

## **ATHLET-Weiter- entwicklung für HTR**



## **Technischer Bericht/ Technical Report**

Reaktorsicherheitsforschung-  
Vorhabens Nr.:/  
Reactor Safety Research-Project No.:  
RS1191

Vorhabensitel / Project Title:  
Rechenmethodenentwicklung  
zur Bewertung der Sicherheit  
von gasgekühlten Hochtempe-  
raturreaktoren und super-  
kritischen Leichtwasserreakto-  
ren

Development of computational  
methods for the safety  
assessment of gas-cooled  
hightemperature and supercritical  
light-water reactors

Berichtstitel / Report Title:  
ATHLET-Weiterentwicklung für  
HTR

Autor / Authors:  
G. Lerchl

Berichtszeitraum / Publication Date:  
August 2011

Anmerkung:  
Das diesem Bericht zugrunde lie-  
gende F&E-Vorhaben wird im Auf-  
trag des Bundesministeriums für  
Wirtschaft und Technologie  
(BMWi) unter dem Kennzeichen  
RS1191 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt  
dieser Veröffentlichung liegt beim  
Auftragnehmer.



## Kurzfassung

Die Simulation unterschiedlicher Arbeitsmedien – auch innerhalb eines Simulationsmodells – erfordert in ATHLET entsprechende Programmiererweiterungen. Der vorliegende Bericht zu F&E-Vorhaben RS1191 dokumentiert die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse zur Erweiterung von ATHLET hinsichtlich der Auswahl des Arbeitsmediums. Es wurde in ATHLET die Möglichkeit geschaffen, über den Eingabedatensatz das Arbeitsmedium im Simulationssystem oder in Teilen davon auswählen zu können. Der lokal im Simulationsgebiet vorliegende Typ des Arbeitsmediums wird nicht nur dem Stoffwertpaket, sondern auch im gesamten Simulationsmodell (einschließlich Wärmeleitmodul) zur Verfügung gestellt. Als erstes neues Arbeitsmedium wurde schweres Wasser bereitgestellt. Dazu wurden die Leichtwasser-Stoffwerte angepasst, die sich am deutlichsten von denen des schweren Wassers unterscheiden (Dichte, Enthalpie, Viskosität und Wärmeleitfähigkeit). Die kritischen Massenstromdichten für das Ausströmmodell werden weiterhin für leichtes Wasser bestimmt, der in der ATHLET-Rechnung verwendete kritische Massenstrom jedoch mit dem Dichteverhältnis (1,11) multipliziert. Ablauffähigkeit und Plausibilität der Simulation von Kreisläufen mit schwerem Wasser wurden an Hand von Kühlmittelverluststörfällen überprüft. Dazu wurden Rechenergebnisse mit schwerem bzw. leichtem Wasser im Primärkreis eines Druckwasserreaktors verglichen.

Mit der Wahl des Arbeitsmediums wurde eine ATHLET-Version geschaffen, die den Entwicklern (auch externen) den Einbau weiterer Arbeitsmedien erheblich erleichtert. Der Einbau kann in der ATHLET-Standardversion erfolgen, so dass diese Erweiterungen allen Anwendern zur Verfügung gestellt werden können. Die durchgeführten Vergleichsrechnungen führten zu ähnlichen Ergebnissen, auch hinsichtlich des Programmverhaltens.

## **Abstract**

The simulation of different working fluids within a given ATHLET simulation model requires appropriate extensions to the ATHLET system code. The present report documents the respective development carried out in ATHLET and presents obtained results.

ATHLET has been extended such that the working fluid in the whole simulation system or parts of it can be chosen in the input data set. The working fluid is known in every part of the simulation system including the heat conduction module. The working fluid implemented first is heavy water. To this aim, the light water properties differing most from heavy water (i.e. density, enthalpy, viscosity and heat conductivity) have been adjusted to those of heavy water. The critical mass flow densities of the discharge model are still determined for light water; the critical mass flow used in ATHLET, however, is multiplied by the density ratio (1.11). The calculation procedure and physical plausibility of simulations with heavy water have been checked with loss of coolant accidents problems by comparing results for heavy or light water in a PWR primary loop.

The newly implemented ATHLET capability of choosing the working fluid significantly simplifies future extensions of ATHLET to account for other working fluids by (also external) code developers. By implementing into the ATHLET standard version, the extensions are made available to every ATHLET users. Comparison calculations show similar results, regarding also the code running behaviour.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Wahl des Arbeitsmediums .....</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Arbeitsmedium Schweres Wasser.....</b>	<b>3</b>
3.1	Stoffwerte für Schweres Wasser .....	3
3.2	Weitere Modelländerungen .....	4
3.3	Vergleich der ATHLET HW-Stoffwerte mit den NIST Daten .....	4
3.4	Testrechnungen mit Schwerem Wasser als Arbeitsmedium .....	12
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung und weiteres Vorgehen .....</b>	<b>15</b>
<b>5</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>16</b>
<b>6</b>	<b>Verteiler .....</b>	<b>17</b>





# 1 Einleitung

Derzeit werden weltweit neue Typen von Kernreaktoren der 4. Generation (sog. GEN-IV-Reaktoren) entwickelt, die z.T. neue Stoffe als Kühlmittel verwenden:

- (V)HTR: (Very) High Temperature Reactor Helium
- SFR: Sodium Cooled Fast Reactor Natrium
- LFR: Lead Cooled Fast Reactor Blei-Wismut
- MSR: Molten Salt Reactor Salzschnmelzen

Häufig werden auch unterschiedliche Arbeitsmedien in einem Reaktor verwendet, z. B. Natrium im Primärkreis und LW auf der Sekundärseite. Um ATHLET zur Simulation von Transienten und Störfällen in diesen Reaktoren einsetzen zu können, muss das Programm in vielfältiger Hinsicht erweitert werden. Die in dieser TN beschriebenen Arbeiten stellen einen ersten Schritt auf diesem Wege dar. Sie beinhalten vor allem

- die Wahl des Arbeitsmediums über Eingabedaten,
- die Bereitstellung des Arbeitsmediums an jedem Punkt des Simulationsnetzwerkes für alle Modelle,
- die Schaffung von Schnittstellen im Stoffwertprogramm für den Einbau weiterer Stoffwertpakete.

Zur Vorbereitung von ATHLET für unterschiedliche Arbeitsmedien mussten mehr als hundert Unterprogramme geändert werden. Nach diesen Erweiterungen der Programmstruktur wird sich der Einbau weiterer Arbeitsmedien nun erheblich einfacher gestalten.

Als erstes neues Arbeitsmedium wurde Schweres Wasser implementiert, obwohl dieses Kühlmittel in keinem der neuen Reaktoren verwendet wird. Ausschlaggebend für diese Entscheidung war der geringe Aufwand, da lediglich die LW-Stoffwerte modifiziert werden mussten, die Modelle jedoch unverändert blieben. Außerdem kann ATHLET auch für Analysen von Transienten und Störfällen in Schwerwasserreaktoren eingesetzt werden.

## 2 Wahl des Arbeitsmediums

Über die Eingabedaten kann der ATHLET Anwender nun das Arbeitsmedium für sein Simulationsmodell oder Teile davon bestimmen. In der Regel wird ein Arbeitsmedium für ein vollständiges Thermofluidsystem (TFS) gewählt. Unter einem TFS versteht man einen abgeschlossenen Teil des Simulationsmodells, der mit den anderen Teilen keine hydraulische Verbindung hat. In einem DWR bilden der Primärkreis und die Sekundärseiten solche TFS (auch wenn z. B. beim Dampferzeugerheizrohrleck dann doch eine hydraulische Verbindung entsteht). Darüber hinaus kann auch für einzelne Thermofluidobjekte (TFO) das Arbeitsmedium festgelegt werden. Ob das sinnvoll ist, hängt vom zu simulierenden Fall ab und obliegt der Entscheidung des Anwenders.

Jedem Arbeitsmedium wird eine Steuergröße (IFLUID) zugeordnet. Kenngrößen wie Druck und Temperatur am kritischen Punkt wurden in fluidspezifischen Feldern abgelegt, ebenso die Grenzen der Stoffwertapproximationen.

Während der Eingabe wird jedem Kontrollvolumen (KV), das zum jeweiligen TFS bzw. TFO gehört, dieser Index zugewiesen. Dieser wird dem Stoffwertprogramm durchgereicht und steuert dort die Wahl der Stoffwertkorrelationen. Zusätzlich wurde eine globale Variable geschaffen, die den Index des im Programmablauf aktuell verwendeten Fluidindex für untergeordnete Unterprogramme bestimmt. Für die parallele Ausführung von ATHLET wurde diese als ‚thread-private‘ deklariert.

Die Leitungselemente holen sich den Fluidindex von den benachbarten KVs und geben ihn an die Leitungsmodelle (z. B. Wandreibungmodell) weiter. Diese müssen dann entscheiden, ob von LW abweichende Korrelationen herangezogen werden, oder es genügt, die LW-Korrelationen mit den neuen Stoffwerten anzuwenden.

