

**Weiterentwicklung der
Rechenprogramme
COCOSYS und ASTEC**

Abschlussbericht

Abschlussbericht/ Final Report

Reaktorsicherheitsforschung-
Vorhabens Nr.: /
Reaktor Safety Research-Project No.:
RS1185

Vorhabensitel / Project Title:
Weiterentwicklung der
Rechenprogramme COCOSYS
und ASTEC

Further Development of the
Simulation Codes COCOSYS
and ASTEC

Autoren / Authors:

C. Spengler, J. Arndt, S. Arndt,
I. Bakalov, S. Band, J. Eckel,
W. Klein-Hessling,
H. Nowack, M. Pelzer,
N. Reinke, J. Sievers,
M. Sonnenkalb, G. Weber

Berichtszeitraum / Publication Date:
August 2012

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde lie-
gende F&E-Vorhaben wurde im
Auftrag des Bundesministeriums für
Wirtschaft und Technologie (BMWi)
unter dem Kennzeichen RS1185
durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt
dieser Veröffentlichung liegt beim
Auftragnehmer.

Kurzfassung

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

COCOSYS wird für umfassende Simulationen von Stör- und Unfallabläufen (inklusive Auslegungsstörfälle) in einem Sicherheitsbehälter (Containment) eines Leichtwasserreaktors entwickelt und validiert. Dabei sollen auch alle wesentlichen Wechselwirkungen zwischen den auftretenden verschiedenen Phänomenen berücksichtigt werden. Zielsetzung darüber hinaus ist die analytische Begleitung von Experimenten, die zu- meist auch für die Erstellung und Validierung neuer Modelle durchgeführt werden.

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

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

Modellverbesserungen zum Aerosol- und Spaltproduktverhalten in COCOSYS

In diesem Vorhaben wurde das Konzept des neuen Modells AULA entwickelt. Dieses beschreibt das Abwaschen von Aerosolpartikeln von Wand- und Bodenstrukturen im Sicherheitsbehälter (SB) in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit eines vorhandenen Kondensatfilms oder -rinnals und der Löslichkeit der Aerosole. Lösliche Aerosole und Iod können i. d. R. gut abgewaschen werden, unlösliche Aerosole tendenziell wesentlich schlechter. Die drei verfügbaren Teilmodelle („Abwaschen“ für unlösliche Aerosole, lösliche Aerosole und Iod) sollen im nächsten Entwicklungsvorhaben unter Berücksichtigung von möglichen unterschiedlichen Strömungsformen in allen drei Modellen verbessert, zusammengeführt und in COCOSYS kodiert werden. Zur Beschrei-

bung des Iodverhaltens wurde das Modell für die Ablagerung von Iod auf trockenen Stahlflächen überarbeitet sowie ein Modell für die Ablagerung von Iod auf Farbanstrichen unter nassen Bedingungen ergänzt. Weitere Erkenntnisse zu diesem Thema werden aus dem Projekt OECD-BIP2 („Behaviour of Iodine Project“) erwartet und sollen zukünftig in die Modellierung einfließen. Ferner wurde in diesem Vorhaben eine Umstrukturierung des Moduls für die Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens AFP in COCOSYS durchgeführt, mit der Zielsetzung, eine konsistente Bilanzierung von Aerosolen und Spaltprodukten einzurichten, deren Verhalten innerhalb des SB durch unterschiedliche physikalische Vorgänge bestimmt wird. Die Umsetzung der Programmkodierung entsprechend des erarbeiteten Konzeptes muss im Nachfolgevorhaben vervollständigt werden.

Modellverbesserungen für das Schmelzeverhalten im Containment in COCOSYS

Zur Simulation der Vorgänge beim Schmelzeaustrag unter hohem Druck im RDB (Direct Containment Heating – DCH) steht in COCOSYS aus vorlaufenden Entwicklungsarbeiten eine spezielle Modellerweiterung zur Verfügung. In diesem Vorhaben wurde eine Korrelation entwickelt, mithilfe derer der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in andere Bereiche des SB mit dem DCH-Modell in COCOSYS berechnet werden kann. Das Modell wurde anhand von Experimenten in der DISCO-Anlage beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) erfolgreich überprüft. Zur Interpretation der aktuellen Versuche zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung wurden in COCOSYS-MEDICIS verschiedene Modelloptionen getestet und mit internationalen Experten diskutiert. Die von der GRS aus den Experimenten ermittelten effektiven Wärmeübergangszahlen für den Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton ergeben in Nachrechnungen mit MEDICIS akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen. Die Methodik von ASTEC-ELSA für die Freisetzung von Spaltprodukten aus einem Schmelzepool wurde kürzlich von VEIKI, Ungarn, auf die Freisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung erweitert. Dieses Modell ist in diesem Vorhaben in COCOSYS-MEDICIS übernommen und getestet worden. Zur Simulation des Wärmeübergangs zwischen Schmelze und Wasser im Falle einer möglichen Flutung der Schmelze in der Reaktorgrube von oben ist ein Verdampfungsmodell, basierend auf der Siedekurve von Wasser, in MEDICIS eingebaut und getestet worden. Das Modell berücksichtigt auch das Anwachsen einer Kruste eines Schmelzepools und ist erfolgreich auf Experimente mit Flutung einer Schmelze in der Reaktorgrube von oben angewandt worden.

Modellentwicklung für ASTEC

In ASTEC ist begonnen worden, DCH-Modelle in Anlehnung an COCOSYS zu erweitern. Der Entwicklungsstand erlaubt bereits jetzt die erfolgreiche Simulation eines Experimentes zur Schmelzedispersion aus der Reaktorgrube mit einer kalten Schmelzesimulation (Wasser), durchgeführt an der Karlsruher DISCO-Anlage. Weiterhin ist das Flammenfrontmodell FRONT (H₂-Flammenfrontvorgänge) für ASTEC insbesondere im Hinblick auf Bedingungen in Reaktoranlagen weiterentwickelt worden. Eine automatische Zündung eines Wasserstoff-Gas-Gemisches ist jetzt möglich, wenn gemäß des Dreistoffdiagrammes zündfähige Gasgemische in einzelnen Raumbereichen vorliegen. Zusätzlich wurden wiederholte Verbrennungsvorgänge ermöglicht, wenn z. B. infolge anhaltender Einspeisevorgänge von Wasserstoff aus dem Reaktorkreislauf die H₂-Konzentration wieder angestiegen ist. Im Rahmen von Untersuchungen der Anwendbarkeit von ASTEC auf die frühe Phase eines Störfalls in SWR bis zum Beginn der Kernaufheizung wurden mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter erste Testrechnungen am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt. Dabei zeigte sich einerseits die prinzipielle Anwendbarkeit beider Module auch in gekoppelter Fahrweise, andererseits konnte mit Blick auf die Verzögerung bei IRSN bei der Weiterentwicklung von CESAR und ICARE insbesondere mit Blick auf die Modellierung der bei SWR typischen Kernstrukturen kein Fortschritt bei der Erweiterung und Verifikation von ASTEC auf die Kernzerstörungsphase bei SWR erzielt werden. Für eine vereinfachte Integritätsbewertung von Rohrleitungsbereichen im Falle von quasistatischen Belastungen bei Stör- und Unfallabläufen wurde die vereinfachte Methodik ASTOR (Approximated Structural Time of Rupture) weiterentwickelt. Für die vereinfachte Integritätsbewertung der Hauptkühlmittelleitung (HKL) und der Volumenausgleichsleitung (VAL) eines DWR vom Typ Konvoi wurde jeweils ein Berechnungsverfahren erstellt. Die beiden Berechnungsverfahren für HKL und VAL sollen in dem Nachfolgevorhaben an ASTEC angebunden werden. Die Vorteile des GRS-Programms ATLAS zur Visualisierung der Rechenergebnisse von Störfallberechnungen sind international anerkannt. In diesem Vorhaben wurde die Ankopplung von ATLAS an ASTEC verbessert und aktualisiert. Die Entwicklung befindet sich damit in einem Zustand, der es gestattet, die Kopplung von ATLAS an ASTEC in der nächsten Version von ASTEC auch interessierten externen Anwendern offiziell verfügbar zu machen.

Querschnittsaktivitäten

Neben den Aktivitäten in internationalen Gruppen bzw. Gremien sowie dem Aufwand für Qualitätssicherung wurde in diesem Arbeitspunkt vor allem die Verbesserung von

einzelnen Modellen in COCOSYS, die sich als Ergebnis der intensiven Anwendung als noch nicht ausreichend genau für die sichere Wiedergabe von Vorgängen im Sicherheitsbehälter herausgestellt haben, geleistet: Für eine verbesserte Simulation der Wirkungsweise von passiven autokatalytischen Rekombinatoren (PAR) wurde die Reaktionskinetik des Rekombinatormodells (für PAR der Typen AREVA und AECL) in COCOSYS von dem ursprünglichen Arrhenius- auf einen Diffusionsansatz umgestellt. Die Nachrechnungen der hierzu aus dem OECD-THAI-Vorhaben (HR-Versuchsserie) vorliegenden Versuche zeigen mit dem geänderten Rekombinatormodell in COCOSYS sehr gute Ergebnisse. Konventionelle Brände können eine ernsthafte Gefahr der Sicherheit von Reaktoranlagen darstellen. Aus diesem Grund nimmt die GRS am experimentellen Vorhaben OECD-PRISME und -PRISME2 teil. Die Erkenntnisse hieraus wurden genutzt, um das vorhandene COCOSYS-Modell zur Berechnung der Pyrolyse-Rate im Hinblick auf die Berücksichtigung von Sauerstoffarmut sowie der Rückstrahlung heißer Gasschichten in geschlossenen Räumen zu verbessern.

Abstract

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

COCOSYS is being developed and validated for the comprehensive simulation of incident, accidents (including design basis accidents) and severe accidents in light-water reactor (LWR) containments. This is also to include the consideration of all relevant interactions between the various phenomena. A further objective is the analytical evaluation of experiments used for model development and validation.

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

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

Model improvements for aerosol and fission product behaviour in COCOSYS

Within this project the concept of the new model AULA has been developed, which describes the wash-down of aerosol particles from surface structures (walls, floors) in the containment in dependency of the flow velocity of an existing condensate water film or rivulet on the surface structure and of the solubility of the aerosols. For soluble aerosols and iodine the wash-down efficiency is in general large, while a clear trend indicates that insoluble aerosols are washed-down much less efficiently. The three now available specific models for the wash-down phenomena (wash-down of insoluble aerosols, soluble aerosols and iodine) are planned to be improved, merged and coded in the follow-up COCOSYS development project under consideration of the particular flow conditions and the characteristics of the surface structure. For the improved description of the iodine behaviour the model for the deposition of iodine on dry steel surfaces has been revised and a model for the deposition of iodine on painted surfaces under wet

conditions has been supplemented. New findings related to this topic are expected from the new OECD BIP2 ("behaviour of iodine) project and shall be incorporated in future model improvements. Furthermore the AFP module for the simulation of aerosol and fission product release in COCOSYS has been re-structured with the objective to be able to obtain consistent balances of aerosols and fission products, the behaviour of which is governed by a variety of physical processes. The implementation work according to the elaborated concept for the new data structures must be finished in the follow-up COCOSYS development project.

