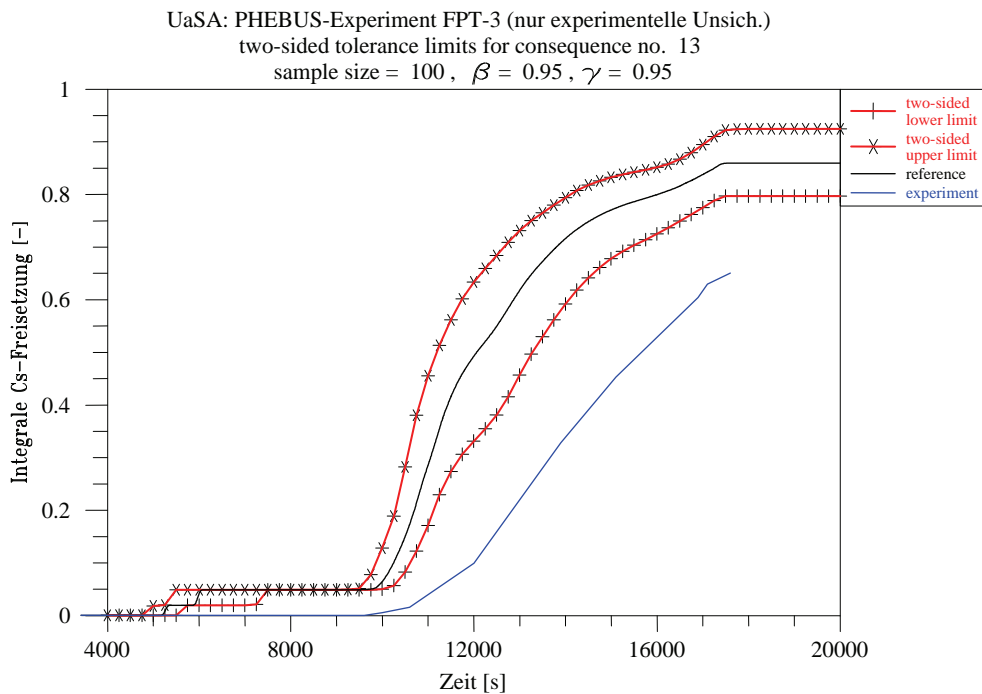


Bild 5.2-6b: Zweiseitige Toleranzgrenzen der berechneten gesamten Cs-Freisetzung (nur mit experimentellen unsicheren Parametern)