Für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten (HTC) im Modul HECU wird ähnlich verfahren. Jedes Wärmeleitelement kennt den Index des angrenzenden KVs und damit den Fluidindex. Auch hier wird innerhalb der HTC-Programme über die Wahl der geeigneten HTC-Korrelation entschieden.

Im Leit- und Regelmodul GCSM können eine Reihe von Stoffwerten als Funktion von Druck und Temperatur bestimmt werden. Der Programmteil wurde modifiziert, so dass nun jedes in ATHLET vorhandene Arbeitsmedium ausgewählt werden kann.

### 3            **Arbeitsmedium Schweres Wasser**

Als erstes neues Arbeitsmedium wurde Schweres Wasser bereitgestellt. Gründe hierfür waren zum einen der vergleichsweise geringe Arbeitsaufwand, zum anderen der Umstand, dass ATHLET in naher Zukunft auch für Analysen zum argentinischen Schwerwasser-Reaktor CNA-II eingesetzt werden soll.

#### 3.1            **Stoffwerte für Schweres Wasser**

Auf der Website des National Institute of Standards and Technology /NIST1/ wird ein Online-Rechner bereitgestellt, mit dem man die thermo-physikalischen Eigenschaften zahlreicher Stoffe – u.a. für HW – bestimmen kann. Für die Daten werden Referenzen /LEM69, LIN99, NIST2/ empfohlen.

Das Programm berechnet für einen vorgegebenen Druck und einen Temperaturbereich die Stoffwerte in Form von Tabellen. Ein im Rahmen dieser Arbeit entwickeltes Treiberprogramm berechnet zu den in den NIST-Tabellen enthaltenen Stützwerten für Druck und Temperatur die HW-Stoffwerte mit dem modifizierten LW-Stoffwertprogramm von ATHLET und legt die NIST- und die ATHLET-Werte in Plot-Dateien ab, so dass Vergleichsplots erstellt werden können.

Da die Stoffeigenschaften von HW denen von LW ähnlich sind, wurde kein neues Stoffwertpaket entwickelt. Es wurden im LW-Stoffwertprogramm an geeigneten Stellen die Stoffwerte modifiziert. Für Enthalpie und spez. Volumen wurden im Unterprogramm (UP) MPPS die LW-Sättigungswerte (als Funktion des Drucks) sowie deren partielle Ableitungen nach dem Druck an HW angepasst:

$$\begin{aligned} \text{HLSI}_{\text{HW}} &= 0.968 * \text{HLSI}_{\text{LW}} & h' \\ \text{HLSPI}_{\text{HW}} &= 0.968 * \text{HLSPI}_{\text{LW}} & \delta h' / \delta P \\ \text{HVSI}_{\text{HW}} &= 0.933 * \text{HVSI}_{\text{LW}} & h'' \\ \text{HVSPI}_{\text{HW}} &= 0.933 * \text{HVSPI}_{\text{LW}} & \delta h'' / \delta P \\ \text{VLSI}_{\text{HW}} &= 0.900 * \text{VLSI}_{\text{LW}} & v' \\ \text{VLSPI}_{\text{HW}} &= 0.900 * \text{VLSPI}_{\text{LW}} & \delta v' / \delta P \\ \text{VVSI}_{\text{HW}} &= 0.900 * \text{VVSI}_{\text{LW}} & v'' \\ \text{VVSPI}_{\text{HW}} &= 0.900 * \text{VVSPI}_{\text{LW}} & \delta v'' / \delta P \end{aligned}$$

Die Delta-Funktionen für die von der Sättigung abweichenden Phasenzustände wurden mit den gleichen Faktoren multipliziert (UP MPPT). Sättigungswerte und Delta-Funktionen werden auch für die partiellen Ableitungen verwendet. Die Stoffwerte für überkritisches HW wurden in analoger Weise angepasst (UP MPPTSC).

Von den Transportgrößen wurden die Viskosität von Flüssigkeit und Dampf sowie die Wärmeleitfähigkeit von Flüssigkeit modifiziert (UP MPZUS1).

### **3.2 Weitere Modelländerungen**

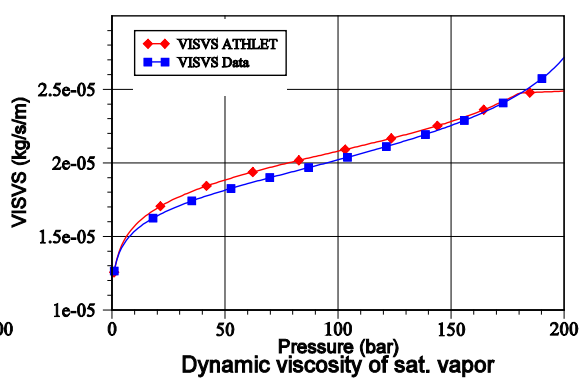
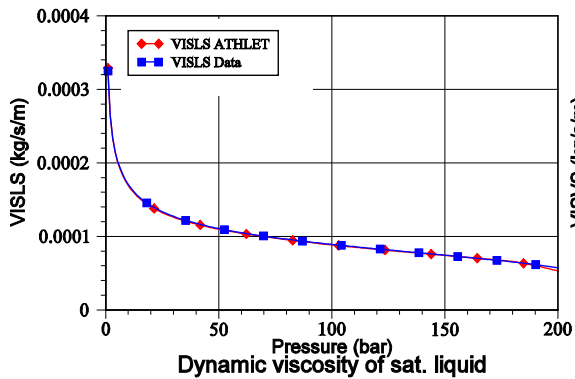
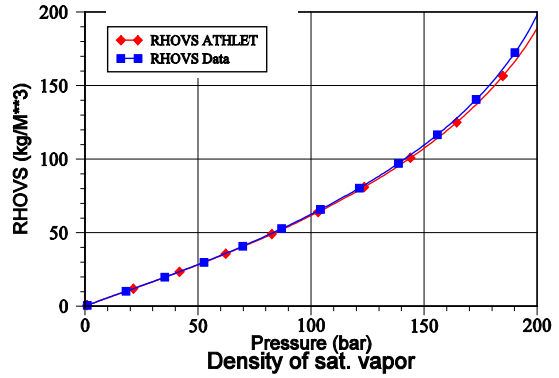
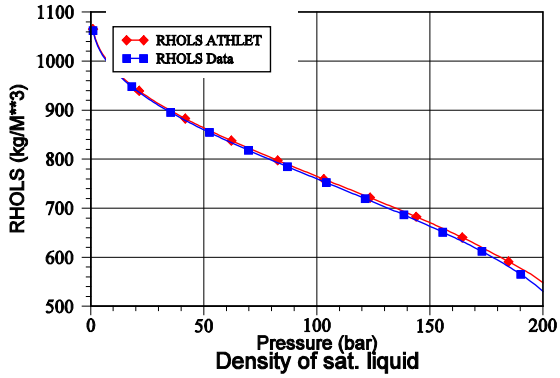
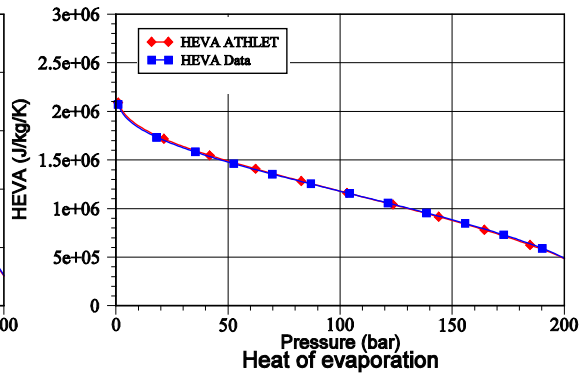
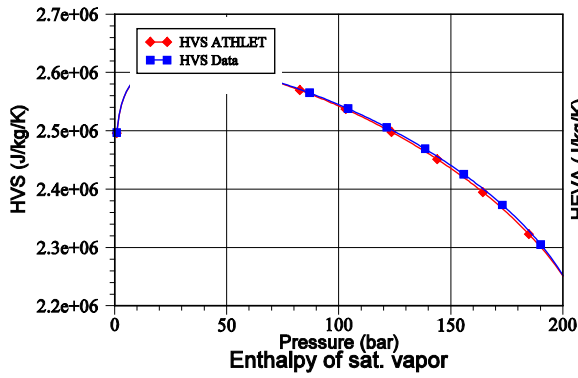
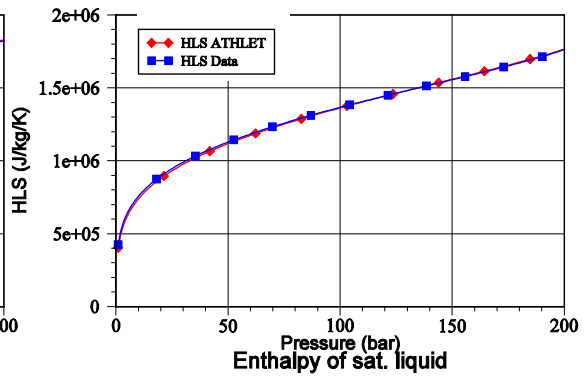
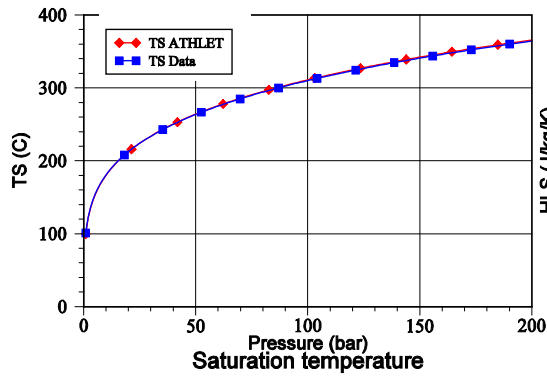
Zur Berechnung von kritischen Ausströmraten am Leck wird in ATHLET in der Regel das Programmmodul CDR1D eingesetzt. Dieses Programm berechnet für vorzugebende Eintrittszustände Tabellen mit kritischen Massenstromdichten, in denen dann während der ATHLET-Rechnung für aktuelle Fluidzustände kritische Massenströme interpoliert werden. CDR1D enthält ein eigenes Stoffwertpaket für LW in p und h (ATHLET: p und T), so dass die Programmänderungen aus ATHLET nicht übernommen werden konnten. Eine Anpassung des CDR1D-Stoffwertprogrammes wurde wegen des damit verbundenen Aufwands nicht vorgenommen. Das Programm berechnet also weiterhin kritische Massenstromdichten für LW. Um der höheren Dichte von HW Rechnung zu tragen, werden die kritischen Massenströme nach der Interpolation in ATHLET mit dem Dichteverhältnis (1.11) multipliziert (UP M1KRIM).