Model improvements for the melt behaviour in the containment in COCOSYS

Based on preceding development work a dedicated model for the simulation of phenomena related with the melt release from the RPV under elevated pressure (direct containment heating – DCH) is available in COCOSYS. In this project a correlation is developed by which the dispersal and transport of corium from the reactor pit into other compartments within the containment can be calculated with the DCH model in COCOSYS. The model has been successfully tested on the basis of DISCO experiments performed at Karlsruhe Institute for Technology (KIT). For the interpretation of recent experiments on molten corium concrete interactions (MCCI) several model options in COCOSYS-MEDICIS have been tested and the results were discussed with international experts. The use of effective heat transfer coefficients between melt and concrete in MEDICIS as derived by GRS leads to acceptable agreements between MEDICIS calculations and experiments. The methodology of ASTEC-ELSA for the calculation of fission product release from a molten pool had recently been adapted by VEIKI, Hungary, to the situation of an ex-vessel MCCI pool. This model has been transferred to COCOSYS-MEDICIS and tested by GRS. For the simulation of heat transfer between corium in the reactor cavity and water in case of top flooding of such a corium pool a boiling model based on a Nukiyama diagram has been supplemented to COCOSYS-MEDICIS and tested. This model can be used in combination with the GRS options for effective heat transfer and considers the growth of a simplified crust on top of the melt in the cavity. The model has been successfully tested for experiments with top flooding of the melt.

Model development for ASTEC

The work of supplementing DCH models in ASTEC according to the methodology in COCOSYS-DCH has been started. The development progress so far enables the successful calculation with ASTEC of a melt dispersion experiment with a cold model fluid (water), performed at the DISCO facility at Karlsruhe Institute of Technology. Moreover,

the flame front model FRONT (H_2 combustion processes) in ASTEC is further developed with regard to real plant conditions. An automatic ignition of a hydrogen-gas mixture is possible in case that the mixture is ignitable based on the corresponding three-phase diagram. In addition, subsequent deflagrations are enabled for situations, where a continued injection of hydrogen from the primary circuit leads to increasing hydrogen concentrations. In the frame of testing the applicability of ASTEC for the early phase of a severe accident in BWR up to the beginning of core heat-up some first test calculations with the ASTEC modules CESAR (for the cooling circuit thermal hydraulics) and CPA (for the containment thermal hydraulics) were performed for a German BWR of the 69 series. With these test calculations the applicability of both modules in coupled mode was shown in principle, but with regard to the delay at IRSN for the further development of CESAR and ICARE (of which the latter is dedicated to the simulation of core degradation phenomena) no progress has been achieved for the extension and verification of ASTEC to the core degradation phase in BWR. For a simplified assessment of the integrity of pipe sections in case of quasi-static loads during incidents and severe accidents the simplified methodology ASTOR (Approximated Structural Time of Rupture) has been further developed. Dedicated procedures have been provided for the simplified integrity assessment of the reactor coolant line and of the surge line of a PWR of type Konvoi. Both procedures shall be coupled to ASTEC in the frame of the follow-up development project. The benefits of the GRS code ATLAS for the visualization of severe accident calculations are internationally well-known. In this project the coupling of ATLAS to ASTEC has been improved and updated. The status of the development has thus achieved a level which allows an official provision of this coupling to external users in the next ASTEC version.

Cross section activities

Besides the activities in international groups and boards and the efforts for quality assurance this working package comprehends also necessary model improvements for phenomena, for which the available models in COCOSYS were identified as not sufficient during the intensive validation/application work performed with COCOSYS: For an improved simulation of the efficiency of passive autocatalytic recombiners (PAR) the reaction kinetics in the available PAR models in COCOSYS of type AREVA and AECL were switched from an Arrhenius approach to an approach based on mass diffusion. The calculations of available experiments from the HR test series within the frame of the OECD THAI project show good results if using the modified PAR models. Fires can be a severe hazard to the entire safety of a nuclear power plant. For this reason GRS takes part in the OECD PRISME and PRISME2 projects. The scientific findings from

these projects were used for improving the COCOSYS model for the pyrolysis rate with respect to oxygen starvation and radiation feedback from heated gas layers in closed rooms.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Neuformulierung des Moduls AFP für das Aerosol und Spaltproduktverhalten in COCOSYS	5
2.1	Abwaschmodellierung für Aerosole und Iod.....	6
2.2	Iodverhalten	24
2.3	Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP.....	38
2.4	Verbesserung des pH-Wert-Modells in COCOSYS	48
3	Verbesserungen von Modellen für das Schmelzeverhalten im Sicherheitsbehälter in COCOSYS	56
3.1	DCH-Modellierung.....	58
3.2	Verbesserung MEDICIS.....	77
3.3	Kopplung MCCI in Unfallabläufen	105
4	Modellentwicklung für ASTEC	107
4.1	Modelle für SWR	109
4.2	Kopplung von ASTEC an ATLAS zur Visualisierung von Ergebnissen...	126
4.3	Erweiterung der H ₂ -Verbrennungsmodelle.....	129
4.4	Ex-Vessel-Schmelzeverhalten	134
4.5	Methode zur Integritätsbewertung von Rohrleitungen	143
4.6	Übergang von der Version ASTEC V1 nach V2.....	152
4.7	Änderungen COCOSYS <-> ASTEC-CPA.....	154
4.8	Unterstützung interner und externer ASTEC-Nutzer.....	155
5	Querschnittsaktivitäten	159
5.1	Rückwirkungen aus der Validierung.....	159
5.2	Begleitung der CoPool-Entwicklung	200
5.3	SARNET/ISTC	202
5.4	OECD	214
5.5	Herausgabe einer neuen COCOSYS Version	215

5.6	Qualitätssicherung	216
6	Zusammenfassung	223
6.1	Arbeiten zu COCOSYS	223
6.2	Arbeiten zu ASTEC	228
7	Literatur.....	232
8	Verteiler	249

Abbildungen

Abb. 2-1	Struktur von COCOSYS	5
Abb. 2-2	Rinnsale auf geneigten Stahl- (links) und Farbflächen (rechts), aus /GUP 09/. Die Flächen sind mit hygroskopischem CsI beladen. Jeder Sektor ist etwa 120 cm lang und in der Mitte ca. 30 cm breit	7
Abb. 2-3	Die auf ein abgelagertes Partikel im Wasserstrom wirkenden Kräfte (F_A Auftrieb, F_S hydraulische Kraft, F_G Schwerkraft, F_R Reibungskraft und F_K Kohäsionskraft).....	9
Abb. 2-4	Shields-Parameter als Funktion des Partikeldurchmessers; Näherung nach Rouse-Guo	10
Abb. 2-5	Illustration des bisherigen Abwaschmodells in AIM-3	15
Abb. 2-6	Aufbau von THAI-Iod-21	16
Abb. 2-7	Abgelagertes Iod auf der Farboberfläche in THAI-Iod-21 (schwarz: Experiment; farbig: COCOSYS-Rechnungen)	17
Abb. 2-8	$I_2(g)$ -Konzentration im Experiment THAI-Iod-21 (schwarz: Experiment; farbig: COCOSYS-Rechnungen)	17
Abb. 2-9	Schematische Darstellung des Filmmodells	18
Abb. 2-10	Zusätzlicher Iodeintrag in den Wasserfilm bei Kondensation in Abhängigkeit von der Stefan-Geschwindigkeit.....	20
Abb. 2-11	$I_2(g)$ -Konzentration in THAI-Iod-21	23
Abb. 2-12	Konzentration abgelagerten Iods auf der Farboberfläche in THAI-Iod-21	23
Abb. 2-13	Ursprüngliches zweistufiges Iod-Stahl-Modell in AIM-3 /WEB 09/	24
Abb. 2-14	Feuchteabhängigkeit der Chemisorptionsrate $k(74)$	25
Abb. 2-15	Gemessene Iod-Ablagerung auf THAI-Stahl-Coupons im OECD-BIP-Test G-1 /GLO 09/.....	26
Abb. 2-16	Erweitertes Iod-Stahl-Reaktionsschema nach /WRE 01/	27
Abb. 2-17	Erweitertes Iod-Stahl-Modell in AIM-3.....	27
Abb. 2-18	AIM-3 Simulation der OECD-BIP G1 Tests.....	29

Abb. 2-19	OECD-BIP-Test G-13: Wiederholungstest von G-1 mit THAI-Stahl-Coupon /GLO 11/	30
Abb. 2-20	I ₂ (g)-Konzentration in THAI-Iod-18 mit den verschiedenen Iod-Stahl-Modell-Modifikationen.	31
Abb. 2-21	I ₂ (g)-Konzentration in THAI-Iod-20	32
Abb. 2-22	Aufnahme einer SnO ₂ -Partikel aus /FUN 11/	35
Abb. 2-23	Berechnete I ₂ -Konzentrationen im Gas und am luftgetragenen Aerosol	37
Abb. 2-24	Baumstruktur für die Spezies im Hauptmodul AFP	40
Abb. 2-25	Realisierte Datenstruktur zur Darstellung des Baums.....	42
Abb. 2-26	Auszug aus der Routine „tr_objects“ zur Berechnung der Massenströme.....	43
Abb. 2-27	Struktur und Verknüpfung der Objekte im AFP-Hauptmodul	45
Abb. 2-28	Nodalisation des einfachen Testbeispiels	47
Abb. 2-29	Exemplarische Ergebnisse der Testrechnung.....	48
Abb. 2-30	pH-Verlauf im Basisfall für T = 100 °C	53
Abb. 2-31	Stoffmenge der bei der Radiolyse beteiligten Substanzen. Kleines Diagramm: Zeitlicher Verlauf des von COCOSYS berechneten pH-Wertes für das PHEBUS FPT-1 Experiment.....	55
Abb. 3-1	Schematische Darstellung möglicher Abströmungswege für das Gas-/Schmelzegemisch bei einem Blowdown nach RDB-Versagen in einer Konvoi-Reaktoranlage *)	58
Abb. 3-2	Schematische Darstellung der simulierten Phänomene bezüglich des Transports von Gas und Schmelze in einer Reaktorgrube; Annahme: zentrales RDB-Versagen am tiefsten Punkt.....	60
Abb. 3-3	Der integrale Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in den DISCO-Versuchen D04, D05, D06, D07, D08, D11 korreliert mit dem Integral über der quadrierten Gasgeschwindigkeit.....	64
Abb. 3-4	Überprüfung der mit COCOSYS berechneten Gasströmungsgeschwindigkeiten im Ringspalt zwischen RDB und Grubenwand im Vergleich zum „trockenen“ Blowdown-Experiment DISCO-L05 (ohne Schmelzesimulation)	66

Abb. 3-5	Zeitabhängig berechnete Drücke in RDB (RPV), Containment und Reaktorgrube (Cavity) im Vergleich zum Experiment H02 für den EPR.....	67
Abb. 3-6	Anwendung des DCH-Modells auf DISCO-Experimente für die Konvoi-Geometrie (RDB-Druck beim Versagen: 10...26 bar). KH03-KH07 sind „blind“ berechnet worden.....	68
Abb. 3-7	Größenvergleich der beiden Versuchsstände G (links) und GL (rechts) (aus /MEY 11b/)	70
Abb. 3-8	Linke Seite: Wasserstoff-Flamme am Ausgang der Rohrleitungen in den G-Versuchen (Bildquelle: KIT Karlsruhe). Rechte Seite: Phänomenologie der Wasserstoffverbrennung unter DCH-Bedingungen (aus /PIL 96/)	71
Abb. 3-9	Drücke im Versuchsbehälter für die prototypischen Experimente aus der Versuchsserie DISCO-G und Vergleich mit COCOSYS.	73
Abb. 3-10	Drücke im Versuchsbehälter für die Experimente der Versuchsserie DISCO-GL und Vergleich mit COCOSYS-Rechnungen.....	74
Abb. 3-11	Schnittbild durch die CCI-Versuchsanlage (Seitenansicht) /FAR 04/.....	79
Abb. 3-12	Zusammenbau der Betonkomponenten (Seitenwände und Boden, in Folie verpackt) und Elektrodenbänke vor dem Hinzufügen der inerten Seitenwände (aus MgO) hinter den Elektrodenbänken für die CCI-Versuche /FAR 06/	79
Abb. 3-13	Unterschiedliche maximale Erosionsfortschritte in den Boden (Rauten: „Basemat“) und Seitenwände (Quadrate, Dreiecke: „Sidewall“) im Versuch OECD-CCI-3, aus /FAR 05/	81
Abb. 3-14	Auswertung der effektiven Wärmeübergänge zwischen homogener oxidischer Schmelze und Beton	83
Abb. 3-15	Schnitt durch den Versuchstiegel nach Ende des Experimentes COMET-L2 und Projektion der geometrischen Größen der Versuchsapparatur /SDO 06/	90
Abb. 3-16	Auswertung der effektiven Wärmeübergänge zwischen metallischer Schmelze und Beton – Vergleich COMET-Experimente mit anderen Experimenten	91
Abb. 3-17	Schnittbild durch den AREVA-Tiegel /HEL 11/.....	92