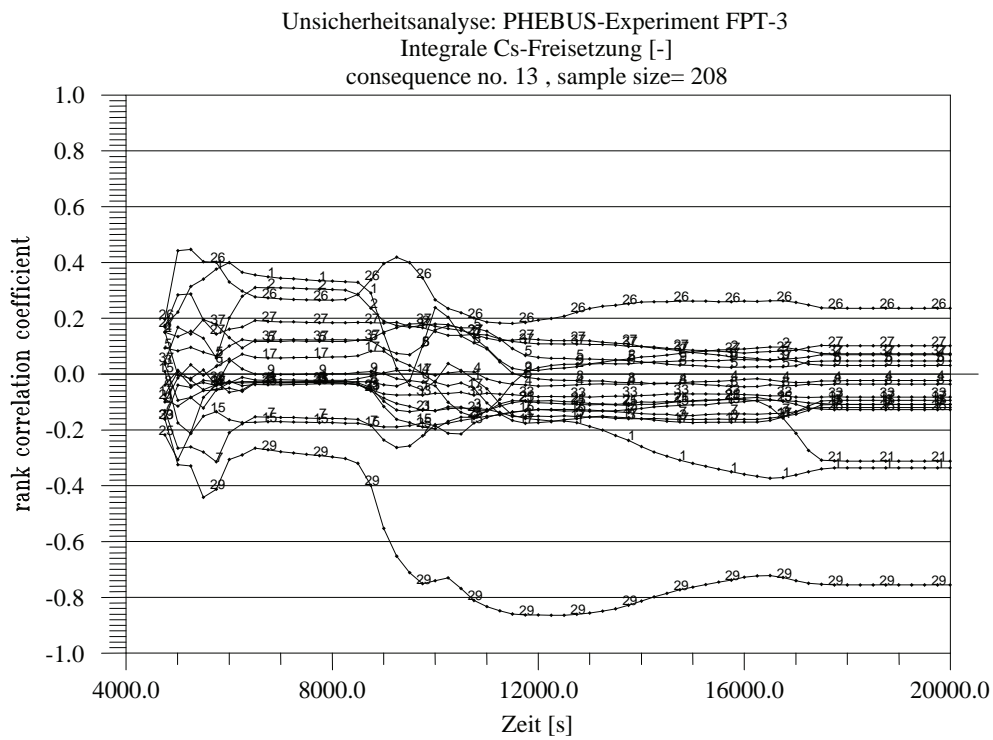


Bild 5.2-6c: Sensitivitätsmaße der unsicheren Parameter für die berechnete gesamte Cs-Freisetzung

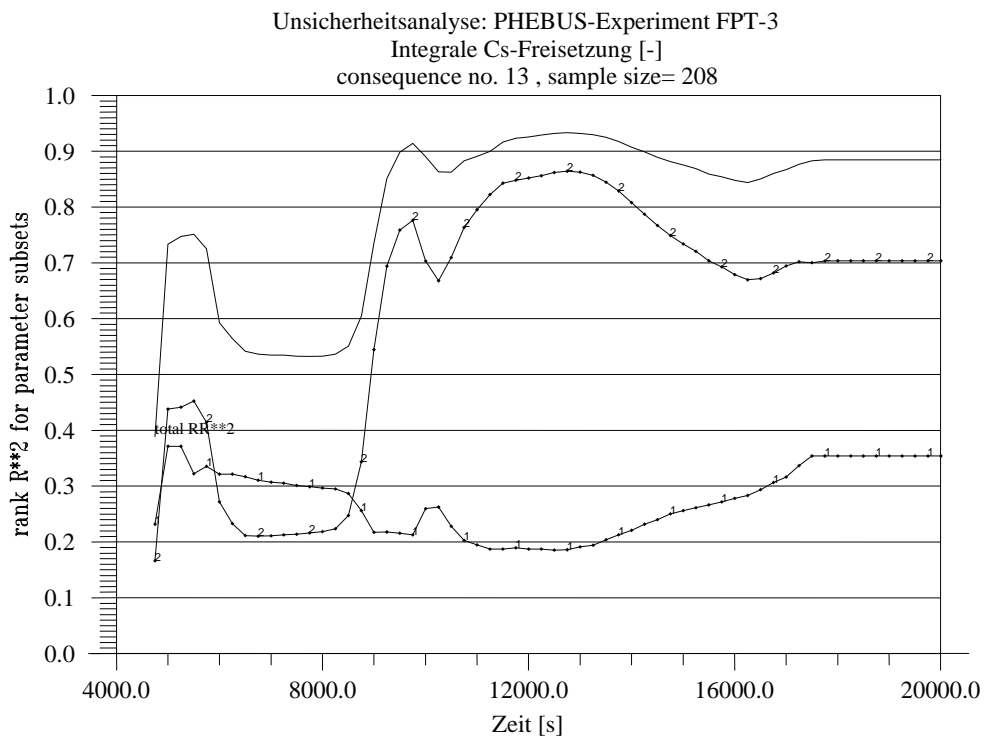


Bild 5.2-6d: Multiple Sensitivitätsmaße für die berechnete gesamte Cs-Freisetzung

6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Im Rahmen des Vorhabens RS1173 wurde mit der aktuellen Programmversion ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A eine Nachrechnung des PHÉBUS-Versuchs FPT3 durchgeführt. Gegenstand dieses Versuchs war die Untersuchung der Bündelzerstörung, der daraus resultierenden Spaltproduktfreisetzung, des Spaltprodukttransports und der Ablagerung von Spaltprodukten im Kühlkreislauf und im Sicherheitsbehälter. Im Gegensatz zu früheren Versuchen des PHÉBUS-FP Versuchsprogramms wurde bei FPT3 Borkarbid statt Silber-Indium-Cadmium als Absorbermaterial verwendet.