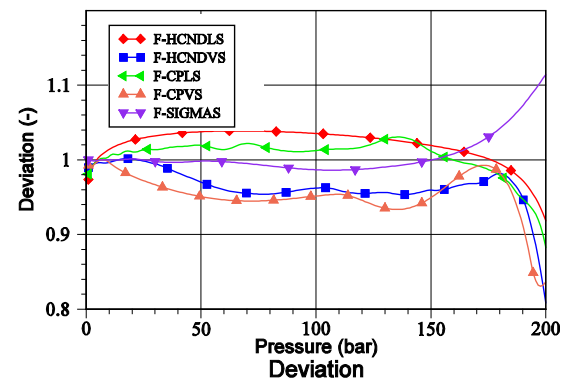
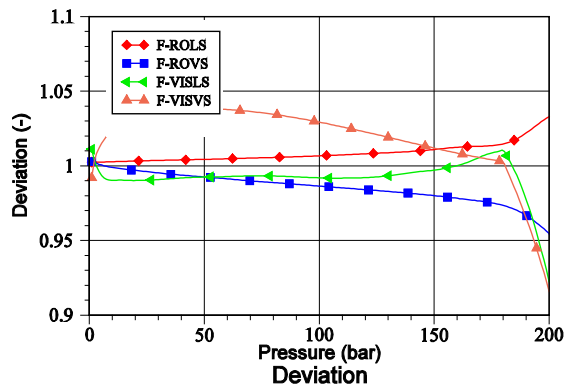
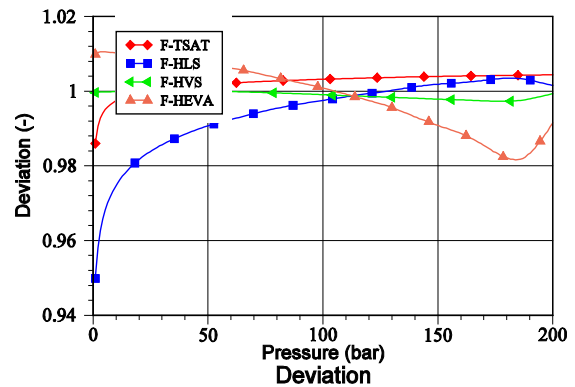
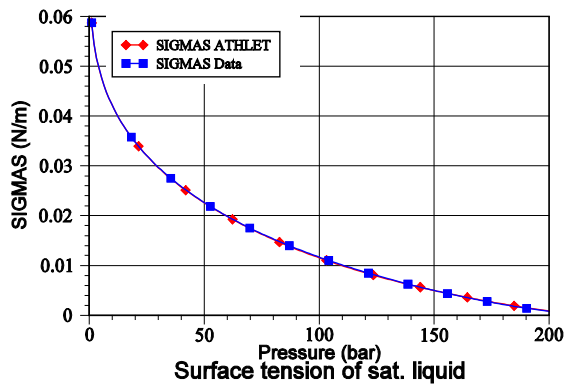
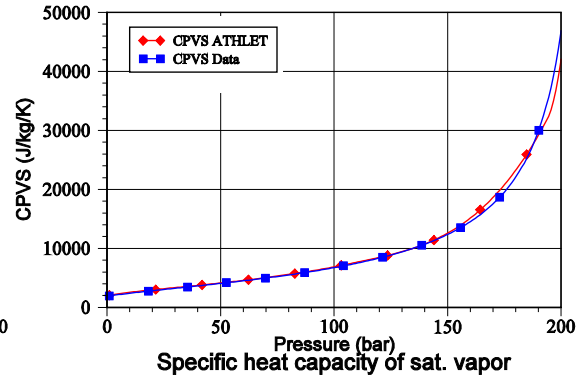
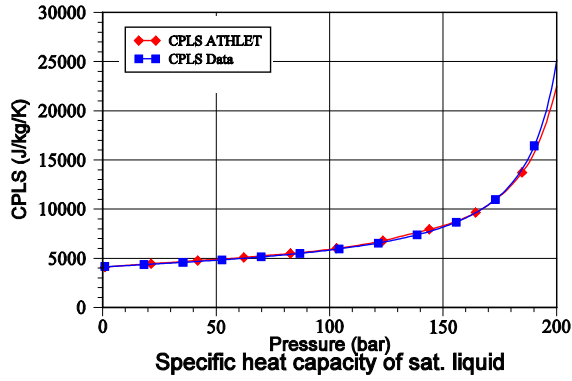
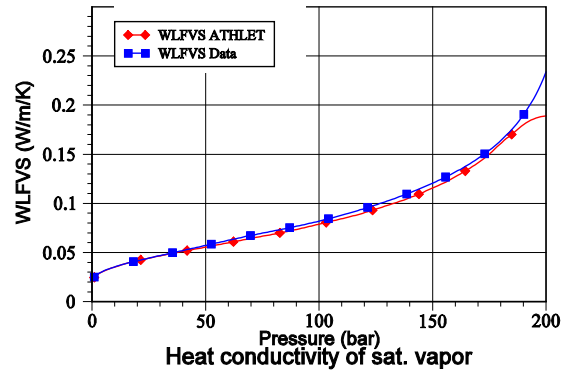
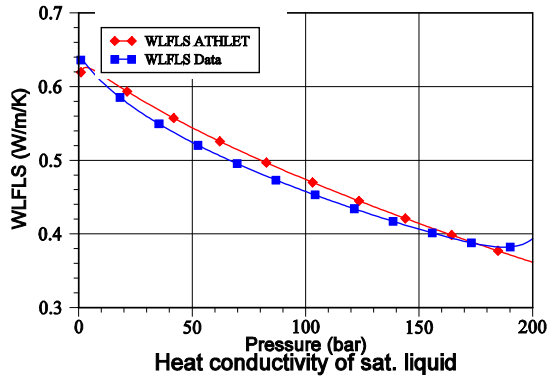
Weitere Modelländerungen wurden nicht vorgenommen.

### **3.3 Vergleich der ATHLET HW-Stoffwerte mit den NIST Daten**

Das NIST-Programm berechnet u.a. folgende von ATHLET benötigte Stoffwerte: Sättigungstemperatur  $T_S$ , spez. Volumen  $v$ , spez. Enthalpie  $h$ , spez. Wärmekapazität  $c_p$ , dynamische Viskosität  $\eta$ , Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$ , Oberflächenspannung  $\sigma$  an der Sättigungslinie sowie die Schallgeschwindigkeit. Die folgenden Bilder vergleichen HW-Sättigungsstoffwerte von ATHLET mit Daten des NIST-Programms. Die letzten drei Plots zeigen die Relationen der ATHLET-Werte zu den NIST-Daten.