Abb. 3-18	Tiegelquerschnitte durch die AREVA-Versuche 5 (links, mit hoher Erosionsgeschwindigkeit und gleichmäßigem Erosionsprofil) und 8 (rechts, mit niedriger Erosionsgeschwindigkeit und lokaler Erosion), aus /HEL 11/	93
Abb. 3-19	Erweiterung von MEDICIS durch die GRS für den Wärmeübergang zwischen Schmelze und Wasser unter Umgehung des detaillierten Krustenmodells („upper crust“).	96
Abb. 3-20	Annahmen für das Modell zum Wärmeübergang Schmelze/Wasser inklusive Krustenbildung und Sieden	97
Abb. 3-21	Ergebnisse für die Nachrechnung von MACE-M3b unter Verwendung des vereinfachten Modells und einem Wärmeübergangskoeffizienten nach oben von $h_{top} = 200 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$	99
Abb. 3-22	Vorschlag für die Verwendung von effektiven Wärmeübergangskoeffizienten für die Beschreibung von 2D-MCCI-Phänomenen in Versuchen mit der Modelloption der GRS in MEDICIS	99
Abb. 3-23	Modellskizze für die Ex-Vessel-Freisetzung von Spaltprodukten.....	102
Abb. 3-24	Berechnung der frei gesetzten Massenanteile (bezogen auf das Anfangsinventar) für den Versuch ACE-L6.	103
Abb. 3-25	MEDICIS-Ergebnisse für die integralen frei gesetzten Massenanteile von Spaltprodukten, bezogen auf das Anfangsinventar, für den Versuch ACE-L6	104
Abb. 4-1	Struktur von ASTEC V2	108
Abb. 4-2	CESAR-Nodalisierungsschema für einen SWR-Reaktorkreislauf.....	111
Abb. 4-3	Druckverlauf in RDB (DOM) und Frischdampfleitung (MSL), Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD.....	113
Abb. 4-4	Hüllrohroberflächentemperaturen im oberen und unteren Kernbereich, Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD	115
Abb. 4-5	Dampfanteil in den oberen und unteren Kernbereichen, Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD.....	117
Abb. 4-6	Nodalisierungsschema eines deutschen SWR 69	118

Abb. 4-7	Strömungspfad der diversitären Druckentlastungsventile zur Kondensationskammer	119
Abb. 4-8	Massenstrom über Druckentlastungsventile in die KoKa, ASTEC Rechnung mit CPA.....	120
Abb. 4-9	Druck in ausgewählten Zonen des Containments (KoKa – K01 und Druckkammer), ASTEC Rechnung mit CPA	121
Abb. 4-10	Temperatur in der Zone PSS_TOP des Druckbegrenzungssystems, ASTEC Rechnung mit CPA.....	122
Abb. 4-11	Temperaturen in verschiedenen Zonen des Containments, ASTEC Rechnung mit CPA.....	122
Abb. 4-12	Vergleich des Dekontaminationsfaktors für den Versuch PA-20 zwischen COCOSYS, ASTECv20r1 und ASTECv20r2.....	125
Abb. 4-13	Skizze des Modellsystems	131
Abb. 4-14	Temperaturcharakteristik des Modellsystems	131
Abb. 4-15	Flammenfrontposition in den Verbindungen des Modellsystems	132
Abb. 4-16	THAI Anlage und genutzte Nodalisierung für ASTEC /LUT 09/	133
Abb. 4-17	Vergleich mit dem THAI-HD-22 Experiment.....	133
Abb. 4-18	Druckverlauf im Testbeispiel. Symbole: ASTEC; Linien: COCOSYS.....	136
Abb. 4-19	Verlauf der Schmelzemasse (susp: luftgetragen; dep: abgelagert) in beiden Zonen	136
Abb. 4-20	Druckverlauf im RDB für das Experiment D06	137
Abb. 4-21	Verlauf der Schmelzemasse außerhalb der Reaktorgrube für die Nachrechnung zu D06. Zum Vergleich: Im Experiment wurde ein Anteil von $f_{d, \text{exp}} = 66 \% \approx 2,2 \text{ kg}$ am Ende in abgelagerter Form ("trapped") vorgefunden.	138
Abb. 4-22	Analytische Weg-Zeit-Funktionen und Bestimmung von Anknüpfungspunkten für die stückweise Kombination der Näherungslösung am Beispiel des Experimentes ECOKATS-V1 (Dreiecke: experimentelle Daten).....	141
Abb. 4-23	Berechnung der Krustendicke im Vergleich zum Experiment ECOKATS-V1	142

Abb. 4-24	Datenfluss der Methode ASTOR.....	145
Abb. 4-25	Transiente Lasten auf eine Rohrleitung	145
Abb. 4-26	Versagenszeitfläche und lineare Schadensakkumulationshypothese (ASTOR)	146
Abb. 4-27	Versagensfläche einer HKL (20 MnMoNi 55).....	147
Abb. 4-28	Versagensfläche einer VAL (X10 CrNiNb 18.9).....	148
Abb. 4-29	Vergleich der Versagenszeiten (Test vs. Simulation).....	149
Abb. 4-30	Temperaturverlauf in der HKL und VAL	150
Abb. 4-31	Druckverlauf in der HKL und VAL	150
Abb. 4-32	Schadensakkumulation und Versagensgrenzen.....	151
Abb. 5-1	Schematische Darstellung eines Brandraumes	161
Abb. 5-2	Gemessene Gleichgewichts-Pyrolyseraten in den OECD PRISME Experimenten (normalisiert mit der Pyrolyserate unter freiem Himmel) in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration in der Kaltgasschicht (zwei Messpunkte pro Versuch).....	162
Abb. 5-3	Wärmestrahlung von Layer k auf die Brandgutoberfläche	163
Abb. 5-4	Berechnung der mittleren Strahlungslänge mit Annahme einer Gleichverteilung auf beiden Flächen.....	164
Abb. 5-5	DIVA-Anlage in Cadarache (links) /AUD 09/.....	167
Abb. 5-6	Ventilationskonfiguration von Versuch PRISME-INTEGRAL D4 (rechts) /PRE 10/.....	167
Abb. 5-7	Pyrolyserate in INTEGRAL-D4 in Abhängigkeit von der Zeit	168
Abb. 5-8	Sauerstoffkonzentration in der Kaltgasschicht in Abhängigkeit der Zeit	169
Abb. 5-9	Temperaturen in der Heißgasschicht (3,4 m) in Abhängigkeit der Zeit...	169
Abb. 5-10	Zwei Rechnungen mit unterschiedlicher Rußkonzentration	170
Abb. 5-11	Pyrolyseraten für die zwei Rußkonzentrationen aus Abb. 5-10	170
Abb. 5-12	Rekombinationsrate THAI HR-2, Vergleich mit altem Reko-Modell der GRS (model_BXR) und der Gleichung von AREVA (corr_BXR)	172

Abb. 5-13	Rekombinationsrate THAI HR-2, Vergleich mit neuem Reko-Modell der GRS (COCOSYS) und der Gleichung von AREVA (AREVA correlation)	173
Abb. 5-14	Rekombinationsrate Gx-4, Vergleich mit altem (COCOSYS old) und neuem Reko-Modell der GRS (COCOSYS) und der Gleichung von AREVA (AREVA correlation).....	173
Abb. 5-15	Abweichung – Reko-Detailmodell – AREVA-Korrelation - für FR-380half und FR-1500T	175
Abb. 5-16	Rekombinationsrate im OECD-THAI-Versuch HR-22	177
Abb. 5-17	Blasen- und Aerosolbildungsmechanismen in Flüssigkeitsvorlagen (nicht maßstäblich).....	180
Abb. 5-18	Aerosolkonzentration in verschiedenen Raumbereichen	182
Abb. 5-19	Atmosphärenentrainment durch einen Sprühstrahl /FIS 02/	184
Abb. 5-20	MISTRA MASP1, Testrechnungen ohne und mit FANs.....	187
Abb. 5-21	Verschiedene Definitionen der Entrainmentbewegung in der Literatur /RIS 12/	188
Abb. 5-22	Testdatensatz zum Atmosphärenentrainment.....	189
Abb. 5-23	Testrechnung Atmosphärenentrainment, Atmosphärenmassenströme	190
Abb. 5-24	Partikel-Fallgeschwindigkeit in ruhender Umgebung	191
Abb. 5-25	Darstellung der Blase mit Radius r_{ex} während der „Pool-Swell“ Phase	193
Abb. 5-26	Schematische Darstellung der Wasseraufwurfversuche mit der benutzten COCOSYS-Nodalisierung	194
Abb. 5-27	Radiale Messungen der Druckaufnehmer in einem Versuch mit 2 m Eintauchtiefe und 4 bar Überdruck.....	195
Abb. 5-28	Vergleich Druckentwicklung COCOSYS – Experiment.....	196
Abb. 5-29	Konzept zur Berechnung der Wärmeleitung entlang von Strukturen	198
Abb. 5-30	Temperaturen in den Zonen R1 und R2 sowie Oberflächentemperatur der Platten.....	199
Abb. 5-31	Wärmeströme an der Oberfläche und zwischen den Platten.....	199

Abb. 5-32	Vergleich der Rechenergebnisse anhand von THAI-TH23	200
Abb. 5-33	Berechnete Temperaturverteilung nach ca. 1800 s, CoPool- Testanalyse.....	202
Abb. 5-34	DE-Füllstand bei ASTEC (blau) und MELCOR (rot).....	207
Abb. 5-35	Druck im Primär- und Sekundärkreislauf bei ASTEC (blau) und MELCOR (rot)	208
Abb. 5-36	Wasser- und Dampf-Massenströme über die Druckhalter Sicherheits- und Regelventile für ASTEC (blau) und MELCOR (rot).	209
Abb. 5-37	Massenströme der Hochdruck- (HPI) und Niederdruck- (LPI) Sicherheitseinspeisung, für ASTEC und MELCOR.....	209
Abb. 5-38	Integral sowie durch Zr und Fe-Oxidation freigesetzte H ₂ -Masse	210
Abb. 5-39	Drücke (links) und Temperaturen (rechts) im Bruchraum der WWER- 1000-Anlage.....	220
Abb. 5-40	RBMK-1000: Vergleich der berechneten Sumpftemperatur im linken Druckabbausystem	221
Abb. 5-41	RBMK-1000: Vergleich der Aerosolmassen in der Atmosphäre des Druckabbausystems.....	221
Abb. 5-42	HDR E11.1: H ₂ /He-Konzentration in verschiedenen Zonen.....	222