Diese Nachrechnung wurde als Referenzrechnung zur Code-Validierung durch eine Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse mit der in der GRS entwickelten Methodik ergänzt. Dabei wurden sowohl modellbedingte (z. B. modellspezifische Eingabewerte und Modelloptionen) als auch versuchsbedingte unsichere Parameter (u.a. Bündelleistung, Stoffeigenschaften der Bündelkomponenten) berücksichtigt.

Ziel dieser Untersuchung war es, den Einfluss einer kombinierten Variation der Eingangsparameter auf die Qualität der Simulation der wesentlichen experimentell beobachteten Phänomene zu untersuchen und auszuwerten. Dies stellt einen zusätzlichen Beitrag zur Erhöhung der Aussagesicherheit des Rechenprogramms dar. Damit können fundierte Schwerpunkte für die Verbesserung und Weiterentwicklung der Rechenmodelle gesetzt werden. Außerdem lässt sich der Einfluss der experimentell bedingten Unsicherheiten auf die Aussagesicherheit der Rechenergebnisse zumindest qualitativ ermitteln.

Für die Durchführung der Unsicherheitsanalyse waren folgende Arbeitsschritte erforderlich:

- Auswahl und Spezifikation der unsicheren Parameter:
Auf der Basis der Erkenntnisse aus der Referenzrechnung sowie der Erfahrung aus früheren Validierungsrechnungen zu anderen Experimenten in den PHÉBUS- und QUENCH-Versuchsanlagen wurden 40 Eingabeparameter, deren Unsicherheiten für einflussreich auf die Rechenergebnisse gehalten werden, identifiziert und ihre Wertebereiche und Wahrscheinlichkeitsverteilungen bestimmt. Diese Eingangsparameter wurden in 25 modellbedingte und 15 versuchsbedingte Unsicherheiten aufgeteilt.

Die Auswahl der modellbedingten Unsicherheiten hat sich grundsätzlich auf die Beschreibung der Thermohydraulik in der Teststrecke (ATHLET-Modelle) sowie auf die Modelle zum Brennstabverhalten und zur Kernzerstörung (Modul ECORE) konzentriert. Die vorhandene experimentelle Datenbasis reicht nicht aus, um unsichere Eingabeparameter bei der Simulation der Freisetzung und des Transports von Spaltprodukten (Module FIPREM und SOPHAEROS) zu bestimmen und insbesondere zu quantifizieren. Da die Brennstabtemperatur ein wesentlicher Parameter zur Bestimmung der Spaltproduktfreisetzung ist, wirken sich die Unsicherheiten bei der Bestimmung des thermischen Verhaltens im Testbündel dennoch auch auf die Berechnung der Freisetzung und des Transports der Spaltprodukte aus. Die versuchsbedingten Unsicherheiten beziehen sich hauptsächlich auf die Angabe der Bündelleistung, die nicht gemessen, sondern aus der Leistung des Treiberkerns abgeleitet wurde, und auf die Stoffeigenschaften der Komponenten der Testanlage.