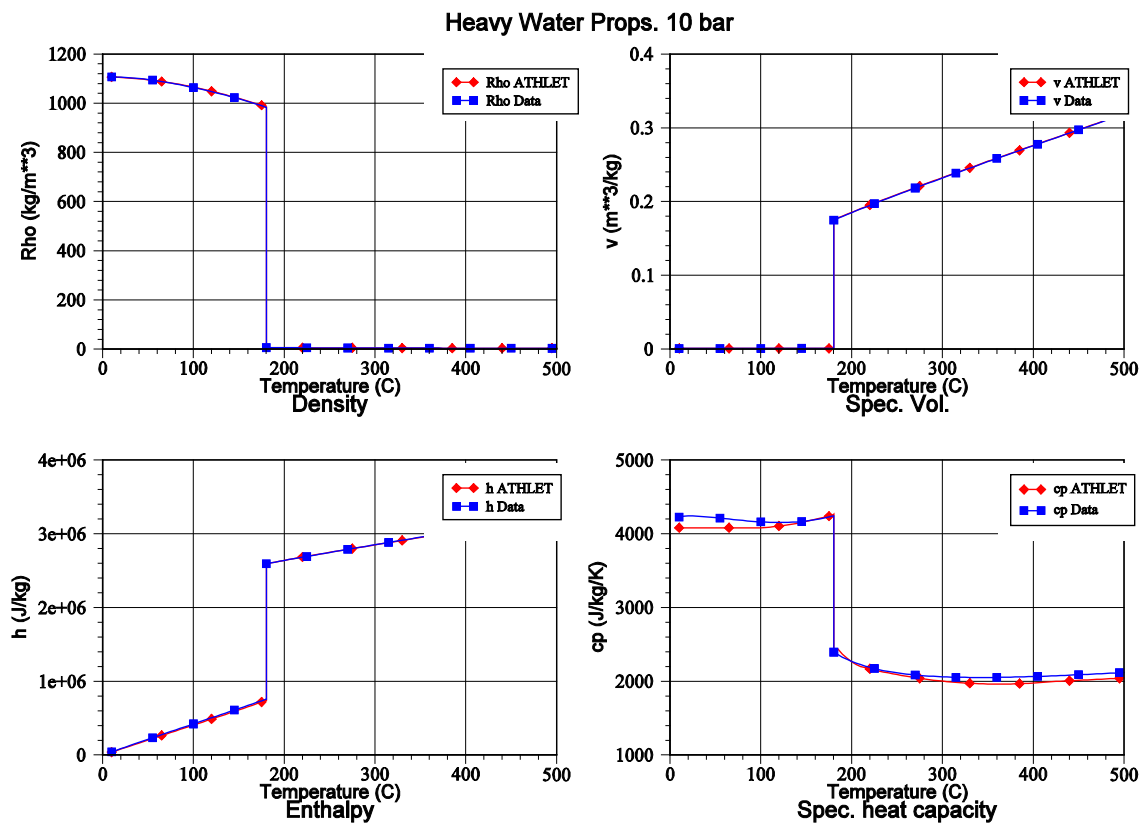
$$F = \frac{Prop_{ATHLET}}{Prop_{NIST}}$$



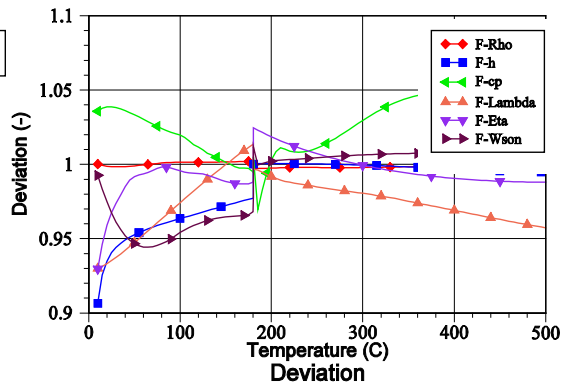
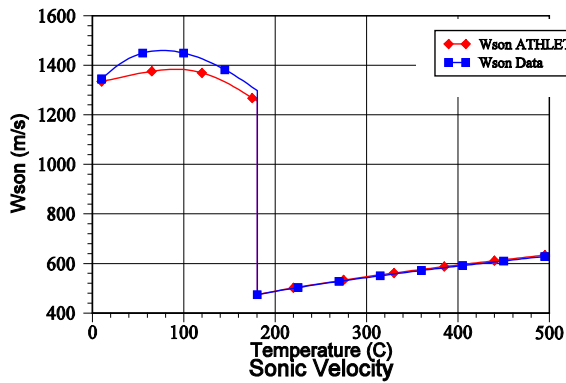
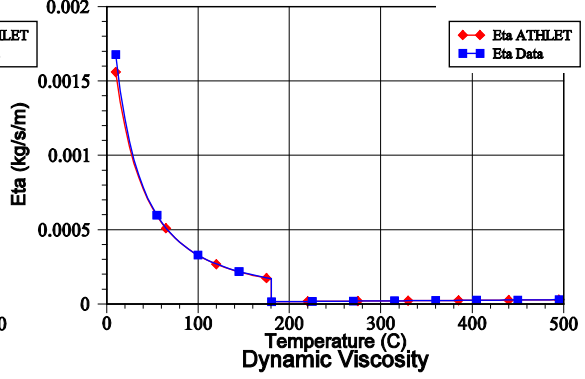
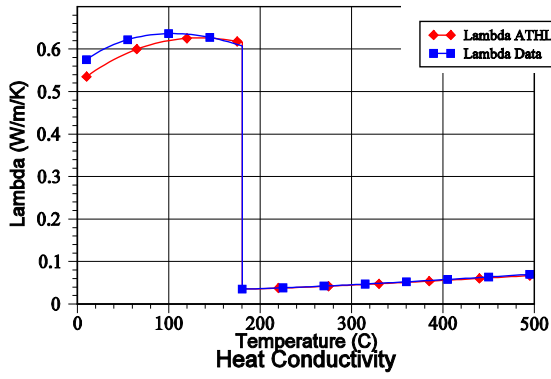


Die folgenden Plots vergleichen die Stoffwerte von Wasser und Dampf im Temperaturbereich von 10 °C bis 500 °C für verschiedene Drücke (die Überschriften beziehen sich auf jeweils vier Plots). Für jeden Druck werden acht Bilder gezeigt, wobei das jeweils achte die Relation der ATHLET-Werte zu den NIST-Daten darstellt. Die Bilder enthalten auch Vergleiche für überkritisches HW (230 bar).

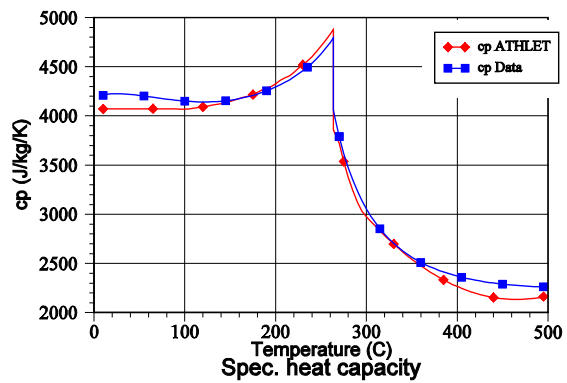
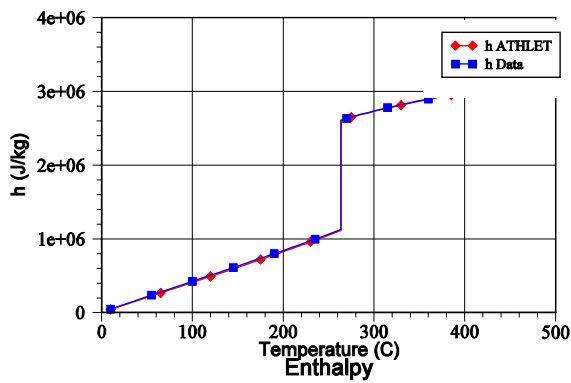
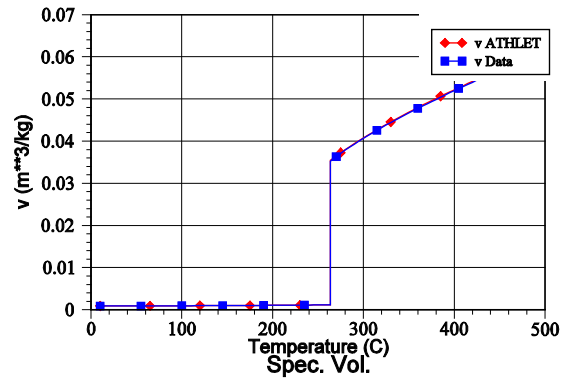
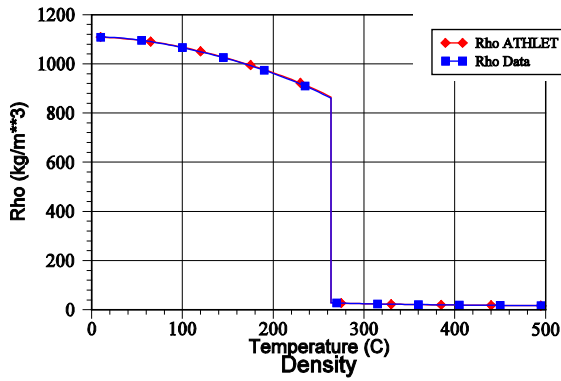
Die von ATHLET berechneten thermodynamischen Stoffwerte weichen in der Regel nicht mehr als 5 % von den NIST-Daten ab. Lediglich die Enthalpie von kaltem Wasser (< 50 °C) liegt bis zu 10 % zu niedrig. Vergleicht man die von ATHLET berechnete Enthalpie für LW mit den LW-Werten von NIST, kommt man zu ähnlichen Differenzen, d.h. auch die LW-Stoffwerte von ATHLET sind in diesem Bereich ungenau.