Tabellen

Tab. 2-1	Mit AULA berechnete Strömungsgeschwindigkeiten am Behälterboden im Versuch AW-2.....	14
Tab. 2-2	Reaktionskonstanten für das Iod-Stahl-Modell in AIM-3	30
Tab. 2-3	Aus den THAI-Versuchen abgeleitete Reaktionsraten für das Iod-Farbe-Modell	33
Tab. 2-4	Vergleich der Voraussrechnung mit den Messergebnissen; die größten Abweichungen sind grau hinterlegt.....	38
Tab. 2-5	Im pH-Wert Modell erfasste Substanzen (Beispiel DWR).....	50
Tab. 2-6	Einspeisung in den Sumpf und berechneter pH-Wert bei T = 100 °C.....	53
Tab. 3-1	Integrale Anteile der aus der Reaktorgrube in andere Anlagenräume ausgetragenen Schmelze und maximale Drücke im Containment im Vergleich zu den DISCO-Experimenten „H“ für die EPR-Geometrie.	67
Tab. 3-2	Übersicht über die Randbedingungen der GL-Versuche /MEY 11b/ sowie die Parameter Wasserstoffabbrand und Druckmaximum im Vergleich zwischen COCOSYS-Rechnung und Experiment.....	76
Tab. 4-1	Überprüfung des Modells an Ausbreitungsexperimenten und Best-Estimate Parameter-Werte für f_{crit}	142
Tab. 4-2	Mittlere f_{crit} -Werte für die vier behandelten Versuchsserien	143
Tab. 4-3	Abmessungen und Werkstoff von HKL und VAL.....	147
Tab. 5-1	Materialeigenschaften für TPH, wie sie in COCOSYS benutzt werden ..	168
Tab. 5-2	Daten der Auslegungsrechnung.....	181
Tab. 5-3	Ereignisablauf und charakteristische Größen des Szenarios TLFW.....	206

Tab. 5-4	Von der CEG-SAM befürwortete ISTC-Projekte	212
Tab. 5-5	Rechnungen zum Regressions-Testen. Grün beschriftete Experimente sind erstmals im Bericht, gelb hinterlegte Fälle sind neu in die Testmatrix aufgenommen	217

1 Einleitung

Zum sicheren Einschluss der im Kernkraftwerk vorhandenen radioaktiven Stoffe ist ein in die Tiefe gestaffeltes Sicherheitskonzept realisiert, welches die Einhaltung der radiologischen Sicherheitsziele mit dem mehrfachen Einschluss der radioaktiven Stoffe durch Barrieren verbindet. Dies wird durch verschiedene Rückhaltefunktionen sowie gezielte Maßnahmen und Einrichtungen zum Schutz dieser Barrieren und Rückhaltefunktionen auf mehreren, gestaffelten Sicherheitsebenen /GRS 09/ unterstützt. Vor dem Hintergrund der Reaktorunfälle von Harrisburg (1979) und Tschernobyl (1986) sowie jüngst in Fukushima (2011) hat sich folgerichtig der Schwerpunkt der Forschung und Entwicklung seit ca. 2 Jahrzehnten von Auslegungsstörfällen hin zu auslegungsüberschreitenden Stör- und Unfällen (Ereignisabläufe mit Kernschmelzen) verlagert. Dabei sind der Sicherheitsbehälter als letzte und wichtigste Barriere zur Vermeidung oder Begrenzung der Freisetzung radioaktiver Stoffe in die Umgebung sowie die darin ablaufenden Vorgänge und Phänomene bei Stör- und Unfallabläufen von zentralem Interesse.

Für die Simulation dieser Vorgänge werden bei der GRS Analysewerkzeuge entwickelt, welche nicht nur in der Lage sind, wichtige Einzelphänomene realitätsnah zu beschreiben, sondern insbesondere auch ihre Wechselwirkungen untereinander und das Gesamtverhalten der Anlage.

Das Containment-Code-System (COCOSYS) wird von der GRS für die umfassende Simulation von Stör- und Unfällen in Sicherheitsbehältern bzw. generell dem Reaktorgebäude von Leichtwasserreaktoren kontinuierlich entwickelt /SPE 09, KLE 10a/. Zielsetzung ist die Simulation der wesentlichen Phänomene, Prozesse und Zustände im Sicherheitsbehälter bzw. Reaktorgebäude, die während solcher Ereignisabläufe auftreten können. Darüber hinaus sollen auch Auslegungsstörfälle simuliert werden. Ein Schwerpunkt in COCOSYS ist neben der Verwendung möglichst mechanistischer Modelle eine weitgehende Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Phänomenen, wie z. B. zwischen der Thermohydraulik, der Wasserstoffverbrennung und dem Aerosol- und Nuklidverhalten oder der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und der Thermohydraulik.

Gemeinsam mit IRSN entwickelt die GRS den Integral-Code ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) /REI 11, DOR 06, DOR 09/. Der Anteil der GRS an der gemeinsamen Entwicklung von ASTEC als integrales Analysewerkzeug für Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen bezüglich des gesamten Anlagenverhaltens von LWR ist auf die Zustände und Vorgänge im Sicherheitsbehälter sowie Erweiterungen für SWR fokussiert. Derzeit wird im Rahmen von SARNET2 und in Vorhaben der GRS die Version ASTEC V2.0 genutzt. ASTEC dient als Referenz-Programm im internationalen Netzwerk SARNET2 im 7. EU-Forschungsrahmenprogramm /ALB 08/.

Auf nationaler und internationaler Ebene wurden intensive experimentelle Untersuchungen zu einigen wichtigen Phänomenen im Zusammenhang mit schweren Unfällen in Reaktoranlagen durchgeführt. Diese Experimente waren darauf ausgerichtet, den Kenntnisstand über die beteiligten physikalischen Vorgänge zu verbessern und vorhandene Unsicherheiten zu reduzieren. Hierbei sind in erster Linie folgende Vorhaben zu nennen, die für die Vorgänge im Sicherheitsbehälter als letzte Barriere im „Defense-in-Depth“-Sicherheitskonzept moderner Reaktoranlagen von besonderer Relevanz sind:

- Das im nationalen und internationalen Rahmen geführte Versuchsprogramm in der THAI-Anlage bei Becker Technologies, Eschborn. Bei diesen Experimenten standen Experimente zur Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter (besonders auch bei Siedewasserreaktoren), zu Phänomenen des H₂-Abbaus und der Zündung durch Rekombinatoren sowie zum Iod- und Aerosolverhalten im Mittelpunkt.
- Das Ende 2010 ausgelaufene MCCI2-Vorhaben im Rahmen der OECD. Hier wurde die experimentelle Datenbasis zu dem mehrdimensionalen Erosionsverhalten von oxidischen Schmelzen in Abhängigkeit vom Betontyp der Reaktorgrube sowie zu den Mechanismen bei der Kühlung einer Kernschmelze in der Reaktorgrube durch Zufuhr von Wasser von oben/unten erweitert.
- Die bei AREVA Erlangen durchgeführten Versuche zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der Reaktorgrube. Hier standen besonders die Phänomene der Mischung und Entmischung von Oxid und Metall im Blickpunkt sowie zur Wechselwirkung zwischen Schmelze und Beton an Seiten- und Bodenwänden in einer Kaverne (2D-MCCI).
- Die im Arbeitspaket WP6 MCCI im Rahmen von SARNET2, eines Netzwerkes führender europäischer Forschungseinrichtungen, durchgeführten Untersuchungen zum Ex-Vessel-Verhalten von Kernschmelzen. Zielsetzung war bzw. ist hier, das

Verständnis des Erosionsverhaltens einer Ex-Vessel-Kernschmelze in Abhängigkeit vom Betontyp der Reaktorgrube zu verbessern (2D-Erosion, Stratifikation, Kühlbarkeit).

- Die beim Karlsruher Institut für Technologie in der DISCO-Anlage durchgeführten Versuche zum Eintrag fein fragmentierter und gasgetragener Schmelze aus dem RDB in den Sicherheitsbehälter von Konvoi-Anlagen sowie zur Wasserstoffverbrennung unter Direct Containment Heating (DCH)-Bedingungen.
- Die bei CEA in Frankreich durchgeführten MISTRA-Versuche zur druckabsenkenden Wirkung von Sprühsystemen im SB.
- Das OECD-Projekt PRISME mit Experimenten zur Auswirkung von (konventionellen) Bränden und zur Rußausbreitung in der Mehrraumversuchsanlage DIVA in Cadarache.

Mit den in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten wurde die Zielsetzung erreicht, die in all diesen Forschungsvorhaben gewonnenen Erkenntnisse in den jeweiligen Stand der Modellentwicklung von COCOSYS und ASTEC einfließen zu lassen, und damit den aktuellen Stand von COCOSYS und ASTEC entsprechend des Standes von Wissenschaft und Technik fortzuschreiben. Dies betrifft besonders den Arbeitspunkt 1 (Iod- und Aerosolverhalten, vgl. Kapitel 2) und Arbeitspunkt 2 (Ex-Vessel-Schmelzeverhalten, vgl. Kapitel 3) für die Weiterentwicklung von COCOSYS.

Entsprechend der Zielsetzung für die Weiterentwicklung des Rechenprogramms ASTEC wurden bei der GRS (z. B. in COCOSYS) verfügbare und bewährte Modelle und Methoden für ASTEC bereitgestellt bzw. nach ASTEC übertragen sowie auch ein Beitrag geleistet, ASTEC für die Anwendbarkeit auf existierende Anlagen, insbesondere SWR, zu erweitern. Dies betrifft den Arbeitspunkt 3 (Kapitel 4). Hier waren Verbesserungen bei der Simulation der Vorgänge im Primärkreis und in der Kopplung zwischen Primärkreis und Sicherheitsbehälter bei SWR nötig. Weiterhin sind Kriterien für das Versagen von Rohrleitungen bereitgestellt und Modelle für die Wasserstoffverbrennung und das Direct Containment Heating (DCH) erweitert worden. Ferner wurde in diesem Arbeitspunkt die Anbindung des Visualisierungswerkzeuges ATLAS an ASTEC weiter geführt.

Neben den drei oben genannten Schwerpunkten (Aerosol- und Iodverhalten, Ex-Vessel-Schmelzeverhalten und ASTEC) umfasst der Arbeitspunkt 4 sogenannte Quer-

schnittsaktivitäten (Kapitel 5). Neben den Aktivitäten in internationalen Gruppen bzw. Gremien wurde in diesem Arbeitspunkt vor allem die Verbesserung von einzelnen Modellen in COCOSYS geleistet, die sich als Ergebnis der intensiven Anwendung von COCOSYS – gerade auch im Rahmen der Validierung (Vorhaben RS1170/RS1195) – als noch nicht ausreichend genau für die sichere Wiedergabe von Vorgängen im Sicherheitsbehälter herausgestellt haben.

2 Neuformulierung des Moduls AFP für das Aerosol und Spaltproduktverhalten in COCOSYS

Das Containment-Code-System (COCOSYS) wird von der GRS für die umfassende Simulation von Stör- und Unfällen in Sicherheitsbehältern bzw. generell dem Reaktor- gebäude von Leichtwasserreaktoren entwickelt /SPE 09, KLE 10/ Zielsetzung ist die Simulation aller wesentlichen Phänomene, Prozesse und Zustände im Sicherheitsbe- hälter bzw. Reaktorgebäude, die während solcher Ereignisabläufe auftreten können. Abdeckend sollen auch Auslegungsstörfälle simuliert werden. Ein Schwerpunkt in COCOSYS ist neben der Verwendung möglichst mechanistischer Modelle eine weitge- hende Berücksichtigung von Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Phäno- menen, wie z. B. zwischen der Thermohydraulik, der Wasserstoffverbrennung und dem Aerosol- und Nuklidverhalten. Das Programmsystem ist in mehrere so genannte Hauptmodule aufgeteilt, die in Abb. 2-1 dargestellt sind.

Nachfolgend werden die einzelnen Arbeiten im Vorhaben beschrieben.