- Auswahl der wesentlichen Ergebnisgrößen, die den Versuchsablauf kennzeichnen.
- Durchführung der Variationsrechnungen mit ATHLET-CD:
Für jeden unsicheren Parameter wurden mit Hilfe des Programmsystems SUSA aus den festgelegten Wertebereichen entsprechend den angegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilungen jeweils Eingabewerte nach dem Zufallsprinzip ausgespielt sowie die entsprechenden ATHLET-CD Eingabedatensätze automatisch generiert. Es wurden $N=208$ Modellrechnungen durchgeführt. Gegenüber der bekannten minimal erforderlichen Anzahl der Modellrechnungen $N_{\min} = 93$, weisen die auf der Basis dieser 208 Rechnungen ermittelten 95% / 95%-Toleranzgrenzen eine deutlich geringere „Konservativität“ auf. Darüber hinaus erhöht sich dabei naturgemäß auch die Genauigkeit der abgeleiteten Sensitivitätskoeffizienten.
- Auswertung der Analyseergebnisse
Aus der Gesamtheit der errechneten alternativen Ergebnisse wurden quantitative Unsicherheitsaussagen in Form von zweiseitigen (95% / 95%)-Toleranzgrenzen hergeleitet sowie die Rangfolge der Beiträge der einzelnen unsicheren Parameter zur jeweiligen Ergebnisunsicherheit ermittelt (Sensitivitätsanalyse). Zusätzlich wurden multiple Sensitivitätsmaße berechnet, welche eine Gegenüberstellung und einen quantitativen Vergleich des Einflusses von modellbedingten und versuchsbedingten Unsicherheiten ermöglichen.

Die Ergebnisse der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bestätigen, dass die wesentlichen physikalischen Vorgänge hinsichtlich der Bündelzerstörung vom Rechen-

programm nachgebildet werden können. Die entsprechenden Messwerte liegen weitgehend innerhalb der Toleranzgrenzen der Rechenergebnisse. Besonders hervorzuheben ist die relativ geringe Breite des Unsicherheitsbereiches im Bezug auf die berechnete Wasserstofferzeugung, was die Eignung der vorhandenen Oxidationsmodelle untermauert. Dagegen ist die Unsicherheit im Bezug auf die Modellierung der Bildung und der Verlagerung der Schmelze noch groß und stark von den entsprechenden Modellparametern abhängig.

Zur Gesamtunsicherheit der Rechenergebnisse trugen maßgeblich die Unsicherheiten in der gewählten Nodalisierung im Bündelbereich, in der Beschreibung der Wärmeübertragung durch Dampfkonvektion und in den Temperaturkriterien zur Schmelzebildung (modellbedingte Parameter), sowie in der Bündelleistung und in der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit der ZrO_2 -Schicht in der Bündelumfassung (versuchsbedingte Parameter) bei.

Insgesamt überwiegt der Einfluss der versuchsbedingten unsicheren Parameter auf die Berechnung des thermischen Verhaltens des Testbündels, was die ausreichende Aussagesicherheit der Rechenmodelle für die frühe Phase der Kernzerstörung belegt. Bedingt durch den Einfluss auf den Verlauf der berechneten Temperaturen im Testbündel sind auch die Unsicherheiten der gesamten Wasserstofferzeugung und der Freisetzung der Spaltprodukte stark von den versuchsbedingten Unsicherheiten abhängig.

Demgegenüber sind die modellbedingten Unsicherheiten maßgebend bei der Simulation der Oxidationskinetik, insbesondere während der Dampfmangelphase, sowie des Jod-Transports im Kühlkreislauf. Aus dieser Analyse wurde keine unmittelbare Modellschwäche identifiziert. Zu beachten ist jedoch der Einfluss der Nodalisierung im Bündelbereich.