### Heavy Water Props. 10 bar

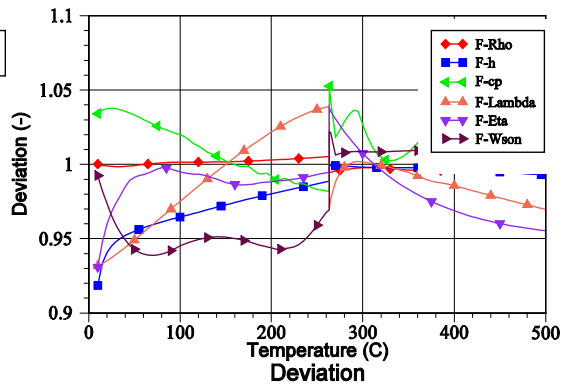
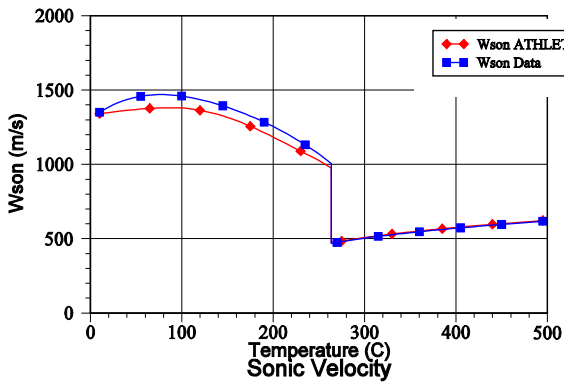
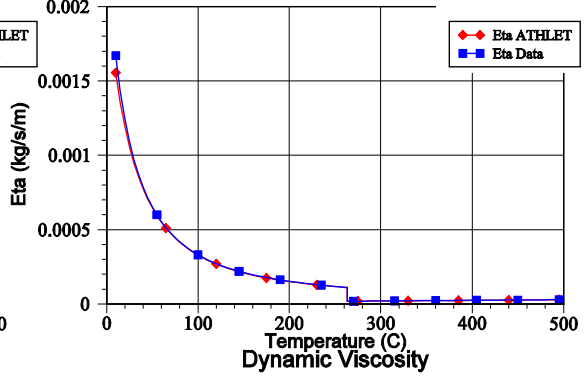
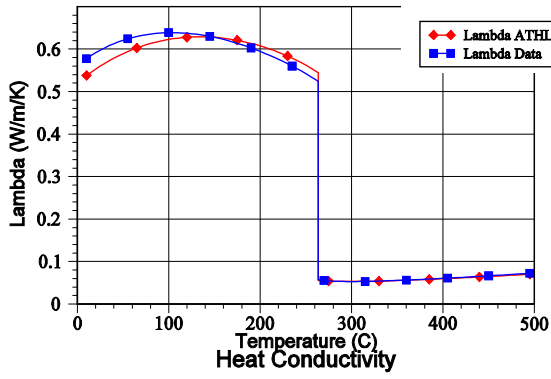


### Heavy Water Props. 50 bar

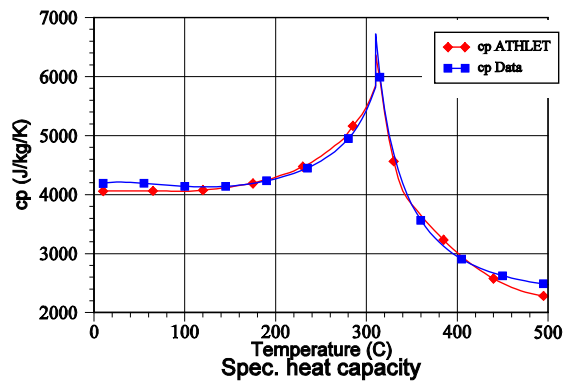
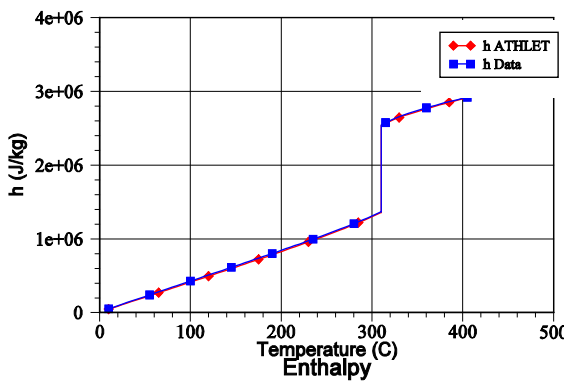
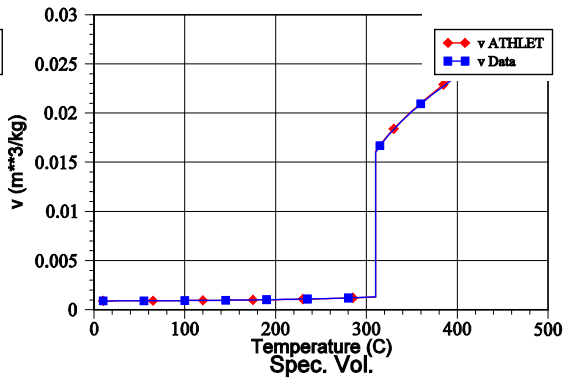
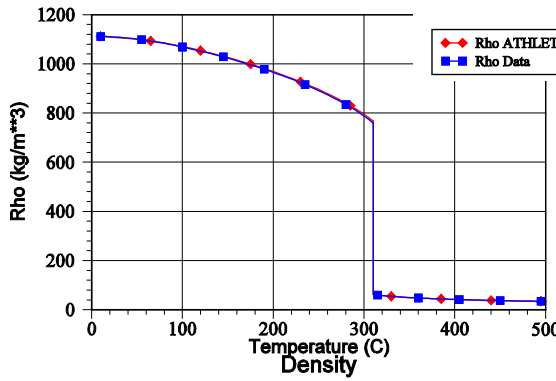




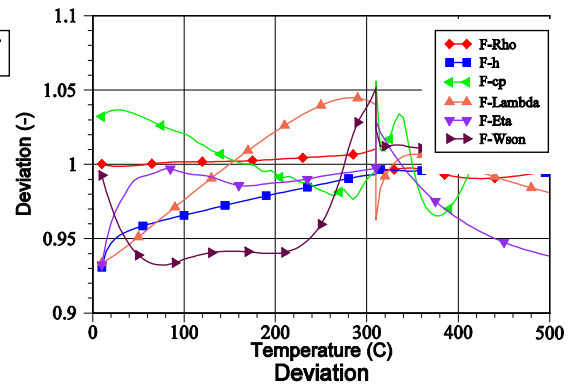
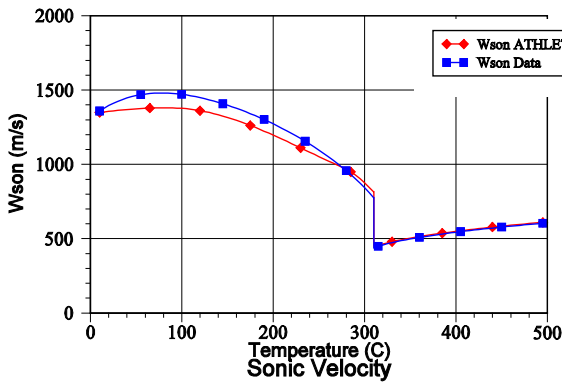
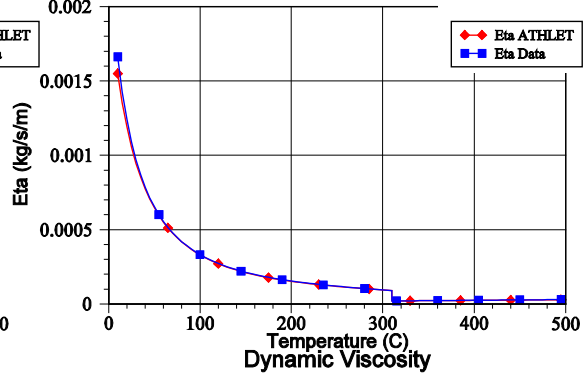
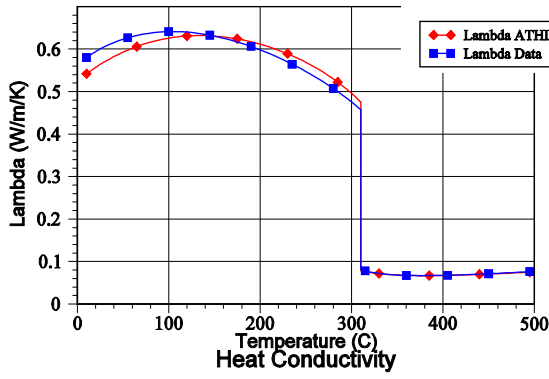
### Heavy Water Props. 50 bar