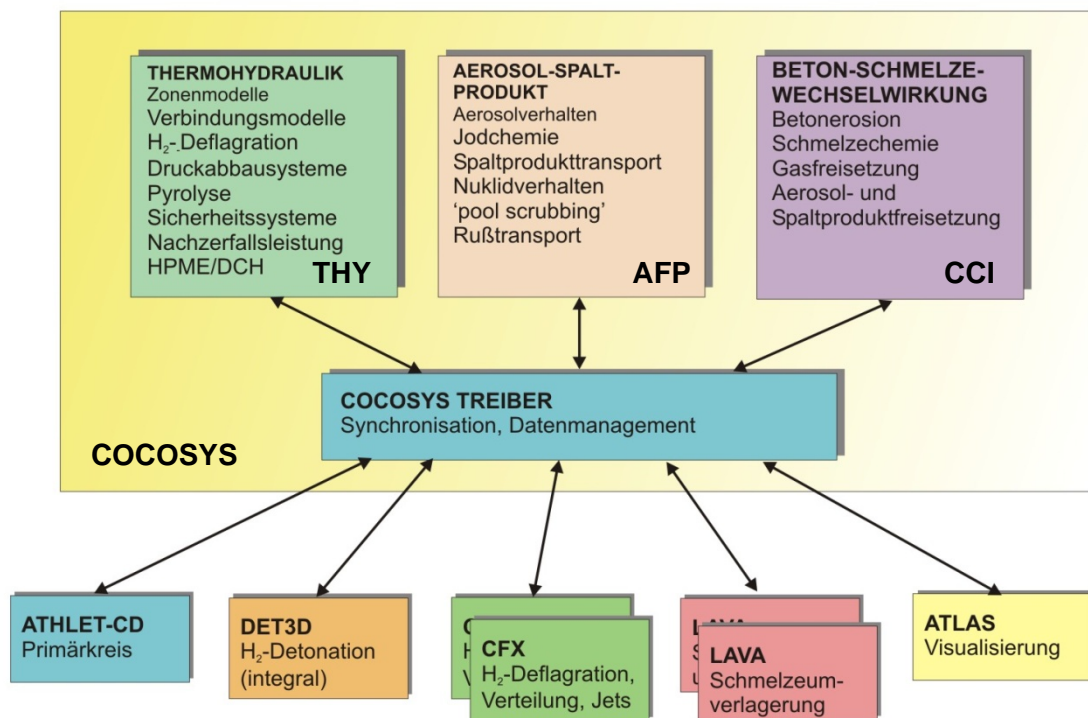


Abb. 2-1 Struktur von COCOSYS

2.1 Abwaschmodellierung für Aerosole und Iod

In einem Containment ist zwischen den Bedingungen bei bestimmungsgemäßem Betrieb und den Zuständen bei Stör- und Unfällen zu unterscheiden. Unter Stör- und Unfallbedingungen werden während eines Kernzerstörungsvorganges lösliche und unlösliche Aerosolpartikel aus dem Reaktorkreislauf in das Containment freigesetzt. Durch verschiedene Vorgänge lagern sich die Aerosole auf Strukturen (Böden, Einbauten, Wände, etc.) ab. Dominierend ist zumeist die gravitationsbedingte Ablagerung auf horizontalen Strukturen, also z. B. Böden in den Räumen. Gleichzeitig werden im Stör- und Unfallablauf große Mengen Dampf und auch nicht kondensierbare Gase ins Containment freigesetzt. Der Dampf kondensiert an kälteren Strukturen und führt zu den hier näher betrachteten Abwaschvorgängen, die für lösliche und unlösliche Aerosole sowie elementares, gasförmiges Iod unterschiedlich sind.

2.1.1 Konzeptionelle Neuformulierung des Abwaschmodells für lösliche Aerosole

Das Kernstück der konzeptionellen Neuformulierung des Abwaschmodells mit löslichen Aerosolen sollte ursprünglich die Modellierung des dynamischen Abwaschverhaltens unter Berücksichtigung des Lösungsvorganges für bereits abgelagertes (altes) und für frisch hinzukommendes (neues) Aerosol sein. Mit den beiden THAI Abwaschversuchen AW-1 (Juli 2009) /GUP 09/ mit löslichem Aerosol und AW-2 (Mai 2011) /GUP 11/ mit einem Gemisch aus löslichem und unlöslichem Aerosol stellte sich aber heraus, dass eine detaillierte Modellierung des Lösungsvorgangs nicht notwendig ist. In beiden Versuchen wurde lösliches CsI eingesetzt. Das CsI wurde dort, wo es in Kontakt mit dem Kondensat kam, nahezu vollständig abgewaschen. Nicht der Lösungsvorgang sondern der Grad der Benetzung der Ablauffläche und damit die Strömungsform des Kondensats stellte sich als relevanter Prozess heraus.

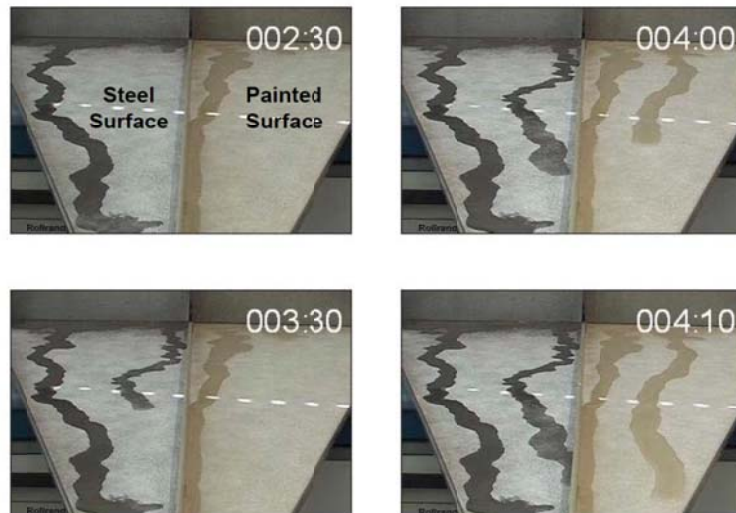


Abb. 2-2 Rinnsale auf geneigten Stahl- (links) und Farbflächen (rechts), aus /GUP 09/. Die Flächen sind mit hygroskopischem CsI beladen. Jeder Sektor ist etwa 120 cm lang und in der Mitte ca. 30 cm breit.

In beiden THAI-Abwaschversuchen wurde beobachtet, dass ein Großteil des Wandkondensats in Form von stochastisch auftretenden, schmalen **Rinnsalen** sowohl die vertikalen als auch die leicht geneigten horizontalen Farboberflächen hinabläuft. Diese ca. 5 mm breiten Rinnsale bilden sich an größeren Kondensattropfen und laufen mit erheblicher Geschwindigkeit (einige 10 cm/s) ab. Sie wurden in Laborversuchen näher untersucht (Abb. 2-2). Nur unter bestimmten Bedingungen (Vorhandensein von hygroskopischem Aerosol in größerer Menge, schwach geneigte Abflussfläche) bildet sich aus den Rinnsalen ein flächendeckender **Wasserfilm**. Dieser ist dünner (etwa 0,1 mm) und viel langsamer als die Rinnsale.

Mit COCOSYS wurde das Abwaschen der löslichen Aerosole in den beiden THAI-Versuchen korrekt nachgerechnet /HOE 10/. Im Modell nicht erfasst war die nur teilweise Bedeckung der Abflussfläche mit Kondensat (Rinnsalbildung), vor allem am Anfang des Abwaschprozesses. Dies führte in der Rechnung im Vergleich zum Experiment zu einem größeren zeitlichen Verzug bis zum Einsetzen des Kondensatablaufes von der Abflussfläche (nach deren vollständiger Bedeckung) und damit zu einem späteren Beginn des Abwaschens, das im Experiment nur im Falle von ablaufendem Kondensat detektiert wird.

Es wurde daher die ursprünglich vorgesehene Verbesserung der Beschreibung des Lösungsvorgangs für lösliche Aerosole nicht weiter verfolgt und das Schwergewicht auf

die Neumodellierung des Abwaschens unlöslicher Aerosole gelegt. Das Grundkonzept des neuen Abwaschmodells, nämlich die nicht abwaschbare Aerosolbelegung (Masse pro Flächeneinheit) für jede Elementgruppe und für jede Wand separat zu ermitteln und dann das gelöste bzw. erodierte Aerosol für den Abwaschvorgang zu aktivieren, bleibt aber aufrecht.

2.1.2 Konzeptionelle Neuformulierung des Abwaschmodells für unlösliche Aerosole

Das Abwaschen von **unlöslichen** Aerosolen kann mit COCOSYS bisher nur grob vereinfacht simuliert werden. Für alle Oberflächen, unabhängig von ihrer Orientierung (horizontal, vertikal, geneigt), wird pauschal eine einheitliche Flächenbelegung (kg pro m³ Kondensat auf der Oberfläche) definiert, die nicht abgewaschen werden kann. Weiter wird angenommen, dass die Aerosolmenge, die die vorgegebene Mindestbelegung übersteigt, instantan suspendieren und mit dem Kondensat in die darunterliegende bzw. angrenzende Zone und schließlich in den Sumpf abgewaschen wird. In diesem einfachen Modell müssen die abzuwaschende Aerosolmenge und die gebundenen Spaltprodukte vorgegeben werden.

Für COCOSYS wurde daher ein neues **Abwaschmodell** für **unlösliche Aerosole** (AULA) entwickelt /WEB 11/. Es basiert auf einem Ansatz aus der Geologie, der den Transport von Sedimenten in fließenden Gewässern beschreibt. Demzufolge beginnt die Erosion abgelagerter Partikel, wenn die Strömungsgeschwindigkeit direkt über dem Partikelbett einen kritischen Wert übersteigt (Shields-Kriterium). Dieses Kriterium gilt für einen weiten Bereich von Partikelgrößen und Strömungsgeschwindigkeiten.

Dieser Ansatz wurde ursprünglich für Wasserströmungen auf leicht geneigten Flächen entwickelt. Durch die Berücksichtigung von Adhäsions- und Kohäsionskräften, die die Partikel an vertikalen Wänden halten, kann der Ansatz auch für diese Geometrie verwendet werden. Damit lässt sich auch die Erosion von Partikeln, die auf vertikalen Flächen haften, beschreiben.

Shields-Kriterium

Die Erosion eines Partikel beginnt, wenn der Auftrieb (F_A) und die Kräfte des fließenden Wassers (F_S), die auf die Partikel wirken, größer sind, als die Kräfte, die es am Ort halten. Letztere sind die Schwerkraft (F_G), die Reibungskraft (F_R) und die Kohäsion

(F_K). Abb. 2-3 zeigt schematisch die auf ein Partikel wirkenden Kräfte in einer horizontalen Strömung. u ist die mittlere Strömungsgeschwindigkeit des Wassers. Auf einer vertikalen Wand ändert sich die Richtung von Schwerkraft und Auftrieb. Kleine Partikel ($< 50 \mu\text{m}$) werden in diesem Fall durch Adhäsionskräfte (zwischen Partikel und Wandoberfläche) und Kohäsionskräften (zwischen den Partikeln untereinander) gehalten.