Im Rahmen der Code-Validierung werden bei den in der GRS durchgeführten Nachrechnungen von verschiedenen Versuchen in einer bestimmten Anlage, so weit es möglich ist, die gleichen Nodalisierungen und Modelloptionen verwendet. Geändert werden nur die entsprechenden Anfangs- und Randbedingungen des jeweiligen Experiments. Für die im Kap. 3 beschriebene Referenzrechnung des Versuchs FPT3 wurde die gleiche Nodalisierung verwendet, die sich bei den Nachrechnungen der PHÉBUS-Versuche FPT1 und FPT2 bewährt hat /AUS 03/, /TRA 08/. Für zukünftige Validierungsrechnungen ist somit eine parametrische Untersuchung der gewählten

Nodalisierung vor allem im Bezug auf die Konvergenz der Rechenergebnisse zu empfehlen.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung belegen die Tendenz des Rechenprogramms, die Freisetzung von halbflüchtigen und schweren Spaltprodukten zu überschätzen. In diesem Gebiet sind weitere Entwicklungs- und Validierungsarbeiten notwendig. Desweiteren ergibt sich der Bedarf weiterer Validierungsarbeiten im Bezug auf die Modelle zum Transport von Spaltprodukten sowie zur B_4C -Oxidation. Die Nachrechnung des Versuchs FPT3 soll wiederholt werden, sobald die endgültigen Versuchsergebnisse bezüglich Freisetzung und Transport von Spaltprodukten vorliegen.

Die Ergebnisse der zusätzlichen Rechnungen, die zur Bestimmung der zeitabhängigen Sobol'schen Sensitivitätsindizes für die beiden Parametergruppen von modell- und versuchsbedingten Unsicherheiten durchgeführt worden sind, zeigten eine weitgehende qualitative Übereinstimmung mit den Sensitivitätsergebnissen auf der Basis multipler Rangkorrelationskoeffizienten. Es ist daher zu erwarten, dass die Bestimmung der Sobol'schen Indizes und die hierfür notwendigen zusätzlichen Rechnungen auch für zukünftige Sensitivitätsanalysen nicht mehr erforderlich sein werden.

Für einige Ergebnisgrößen sind die berechneten Bestimmtheitsmaße RR^2 relativ niedrig, was die Aussagesicherheit der abgeleiteten Sensitivitätsmaße beeinträchtigt. Ein möglicher Grund dafür ist die große Anzahl von diskreten Werten der spezifizierten unsicheren Parameter, insbesondere bei der Auswahl von Korrelationen zur Oxidation und zur B_4C -Stahl-Wechselwirkung. Der Stichprobenumfang von 208 Rechnungen reicht nicht aus, um alle mögliche Kombinationen der diskreten Parameter abzudecken. Dies soll in zukünftigen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durch Verbesserung des Kenntnisstandes vermieden werden.

In diesem Zusammenhang ist es den Programmentwicklern zu empfehlen, die Anzahl der angebotenen Korrelationen auf der Basis der bisherigen Erkenntnisse aus der Programmvalidierung weitgehend zu verringern. Dies gilt insbesondere für die Auswahl der Modelle zur Zr-Oxidation.

Insgesamt erweist sich die Anwendung von Methoden der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse als eine wertvolle Ergänzung zum Validierungsprozess eines Rechenprogramms.

7 Literatur

- /ATH 09/ K. Trambauer, Ch. Bals, J.-D. Schubert, H. Austregesilo
ATHLET-CD Mod 2.2 Cycle A – User's Manual,
GRS-P-4 , Vol. 1, March 2009.
- /AUS 03/ H. Austregesilo
Safety Evaluation of the PHEBUS FPT3 Experiment
GRS, Technische Notiz TN-AUH-01/03, Januar 2003.
- /AUS 07/ H. Austregesilo, Ch. Bals, K. Trambauer
Post-test calculation and uncertainty analysis of the experiment QUENCH-
07 with the system code ATHLET-CD
Nuclear Engineering and Design **237** (2007) 1693-1703.
- /AUS 08/ H. Austregesilo, Ch. Bals, W. Erdmann, K. Trambauer
Stand der Arbeiten zur Validierung des Rechenprogramms ATHLET-CD
GRS-A-3435, August 2008.
- /AUS 08a/ H. Austregesilo, Ch. Bals, K. Trambauer
Post-test Calculations of the Experiments PHEBUS FPT2 and FPT3 with
the Code ATHLET-CD/SOPHAEROS
Proc. of the 2008 ANS Annual Meeting
Anaheim, USA, June 8-12, 2008.
- /BIA 07/ B. Biard, Y. Garnier, J. Guillot, C. Manenc, P. March, F. Payot
FPT3 Preliminary Report
Document Phébus FP IP/06/569, IRSN (2007).
- /CLE 03/ B. Clément et al.
LWR severe accident simulation: synthesis of the results and interpreta-
tions of the first PHEBUS FP experiment FPT0
Nuclear Engineering and Design **226** (2003) 5-82.