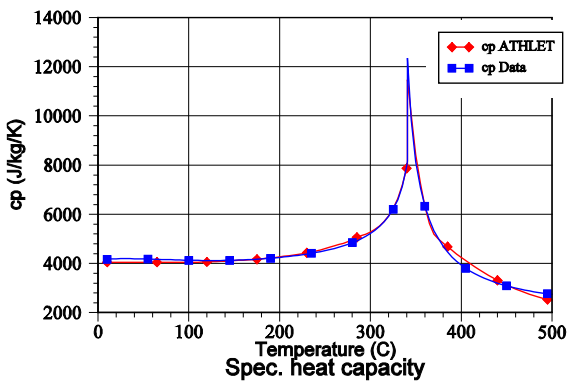
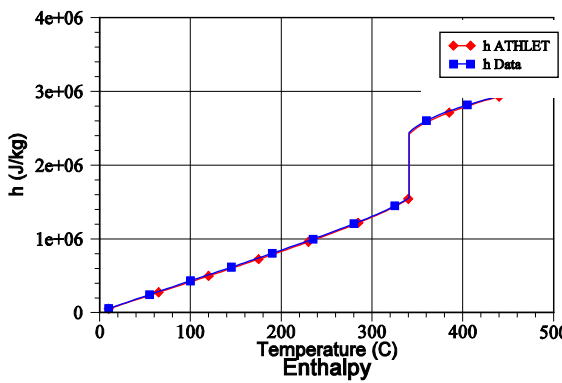
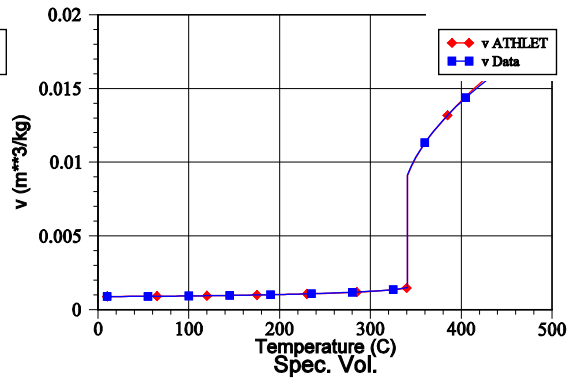
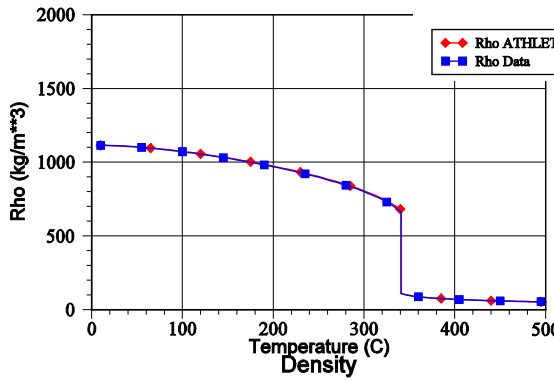
### Heavy Water Props. 100 bar



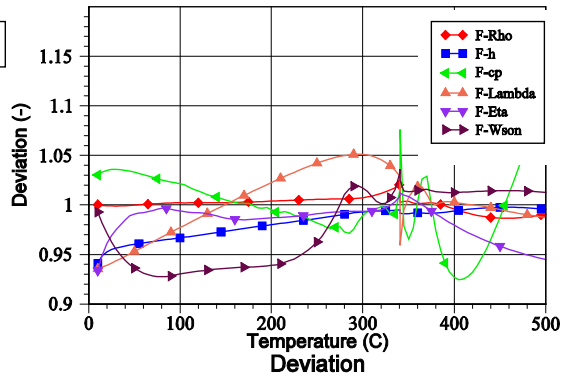
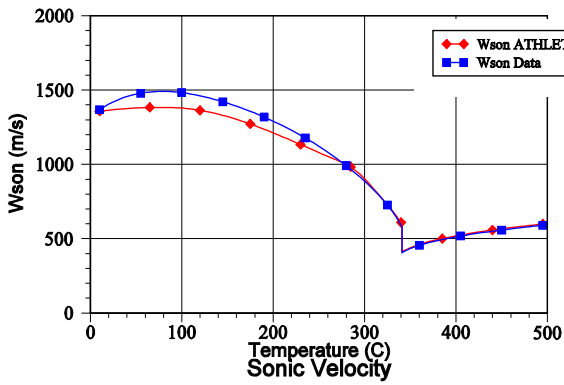
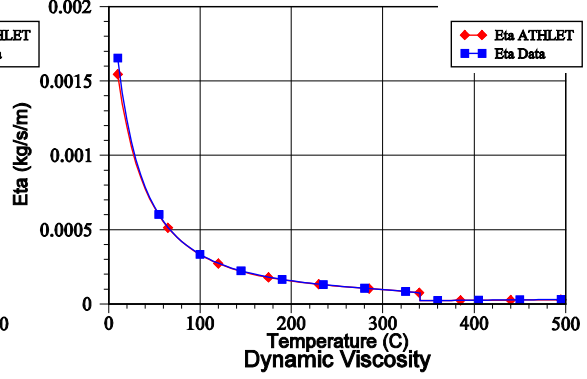
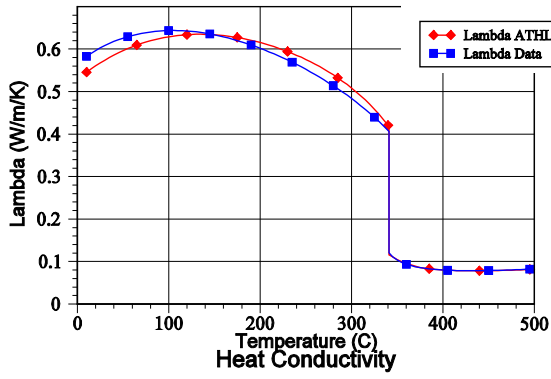
### Heavy Water Props. 100 bar



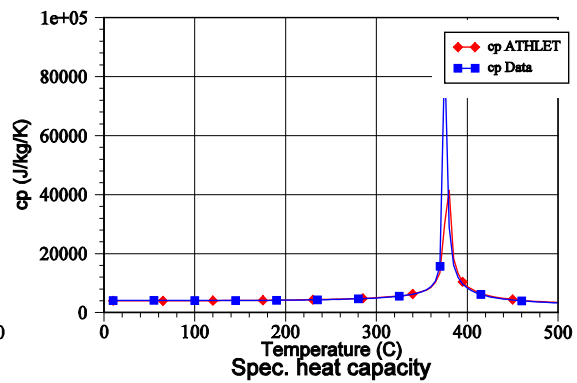
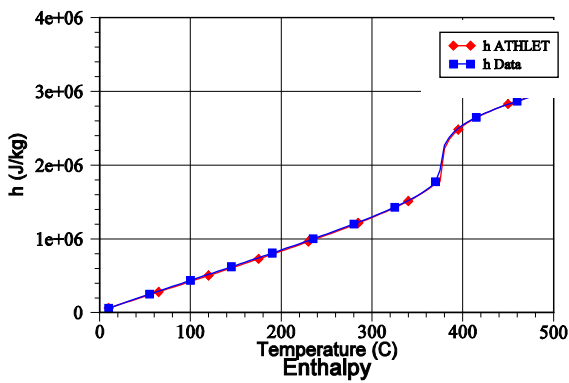
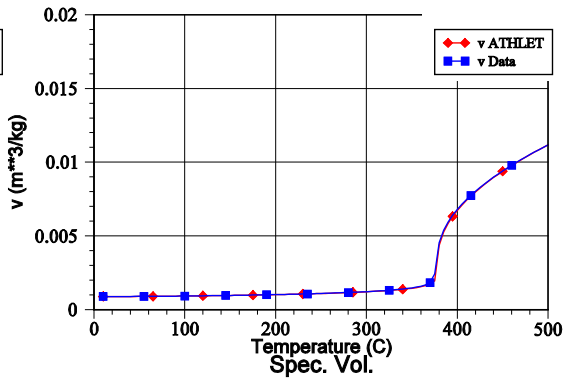
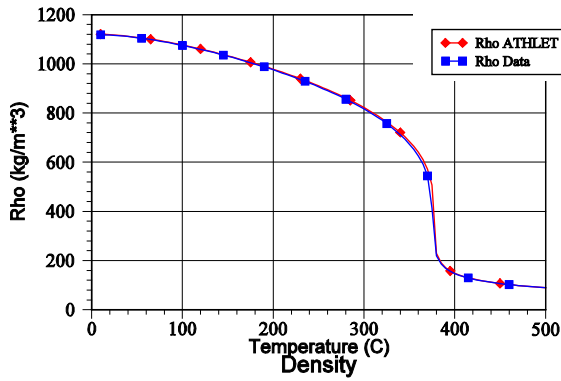
### Heavy Water Props. 150 bar