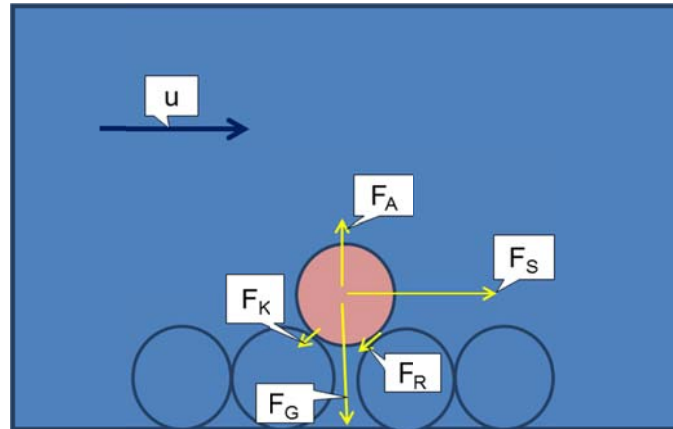


Abb. 2-3 Die auf ein abgelagertes Partikel im Wasserstrom wirkenden Kräfte (F_A Auftrieb, F_S hydraulische Kraft, F_G Schwerkraft, F_R Reibungskraft und F_K Kohäsionskraft)

Nach A. Shields ist die kritische Sohlschubspannung, bei der nicht-kohäsive Partikel mit gleicher Größe zu erodieren beginnen, eine Funktion der dimensionslosen sogenannten Reynolds Zahl der Partikel /SHI 36/. Die Sohlschubspannung ist die Strömungskraft des Wassers am Boden (Sohle) des Gerinnes, die pro Flächeneinheit auf ein Partikel wirkt. In dimensionsloser Form ist die kritische Sohlschubspannung θ_c (Shields-Parameter) durch die folgende Gleichung bestimmt:

$$\theta_c = \frac{\tau_c}{(\rho_p - \rho_w)gd_p} \quad (2-1)$$

τ_c ist die kritische Sohlschubspannung, d_p bezeichnet den Durchmesser des Partikels, g steht für die Gravitationsbeschleunigung, ρ_p für die Dichte der Partikel, ρ_w für die Dichte des Wassers und ν_w für die kinematische Viskosität des Wassers.

Sie hängt mit der Sohlschubspannungsgeschwindigkeit, das ist die Fließgeschwindigkeit des Wassers direkt über dem Partikelbett, zusammen. Mit dem Dichteverhältnis Partikel/Wasser $s = \rho_p/\rho_w$ wird die kritische Sohlschubspannungsgeschwindigkeit $u_{*,c}$

$$u_{*,c} = \sqrt{\theta_c(s-1)g d_p} \quad (2-2)$$

Die Shields-Gleichung lässt sich nur mit einigem Aufwand iterativ lösen. Eine oft verwendete, gute Näherung ist die von Rouse-Guo /GUO 02/.

$$\theta_c = \frac{0,1}{(R_*)^{2/3}} + 0,054 \left[1 - \exp\left(-\frac{(R_*)^{0,52}}{10}\right) \right] \quad (2-3)$$

mit dem dimensionslosen Parameter (Rouse-Reynolds-Zahl)

$$R_* = \frac{d_p \sqrt{0,1(s-1)g d_p}}{v_w} \quad (2-4)$$

In Abb. 2-4 ist die Näherung für kleine Partikelgrößen dargestellt.

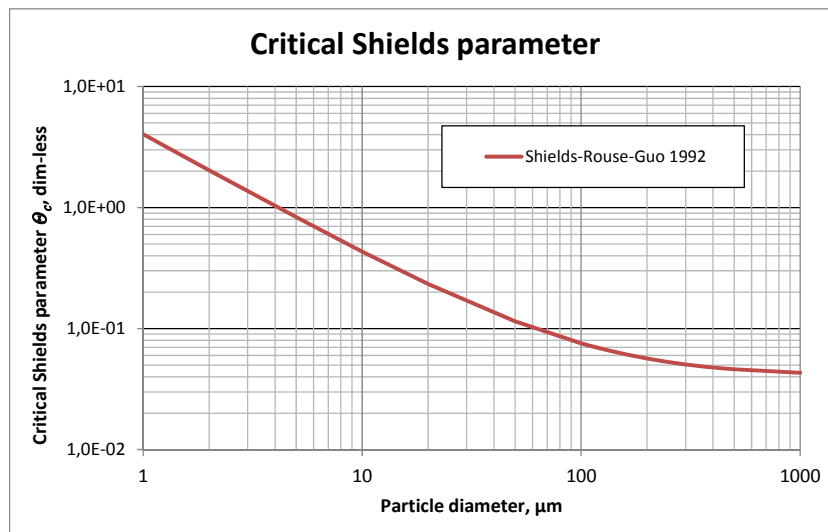


Abb. 2-4 Shields-Parameter als Funktion des Partikeldurchmessers; Näherung nach Rouse-Guo

In AULA wird das Loslösen eines Partikels aus dem Verband oder von der Oberfläche durch die Bedingung

$$u_* > u_{*,c}(d_p) \quad (\text{Partikel erodieren}) \quad (2-5)$$

gegeben. Die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit u_* ist selbst bei dünnen Wasserfilmen nur ein Bruchteil der mittleren Strömungsgeschwindigkeit. Sie muss aus der mittleren Strömungsgeschwindigkeit berechnet werden.

Kondensatströmung

Unter Störfallbedingungen läuft das Kondensat am Farbanstrich in Form von Wasserfilmen und Rinnsalen ab. Während sich an den hohen vertikalen Wänden eines Containments überwiegend Wasserfilme ausbilden, sind auf flachen Böden mit Kondensationsbeginn zuerst Rinnsale wahrscheinlich, die später in Filme übergehen können. Dies wurde im Abwaschversuch OECD-THAI AW-1 beobachtet /GUP 09/. Die **Wasserfilme** sind dünn (ca. 0,1 mm). Ihre langsame Ablaufgeschwindigkeit hängt von der Filmdicke bzw. der Kondensationsrate sowie von der Orientierung der Ablauffläche ab. Die **Rinnsale** bilden sich an Kondensattropfen und laufen schnell auf willkürlichen Wegen ab. Sie sind meist nur einige mm breit, aber deutlich dicker als Filme. Wegen ihrer höheren Fließgeschwindigkeit ist die Effektivität der Rinnsale beim Abwaschen unlöslicher Partikel erheblich höher. Allerdings wird oft nur ein Teil der Fläche von den Bahnen der Rinnsale erfasst.

In AULA werden die Strömungsgeschwindigkeiten von Wasserfilm u_F und Rinnsal nach der gleichen Formel berechnet, nur die Breite der Strömungsformen ist unterschiedlich. Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit des Wasserfilms auf einer geneigten oder vertikalen Fläche ist.

$$u_F = \frac{\delta_F^2 g \cos\beta}{3 \nu} \quad (2-6)$$

δ_F ist die Dicke des Wasserfilms, $\cos \beta$ der Neigungswinkel der Ablauffläche zur Vertikalen, g die Erdbeschleunigung und ν die kinematische Viskosität des Wassers.

Die Dicke des Wasserfilms wird anhand der Kontinuitätsbedingung direkt aus dem Kondensatmassenstrom \dot{m}_W berechnet. B_F ist die Breite des Wasserfilms.

$$\delta_F = \sqrt[3]{\frac{3 \nu \dot{m}_W}{g B_F \rho_W \cos\beta}} \quad (2-7)$$

Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit und die Dicke eines Rinnsals werden analog zum Film berechnet. Die Breite des Rinnsals B_R muss vorgegeben werden.

Teile der Aerosolschicht, die durch Adhäsion und Chemisorption (chemische Reaktionen mit dem Farbmaterial) stark an die Oberfläche gebunden sind und gar nicht abgewaschen werden können, müssen in AULA anhand von Versuchsdaten vorgegeben

werden. Chemisorption kann durch Einwirkung von radioaktiver Strahlung (Radiolyse) verstärkt werden. Dies wurde in den PHEBUS-Versuchen beim Abwaschen des sogenannten elliptischen Bodens beobachtet. Trotz heftigem Sprühen konnte nur ein Teil der Spaltprodukte abgewaschen werden /KLE 08/.

Das Shields-Kriterium gilt streng genommen nur für nicht kohäsive, monodisperse, kugelförmige Partikel aus unlöslichem Material mit einheitlicher Dichte. Bei Überschreiten des Kriteriums werden diese idealen Partikel gleichzeitig freigesetzt.

Reale Spaltproduktaerosole bestehen aus unterschiedlichen, löslichen und unlöslichen Materialien. Die Partikel sind kohäsiv, wie ihre Haftung an vertikalen Wänden zeigt. Die Partikelgrößenverteilung ist polydispers und die Partikel sind meist nicht kugelförmig. D.h., die realen Aerosole weichen erheblich von den idealisierten Partikeln, die dem Shields-Kriteriums zu Grunde liegen, ab und der Erosionsprozess dauert länger. In AULA werden diese Abweichungen durch eine Massenerosionsrate nach Ariathurai (1974, zitiert in /ESM 06/), die von der Strömungsgeschwindigkeit am Partikelbett abhängt, pauschal berücksichtigt. Die dafür notwendige Erosionskonstante $k_{E,0}$ beschreibt im Wesentlichen die Geschwindigkeit des Abwaschprozesses und muss aus Versuchsdaten (z.B. /GUP 11/) ermittelt werden. Je größer $k_{E,0}$ ist, desto mehr nähert sich der Abwaschprozess dem idealen Verlauf nach Shields an. Der Beginn der Erosion ist nach wie vor durch das Shields-Kriterium gegeben. Die Erosion dauert aber, je nach Größe der Erosionskonstante, eine bestimmte Zeit, Die Erosionsrate ist nicht konstant, sondern steigt mit der Sohlschubspannung bzw. quadratisch mit der Sohlschubspannungsgeschwindigkeit u_* an.

$$k_E = k_{E,0} \frac{(u_*^2 - u_{*,c}^2)}{u_{*,c}^2} \quad \text{für } u_* > u_{*,c}$$

(2-8)

$$k_E = 0 \quad \text{für } u_* \leq u_{*,c}$$

Die Erosionskonstante muss aus Experimenten mit reaktorrelevanten Bedingungen gewonnen werden. Dazu steht der Abwaschversuch AW-2 mit unlöslichem und löslichem Aerosol, der bei Becker Technologies gefahren wurde, zur Verfügung. Die Erosionskonstante ist die Erosionsrate bei dem $\sqrt{2}$ -fachen der kritischen Sohlschubspannungsgeschwindigkeit.

In AULA wird in jedem Zeitschritt die Erosionsrate der abgelagerten Aerosole in Abhängigkeit der mittleren Partikelgröße und der Strömungsgeschwindigkeit des ablaufenden Kondensats berechnet. Für jeden Aerosolzeitschritt wird dann die Konzentration des suspendierten unlöslichen Aerosols im ablaufenden Kondensat bestimmt und durch Integration (Routine AFEBE) die aktuelle Menge des abgelagerten unlöslichen Aerosols berechnet.

Die Zeitableitung der Konzentration des abgelagerten Aerosols $c_{Ae,dep}$ in einer Zone lautet

$$\frac{dc_{Ae,dep}}{dt} = -k_E c_{Ae,dep} + k_{sed} c_{Ae,F} \quad (2-9)$$

k_{sed} ist die Sedimentationsgeschwindigkeit der Partikel im Wasserfilm und $c_{Ae,F}$ ist die Konzentration unlöslicher Aerosole im Wasserfilm.

Die für AULA benötigten Eingabegrößen sind größtenteils bereits in anderen COCOSYS-Modulen vorhanden, wie z. B. geometrische Daten, Temperatur, Kondensations- und Drainagerate. Folgende Daten müssen vom Anwender vorgegeben werden:

- nicht abwaschbare Aerosoloberflächenkonzentration, ggf. für jede in AERIKA definierte Aerosolkomponente; aus Versuchsdaten
- das Film/Rinnsal-Massenstromverhältnis für Bodenflächen, ggf. zeitabhängig
- Rinnsalbreite, abhängig von der Orientierung der Abwaschfläche. Die Filmbreite ist durch die Wandgeometrie gegeben.
- empirische Erosionskonstante $k_{E,0}$
Ein Defaultwert für die Erosionskonstante $k_{E,0}$ soll aus dem Versuch THAI AW-2 /GUP 11/ abgeleitet werden.