- /DEI 09/ H. Deitenbeck
 How to run ATHLET under WINDOWS – The ATHLET Graphical User’s Interface
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Garching, March 2009.
- /DEV 08/ J. Devoy
 Phebus-FPT3 Post Test Analyses at Point C. Preliminary results
 Phébus FPT3 CCIC Meeting, Aix-en-Provence (2008).
- /DRA 06/ T. Drath, T. Hollands, I. Kleinhietpaß, H.-J. Wagner, M. K. Koch,
 Simulation der Bündelversuche QUENCH-07 und QUENCH-08 mit
 ATHLET-CD 2.0A/1.1L
 2. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 150 1305
 Lehrstuhl für Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-Universität Bochum, LEE-40, Juli 2006.
- /DRA 07/ T. Drath, T. Hollands, H.-J. Wagner, M. K. Koch,
 Nachrechnung des „In-Pile“-Versuchs PHEBUS FPT-3 mit ATHLET-CD
 2.1A und Bewertung der B₄C-Modellbasis
 3. Technischer Fachbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 150 1305
 Lehrstuhl für Energiesysteme und Energiewirtschaft, Ruhr-Universität Bochum, LEE-43, März 2007.
- /FIC 04/ F. Fichot, B. Adroguer, A. Volchek, Yu. Zvonarev
 Advanced treatment of zircaloy cladding high-temperature oxidation in severe accident code calculations
 Part III: Verification against representative transient tests
 Nuclear Engineering and Design **232** (2004) 97-109.
- /GLA 97/ H. Glaeser, E. Hofer, M. Kloos, T. Skorek
 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen von Thermohydraulik-Rechenprogrammergebnisse für das Integralexperiment LSTF SB-CL-18
 GRS-A-2496, August 1997.

- /GLA 01/ H. Glaeser, E. Hofer, A. Hora, B. Krzykacz-Hausmann, J. Leffer, T. Skorek
Einfluss von Modellparametern auf die Aussagesicherheit des Thermo-
hydraulik-Rechenprogramms ATHLET
GRS-A-2963, September 2001.
- /GLA 08/ H. Glaeser, B. Krzykacz-Hausmann, W. Luther, S. Schwarz, T. Skorek
Methodenentwicklung und exemplarische Anwendungen zur Bestimmung
der Aussagesicherheit von Rechenprogrammergebnissen
GRS-A-3443, November 2008.
- /GOT 85/ R. C. Gottula et al.
Forced convective, non-equilibrium, post-CHF heat transfer experimental
data and correlations comparison report
NUREG/CR-3193, EGG-2245, March 1985.
- /HOF 93/ E. Hofer
Probabilistische Unsicherheitsanalyse von Ergebnissen umfangreicher
Rechenmodelle
GRS-A-2002, Januar 1993.
- /HOF 99/ E. Hofer
Sensitivity analysis in the context of uncertainty analysis for computationally
intensive models
Computer Physics Communications **117** (1999) 21-34.
- /KLO 99/ M. Kloos, E. Hofer
SUSA – PC, A personal computer version of the program system for uncer-
tainty and sensitivity analysis of results from computer models,
Version 3.2. - User's Guide and Tutorial
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Garching, Germany, Au-
gust 1999.
- /KRZ 88/ B. Krzykacz
MEDUSA 01 – Ein Programm zur Generierung von "Simple Random"- und
"Latin Hypercube" Stichproben für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen
von Ergebnissen umfangreicher Rechenmodelle
GRS-A-1496, 1988