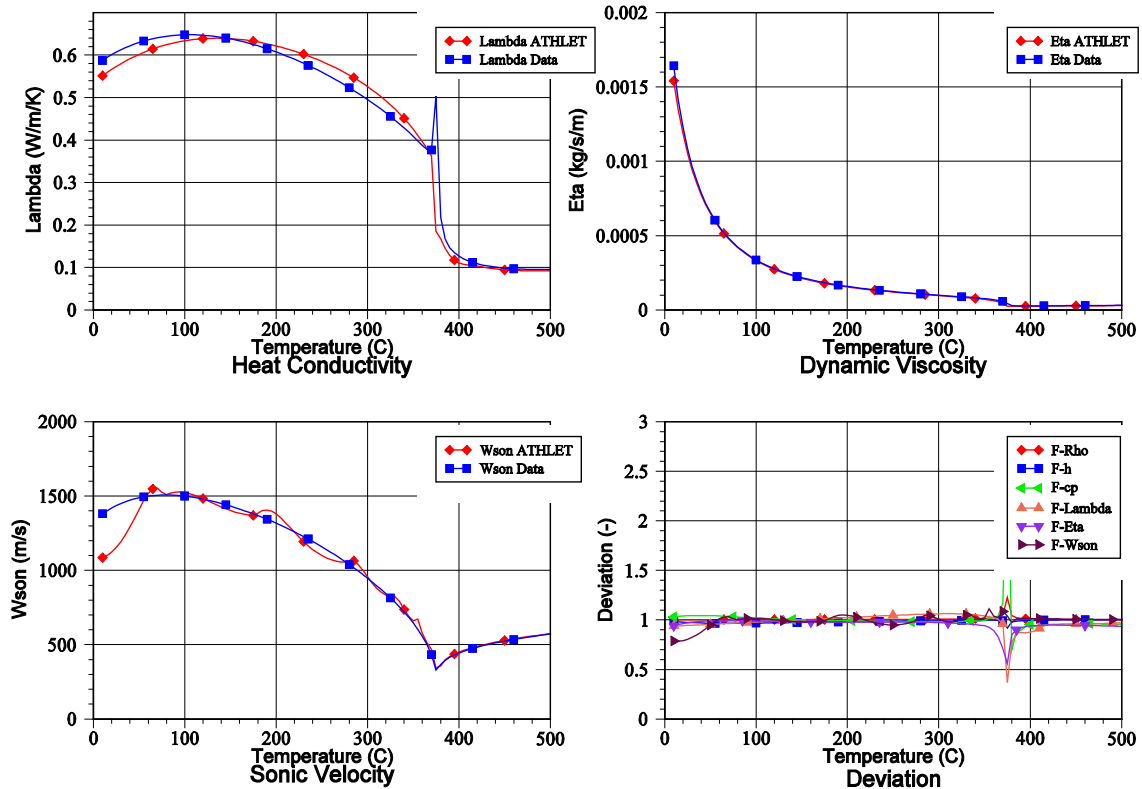
### Heavy Water Props. 150 bar



### Heavy Water Props. 230 bar



### Heavy Water Props. 230 bar



### 3.4 Testrechnungen mit Schwerem Wasser als Arbeitsmedium

Zur Überprüfung der Programmerweiterungen standen weder Versuchsdaten noch Daten aus Schwerwasserreaktoren (z. B. Atucha I) zur Verfügung. Deshalb wurden für vorhandene LW-Druckwasserdatensätze für die Primärseite HW gewählt und damit Kühlmittelverluststörfälle simuliert. Der Vergleich der Rechenergebnisse von LW und HW zeigte einige generische Unterschiede auf, die vor dem Hintergrund, dass in den Datensätzen keine weiteren Anpassungen an HW vorgenommen wurden (z. B. Erhöhung der stationären Massenströme), so auch zu erwarten waren:

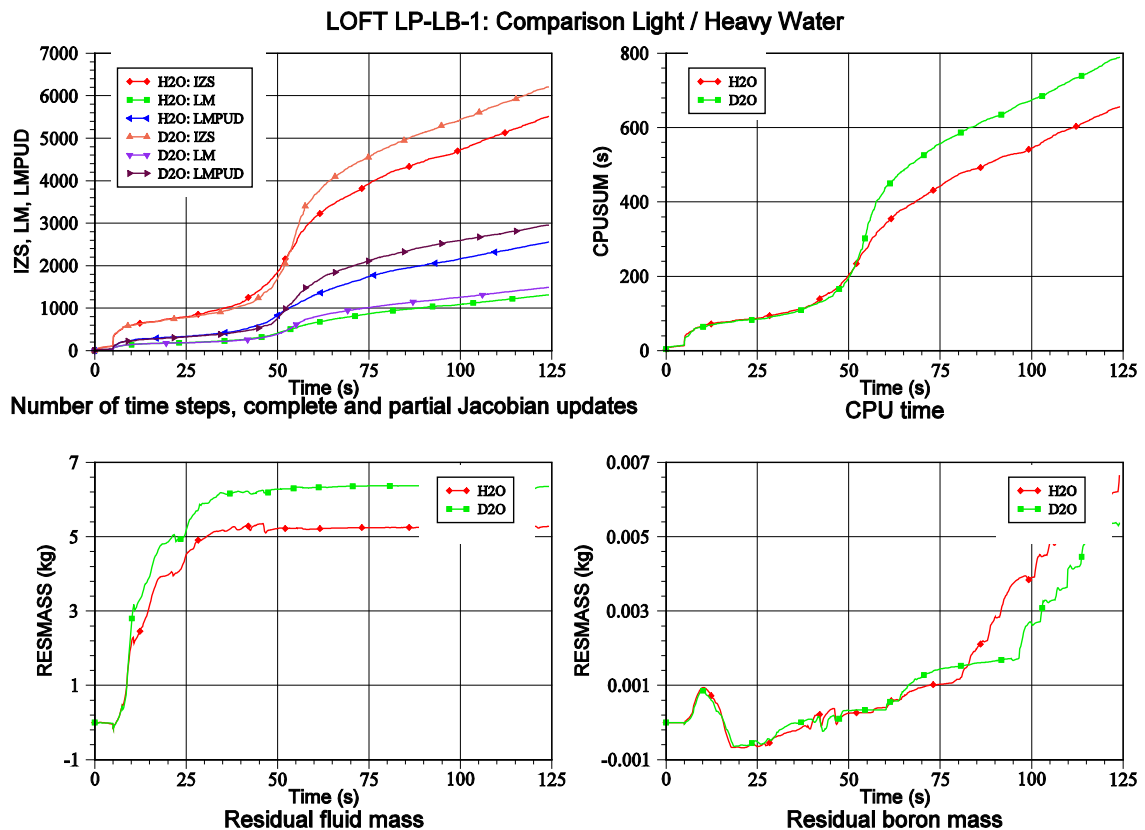
- Das Kühlmittelinventar der Primärseite erhöhte sich, ebenso die Leckrate.
- Die von der Startrechnung automatisch korrigierten Strömungsverlustkoeffizienten in geschlossenen Kreisläufen waren wegen der geringeren Strömungsgeschwindigkeit kleiner.
- Aus dem gleichen Grunde mussten die Wärmetauscherflächen der Dampferzeuger stärker nach oben korrigiert werden (schlechterer Wärmeübergang auf der Primärseite der U-Rohre).

- Auch die von der Startrechnung iterierten Drehzahlen der Hauptkühlmittelpumpen lagen wegen des geringeren Volumenstroms niedriger.