AULA ist erst konzipiert aber noch nicht für COCOSYS programmiert. Daher wurde mit Daten in Anlehnung an den OECD-THAI-Abwaschversuch AW-2 zur ersten Überprüfung des Modells eine Handrechnung durchgeführt. In AW-2 wurde abgelagertes Misch aerosol aus Csl und SnO₂ von einer 2%-geneigten (quasi horizontalen) und mit einem Dekontaminationsanstrich versehenen Fläche abgewaschen. Das AULA-Rechenergebnis zeigt, dass Rinnsale am schwach geneigten Boden schnell genug sind, das abgelagerte Aerosol zu erodieren (Tab. 2-1). Die ausgedehnteren Wasserfil-

me sind dagegen zu langsam und erfüllen das Shields-Kriterium nicht. Sie können kein Aerosol abwaschen. Letzteres deckt sich mit den Messergebnissen.

Tab. 2-1 Mit AULA berechnete Strömungsgeschwindigkeiten am Behälterboden im Versuch AW-2

	Wasserfilm	Rinnsal
Mittlere Strömungsgeschwindigkeit, m/s	6,0 E-3	0,21
Sohlschubspannungsgeschwindigkeit, m/s	6,9 E-4	1,31 E-2
Kritische Sohlschubspannungsgeschwindigkeit nach Shields, m/s	9,4 E-3	
Erosion	nein	ja

Fazit

Das neue Modell AULA für COCOSYS hat das Potential, Abwaschvorgänge für unlösliche Aerosole sowie für Mischerosole von horizontalen oder vertikalen Strukturen im Sicherheitsbehälter unter Unfallbedingungen realitätsnah zu beschreiben. Vor einem Einbau in COCOSYS muss AULA aber noch weiter geprüft und gegebenenfalls an einigen Stellen verbessert werden. Dazu gehört das Auftreten von Rinnsalen und deren Übergang zu Wasserfilmen, die Berechnung der mittleren Strömungsgeschwindigkeiten von Wasserfilmen und Rinnsalen aus den in COCOSYS zur Verfügung stehenden Daten und die Überprüfung der sohlschubspannungsabhängigen Erosionsrate unter Reaktorbedingungen.

Da in AULA der Transport von Kondensat, Aerosolen und Spaltprodukten nicht nur zwischen Zonen, sondern auch zwischen einzelnen Strukturen (Wänden, Böden) modelliert werden muss, ist ein Einbau in COCOSYS generell erst nach Abschluss der Neustrukturierung des AFP-Teils (vgl. Kapitel 2.3) sinnvoll.

2.1.3 Verbesserung des Abwaschmodells für Iod

2.1.3.1 Überprüfung des vorhandenen Modells

Gasförmiges Iod $I_2(g)$ in der Atmosphäre des SB wird von allen Farboberflächen (Wände und Böden) besonders stark absorbiert. In AIM-3 wird dies durch ein zweistufiges Absorptionsmodell modelliert [WEB 09]. Kommt es nun zu Kondensation an der Ober-

fläche, kann das zuvor abgelagerte Iod abgewaschen werden. Zudem finden auch unter Kondensationsbedingungen Absorptions- und Resuspensionsvorgänge an der Wand/Oberfläche statt.

Im Unterschied zum oben beschriebenen Abwaschmodell für Aerosole spielt hier auch die Ablagerung/Absorption von Iod an vertikalen Wänden und das Abwaschen von Wänden eine wesentliche Rolle, da Wandoberflächen oft größer sind als Bodenflächen in einem Raumbereich. Das bisherige Iod-Abwaschmodell (Abb. 2-5 am Beispiel einer Wand) nimmt bei kondensierenden Randbedingungen an Farboberflächen in der Gasphase konstante Absorptions- und Resuspensionsraten an, die sich von den Raten bei trockenen Bedingungen unterscheiden (Nr. 4 und 62 in Abb. 2-5). Mit konstanter Abwaschrates (Nr. 9) wird zuvor physisorbiertes Iod abgewaschen; und ein Teil des in der Gasphase befindlichen $I_2(g)$ wird direkt in den Zonensumpf transportiert (Nr. 44). Alle Raten sind unabhängig von der Kondensationsrate modelliert.

Sammelt sich auf farbbestrichenen Bodenflächen Wasser in Folge von Kondensationsvorgängen an, so muss im derzeitigen AIM-3 die Farboberfläche und das darauf abgelagerte Iod manuell vom Nutzer aus der Gas- in die Wasserphase (den Zonensumpf) des entsprechenden Iod-Kontrollvolumens überführt werden.

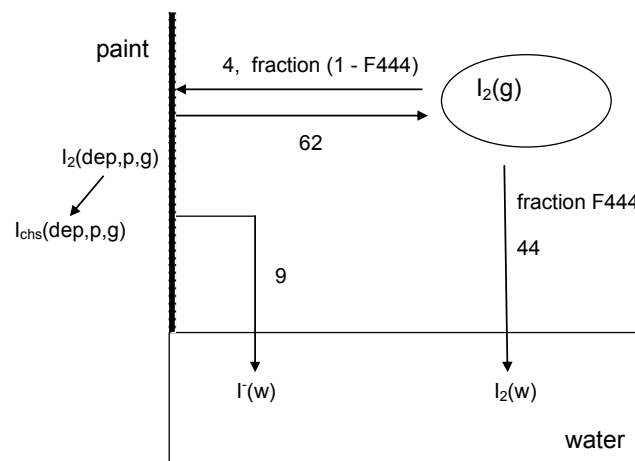


Abb. 2-5 Illustration des bisherigen Abwaschmodells in AIM-3

Das bisherige Iod-Abwaschmodell erwies sich bei der Nachrechnung des THAI-Iod-21 Versuches (siehe Abb. 2-6) als unzulänglich. In diesem Versuch wurden in der THAI-Anlage vier mit Farbe bestrichene Kühlkörper mit einer Oberfläche von insgesamt $9,1 \text{ m}^2$ eingeführt (senkrecht hängend) /LAN 09/. Nach der Einspeisung von $I_2(g)$ fand

im THAI-Behälter zunächst vier Stunden lang eine Ablagerung/Absorption von Iod auf den senkrecht hängenden Farboberflächen (und in geringerem Maße den Stahlwänden des Behälters) unter trockenen Bedingungen statt. Danach wurden die Kühlkörper gekühlt und die Dampf einspeisung erhöht, sodass Kondensation an den Farboberflächen stattfand. Das Kondensat tropfte in den Sumpf ab.

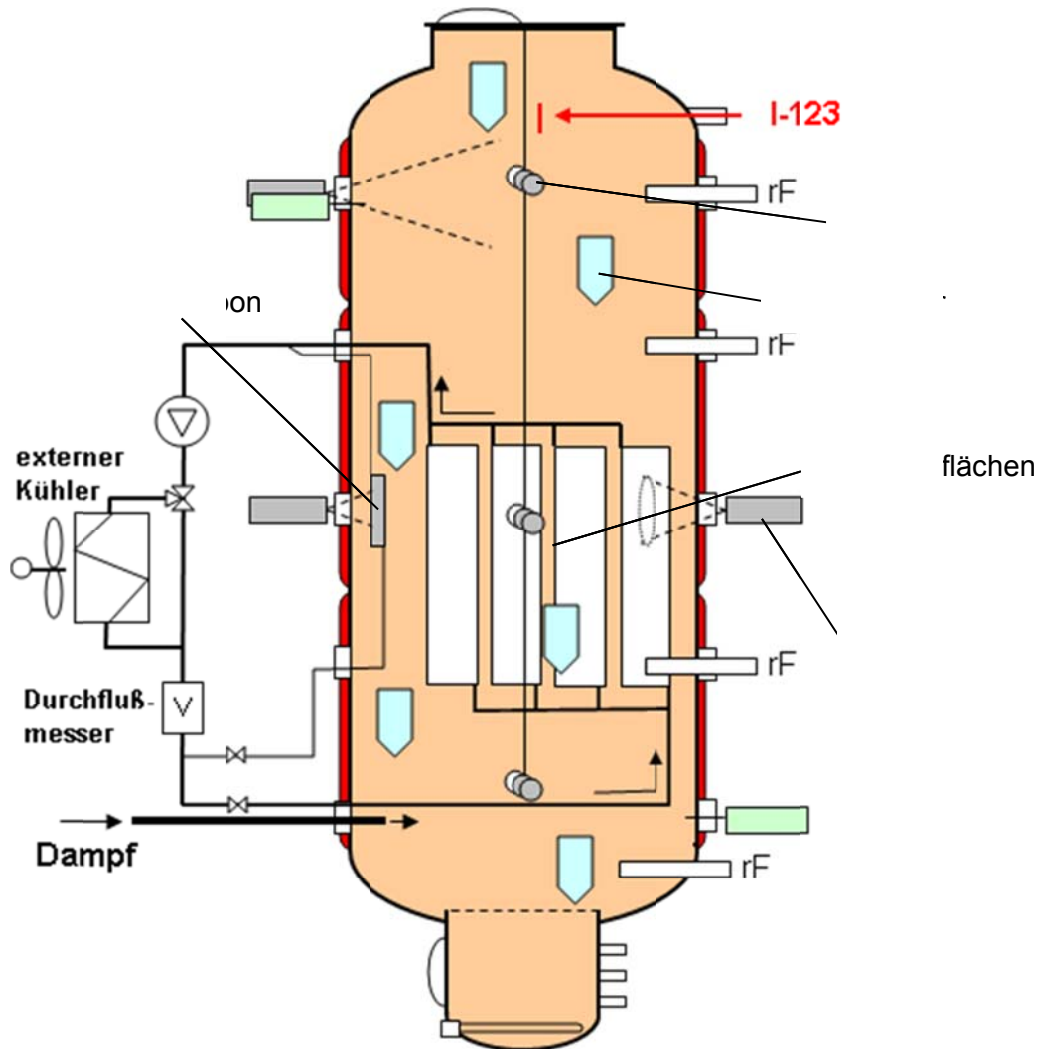


Abb. 2-6 Aufbau von THAI-Iod-21

Während der Kondensationsphase wurde keine Abnahme der Iodkonzentration auf der vertikal hängenden Farboberfläche festgestellt (Abb. 2-7). Es fand auch keine spürbare Erhöhung der $I_2(g)$ -Reduktion durch die beginnende Kondensation statt (kein „Knick“ der $I_2(g)$ -Konzentration in Abb. 2-8). Die COCOSYS-Rechnung mit dem derzeitigen Modell (grün in Abb. 2-7 und Abb. 2-8) erwies sich als unzureichend; beste Überein-

stimmung wurde erzielt, wenn sowohl Reaktion 9 als auch 44 in Abb. 2-5 „ausgeschaltet“ wurden (rot in Abb. 2-7 und Abb. 2-8)¹.