- /KRZ 90a/ B. Krzykacz
EQUUS, A Computer Program for the Derivation of Empirical Uncertainty
Statements on Results from Large Computer Models
GRS-A-1720, 1990
- /KRZ 90b/ B. Krzykacz
SAMOS, A Computer Program for the Derivation of Sensitivity Measures of
Results from Large Computer Models
GRS-A-1700, 1990
- /KRZ 94/ B. Krzykacz, E. Hofer, M. Kloos
A software system for probabilistic uncertainty and sensitivity analysis of
results from computer models
Proceedings of PSAM-II, San Diego, U.S.A., March 20-25, 1994.
- /KRZ 07/ B. Krzykacz-Hausmann
“The principal variance-based sensitivity indices can be estimated by the
“Ishigami-Homma-Saltelli” method without assuming independence be-
tween the input variables”.
Proceedings of SAMO 2007 Conference, Budapest 18-22 June 2007.
- /LUZ 06/ O. De Luze
Preliminary analyses of the Phebus FP FPT3 experiment using the ICARE2
V3mod1.4 code (B₄C and bundle aspects)
Note technique DPAM/SEMCA 2006-314 ,NT Phebus IP/06/570, IRSN
(2006).
- /PAY 08/ F. Payot et al.
Overview of γ -nuclide behaviour in the circuit during the FPT3 transient
Phébus FPT3 CCIC Meeting, Aix-en-Provence (2008).
- /PHE 02/ PHEBUS FP Data Book FPT3
TG 399, Document PHEBUS FP IP/02/517
Note technique NT 02/001, IRSN/DRS (2002).

- /SAL 00/ A. Saltelli, K. Chan, E. M. Scott (eds)
Sensitivity Analysis
J. Wiley & Sons 2000.
- /SIE 00/ L. J. Siefken, E. W. Coryell, E. A. Harvego, J. K. Hohorst
MATPRO – A Library of Material Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis
SCDAP/RELAP5/MOD 3.3 Code Manual
Idaho National Engineering and Environment Laboratory
NUREG/CR-6150, Vol. 4, Rev. 2, INEL-96/0422, August 2000.
- /TRA 08/ K. Trambauer
Nachrechnung des Versuchs PHEBUS FPT2 mit dem Rechenprogramm ATHLET-CD
GRS - Technische Notiz TN-TRB-08-01, April 2008.
- /TRA 09/ K. Trambauer et al.
Weiterentwicklung ATHLET/ATHLET-CD
Abschlussbericht – Vorhaben RS 1162
GRS-A-3461, März 2009.
- /VOL 04/ A. Volchek, Yu. Zvonarev, G. Schanz
Advanced treatment of zircaloy cladding high-temperature oxidation in severe accident code calculations
Part II: Best-fitted parabolic correlations
Nuclear Engineering and Design **232** (2004) 85-96.
- /WEB 09/ S. Weber
Nachrechnung des Versuchs PHEBUS FPT3 mit ATHLET-CD
GRS - Technische Notiz TN-WES-09/01, August 2009.

8 Verteiler

		Gedruckte Exemplare:	Pdf-Version:
BMWi			
Referat III B 4		1 x	
GRS-PT/B			
Internationale Verteilung		40 x	
Projektbegleiter	(seh)	3 x	
GRS			
Geschäftsführung	(lim, stj)		je 1 x
Bereichsleiter	(erv, lim, prg, rot, paa, zir)		je 1 x
Abteilungsleiter	(som, gls, poi)		je 1 x
Projektleiter	(auh)	1 x	
Projektbetreuung	(kgl)		1 x
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x
Autoren	(auh, krb, skt, wes)	je 1 x	
Bibliothek	(Köln)	1 x	
Gesamtauflage		Exemplare:	50