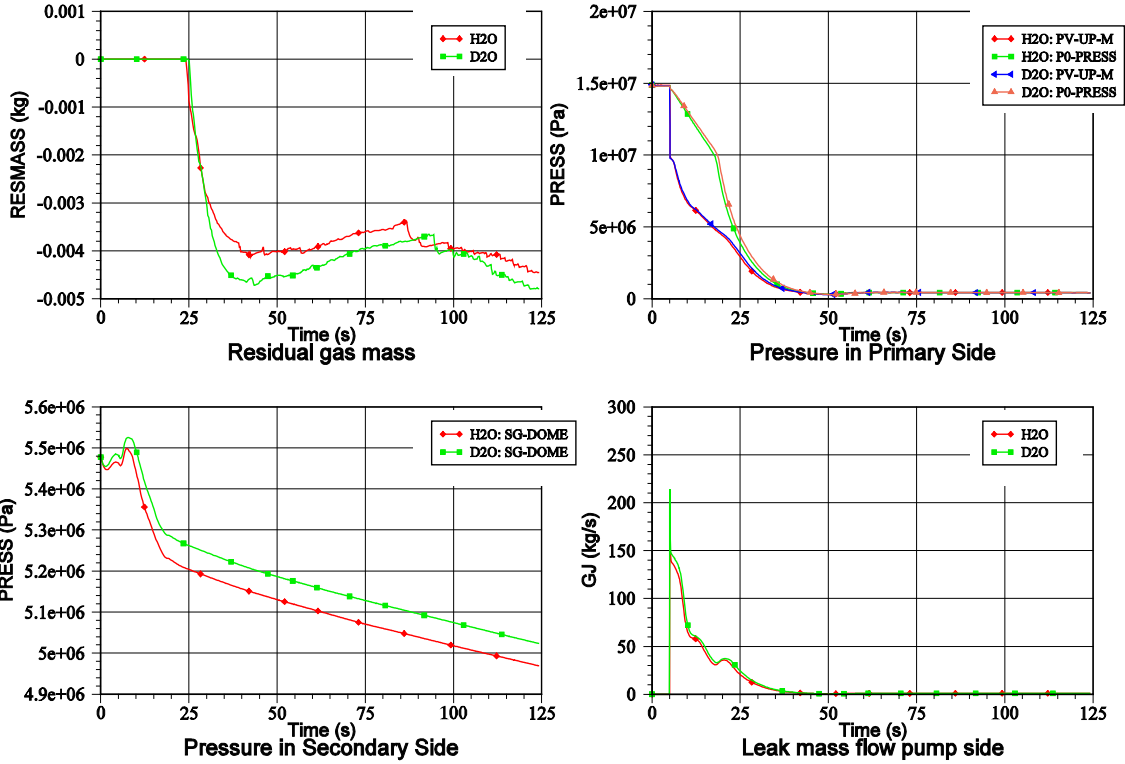
Neben dem Vergleich der physikalischen Simulationsergebnisse war auch das numerische Verhalten der Rechnungen mit HW von Interesse. Bei allen durchgeführten Rechnungen zeigte sich ein einheitlicher Trend:

- Die HW-Rechnungen waren etwas langsamer. Es waren mehr Zeitschritte, Jacobi-Matrizen und Jacobi-Teilupdates erforderlich.
- Der von ATHLET ausgewiesene Massenfehler für HW lag etwa im Verhältnis der Dichten höher als mit LW.

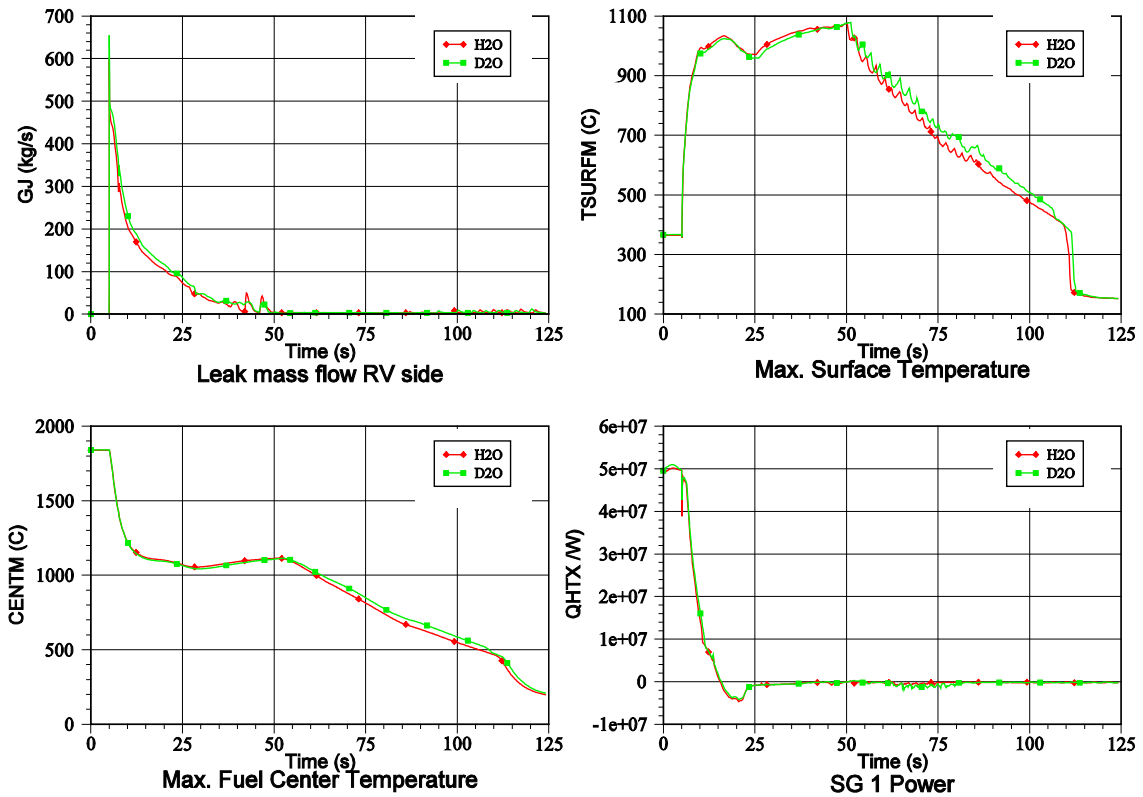
Im Großen und Ganzen waren die LW- und die HW-Ergebnisse sehr ähnlich. Die folgenden Bilder vergleichen für den LOFT-Versuch LP-LB-1 (2F-Bruch im kalten Strang) die Rechenergebnisse.



LOFT LP-LB-1: Comparison Light / Heavy Water



LOFT LP-LB-1: Comparison Light / Heavy Water



## **4 Zusammenfassung und weiteres Vorgehen**

Im Hinblick auf den geplanten Einsatz für GEN-IV Reaktoren wurde in ATHLET die Möglichkeit geschaffen, neben Leichtwasser weitere Arbeitsmedien zu simulieren. Das über Eingabedaten gewählte Arbeitsmedium wird über einen Fluidindex den ATHLET-Modellen mitgeteilt. Damit wurde eine Struktur geschaffen, die den Einbau weiterer Arbeitsmedien unterstützt und deutlich erleichtert.

Als erstes neues Arbeitsmedium wurde Schweres Wasser bereitgestellt. Die Arbeiten hierfür beschränkten sich im Wesentlichen auf die Anpassung der LW-Stoffwertprogramme an HW. Diese Erweiterung ist Voraussetzung für den Einsatz von ATHLET für den argentinischen Schwerwasserreaktor CNA-II. Da weder Versuchs- noch Reaktordaten zur Verfügung standen, wurden zur Validierung und zum Nachweis der Ablauffähigkeit Kühlmittelverluststörfälle in Druckwasserreaktoren berechnet, für die der Primärkreis mit Schwerem Wasser gefüllt war. Die Ergebnisse wiesen, wie erwartet, nur geringe Unterschiede zu LW-Rechnungen auf.

Die nächsten Entwicklungsarbeiten werden die Implementierung von Helium als Arbeitsmedium zum Thema haben. Dazu soll zunächst das Inertgasmodell um Helium erweitert und untersucht werden, ob dieser Ansatz erfolgversprechend ist. Der Vorteil dieser Methode wäre, dass das Arbeitsmedium weiterhin Wasser bliebe und damit auch Wassereinbrüche in den Heliumkreislauf simuliert werden könnten.

Als weiteres Arbeitsmedium soll Blei-Wismut (LBE) hinzugefügt werden. Bereits 2005 wurden vom Forschungszentrum Karlsruhe entsprechende Arbeiten in ATHLET durchgeführt. Die dabei erweiterten ATHLET-Programme werden an die aktuelle ATHLET-Version angepasst.

## 5 Literaturverzeichnis

- /LEM69/ E.W. Lemmon, M.O. McLinden and D.G. Friend, "Thermophysical Properties of Fluid Systems" in NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, Eds.
- /LIN99/ P.J. Linstrom and W.G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899
- /NIST1/ <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>
- /NIST2/ <http://webbook.nist.gov>



## 6 Verteiler

		Exemplare: gedruckte Form	Exemplare: pdf
<b>BMWi</b>			
Referat III B 4		1 x	
<b>GRS-PT/B</b>			
Internationale Verteilung	(FIZ)	0 x	
Projektbegleiter	(ket)	3 x	1 x
<b>GRS</b>			
Bereichsleiter	(erv, prg, paa, rot, stc, ver, zir)		je 1 x
Projektleiter	(seu)		1 x
Projektbetreuung	(wal, bna)		je 1 x
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x
Autor	(ler)	1 x	1 x
Bibliothek	(Köln)	1 x	
<b>Gesamtauflage</b>		<b>Exemplare</b>	<b>6</b>



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

Schwertnergasse 1  
**50667 Köln**  
Telefon +49 221 2068-0  
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200  
**10719 Berlin**  
Telefon +49 30 88589-0  
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4  
**38122 Braunschweig**  
Telefon +49 531 8012-0  
Telefax +49 531 8012-200

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**