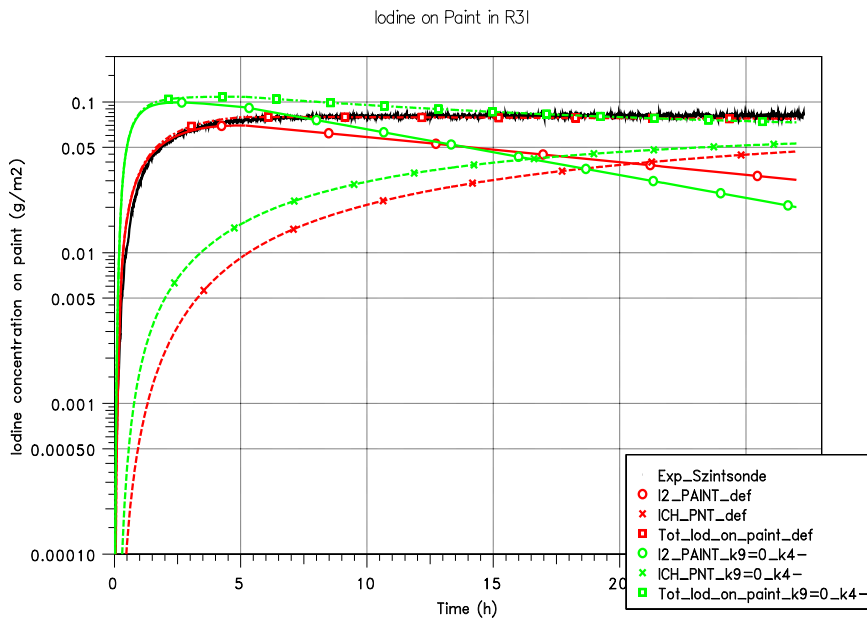


Abb. 2-7 Abgelagertes Iod auf der Farboberfläche in THAI-Iod-21 (schwarz: Experiment; farbig: COCOSYS-Rechnungen)

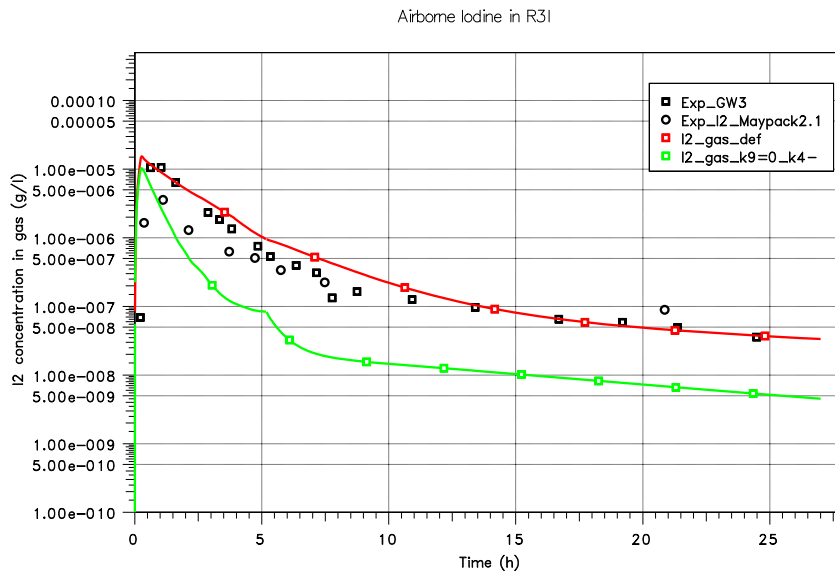


Abb. 2-8 I₂(g)-Konzentration im Experiment THAI-Iod-21 (schwarz: Experiment; farbig: COCOSYS-Rechnungen)

¹ Zudem wurde die Absorptionsrate auf trockener Farbe in den ersten 4 Stunden von $4 \cdot 10^{-3}$ m/s auf $0,9 \cdot 10^{-3}$ m/s erniedrigt. Diese Variation liegt innerhalb der Unsicherheitsbandbreite für diese Reaktion (vgl. Unsicherheitsstudie zur Iodmodellierung im Validierungsvorhaben RS1190).

Die vorgenommene Weiterentwicklung des Iod-Abwaschmodells enthält nun eine Kondensationsratenabhängigkeit, wie sie z. B. schon das bisherige Abwaschmodell an Stahloberflächen besitzt. Das neue Abwaschmodell sollte auch den Wasserfilm, der sich auf der Oberfläche bildet, beachten: In der Interpretation von Phebus-FPT1 durch Loic Bosland, IRSN, /BOS 12/ zum Beispiel spielt die Radiolyse im Wasserfilm eine Schlüsselrolle bei der Entstehung von gasförmigem $I_2(g)$.

2.1.3.2 Filmmodell

Für jede vertikale Wand in einer Zone wird ein Wasserfilm auf dieser Wand wie ein weiterer Zonensumpf behandelt. Horizontale Bodenflächen befinden sich bei Kondensationsvorgängen automatisch im Zonensumpf. Bei Kondensation auf der Wand füllt sich der „Wandsumpf“ mit Wasser auf; und je nach vom Nutzer vorgegebener bzw. über Nusseltsche Wasserhauttheorie berechnete Wasserfilmdicke rinnt das Wasser aus diesem Wandsumpf dann über vordefinierte Pfade (DRAIN_WALL oder DRAIN_BOTTOM) in angrenzende Wandsümpfe / Zonensümpfe, wenn die maximale Füllhöhe (Schichtdicke des Kondensatfilms) erreicht ist.

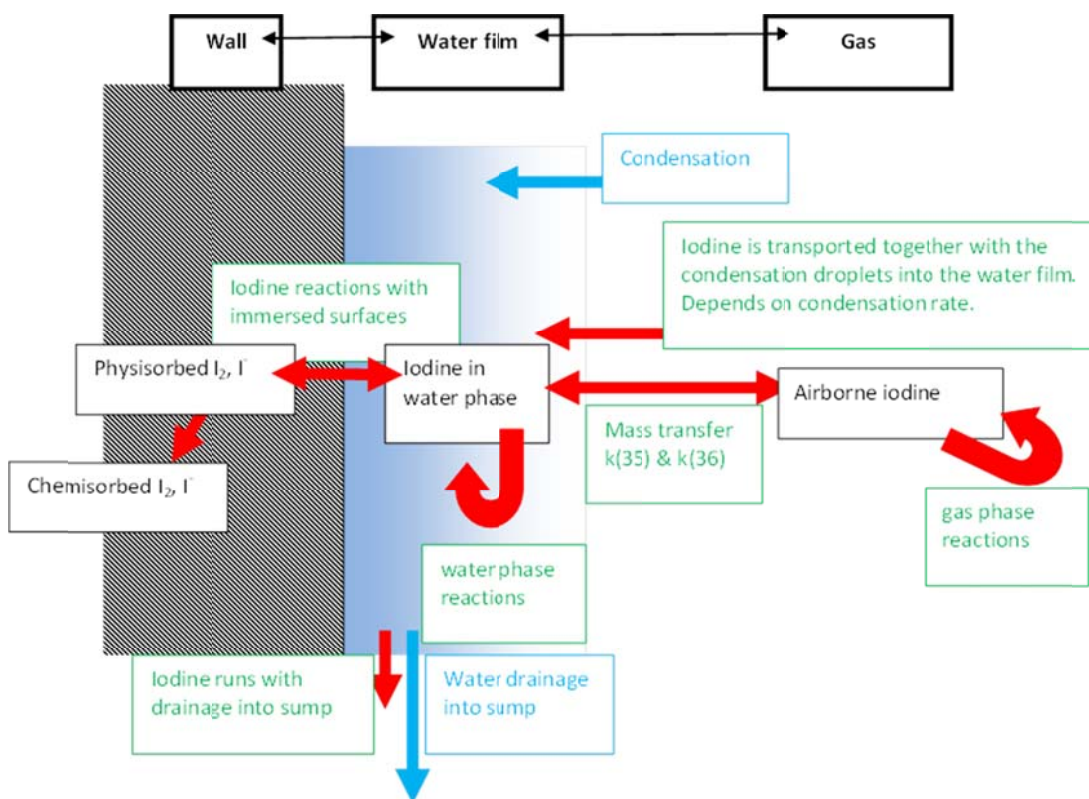


Abb. 2-9 Schematische Darstellung des Filmmodells

Innerhalb dieses Wasserfilmes („Wandsumpfes“⁷) wird nun ebenfalls die Iodchemie betrachtet: Iodspezies können im Wasserfilm gelöst sein und werden mit dem abfließenden Wasserfilm auch in angrenzende Zonen transportiert. Sie unterliegen denselben Reaktionen wie im „Hauptsumpf“ einer Zone bzw. des Containments, und zwar (in erster Annahme) mit denselben Reaktionsraten. In Zukunft können auch hier ggf. begründet einzelne Modifikationen an den Reaktionsraten nur für den Wasserfilm vorgenommen werden.

Die Reaktionen an der Wandoberfläche im Wasserfilm entsprechen den Reaktionen an Oberflächen, die sich unter Wasser im Zonensumpf/Containmentsumpf befinden: Iod kann absorbiert werden; sich aber auch von der Wand ins Wasser lösen und z. B. mit dem herabfließenden Kondensat „abgewaschen“ werden.

An der Oberfläche des Wasserfilms findet der „normale“ Massentransfer an der Phasengrenze mit der Gasphase statt². Nur eine Ergänzung ist notwendig: Die kondensierenden Dampftröpfchen „reißen“ Iodmoleküle mit sich und tragen sie somit zusätzlich zum „normalen“ Massentransfer in den Wasserfilm ein. Dieser zusätzliche Eintrag ist unabhängig von der Oberfläche und wird beschrieben durch /BIR 60/:

$$k_G^* = \frac{R}{1 - e^{-R}} k_G \quad (2-10)$$

k_G ist der „normale“ Massentransferkoeffizient für die Diffusion an die Wand. k_G^* ist der Massentransfer bei Unterstützung durch eine aufgezwungene Strömung. R gibt das Verhältnis zwischen der aufgezwungenen Strömung und dem „normalen“ Massentransferkoeffizienten k_G an. Im Falle von Kondensation ist die Geschwindigkeit der „aufgezwungenen“ Strömung durch die Stefan-Geschwindigkeit gegeben:

$$v_{Stef} = \frac{\dot{G}_{KOND}}{\rho_{STEAM}} \quad (2-11)$$

² Ggf. könnte es sinnvoll sein, einen eigenen „wasserseitigen“ Massentransferkoeffizienten KMTWAS für den Wasserfilm einzuführen: Dieser Massentransferkoeffizient beschreibt den Transport von Iodmolekülen im Wasser von dem „Hauptteil“ der Wasservorlage an die Grenzfläche. Da es im Wasserfilm quasi „nur“ eine Grenzfläche gibt und der Wasserfilm deutlich bewegter als ein großer Sumpf ist, sollte ein höherer Massentransferkoeffizient als für den Zonensumpf/Containmentsumpf (derzeit KMTWAS = $1 \cdot 10^{-5}$ m/s) angenommen werden. Ein möglicher Wert wäre $3 \cdot 10^{-4}$ m/s, der im Versuch THAI-Iod-23 als Wert für einen „bewegten“ Sumpf ermittelt wurde.

Hierbei ist \dot{G}_{KOND} der Kondensationsmassenstrom ($\text{kg/m}^2\text{s}$) und ρ_{STEAM} die Dampfdichte in der Atmosphäre (kg/m^3). Damit ist dann $R = \frac{v_{Stef}}{k_G}$.

Für k_G lässt sich der KMTGAS-Wert (Default: $1,4 \cdot 10^{-3}$ m/s) in AIM-3 verwenden, denn er stellt den Diffusions-Massentransferkoeffizienten an der Sumpfoberfläche dar.

Der Massentransferkoeffizient k_G^* wird bei geringen Kondensationsraten ($v_{Stef} \ll k_G = 1,4 \cdot 10^{-3}$ m/s; das entspricht einer Kondensationsrate von etwa $0,7 \text{ g/m}^2\text{s}$) vom diffusiven Massentransfer bestimmt und somit ist $k_G^* \approx k_G = 1,4 \cdot 10^{-3}$ m/s (Abb. 2-10). Da in diesem Bereich der Iodeintrag konstant ist, steigt sogar die Iodkonzentration im Wasserfilm bei sinkender Kondensationsrate.

Nur bei höheren Kondensationsraten ($v_{Stef} \approx k_G$) ist der Iodeintrag bei Kondensation höher als bei Diffusion; bei sehr hohen Kondensationsraten ($v_{Stef} \gg k_G$) wird der Iodeintrag dann schließlich durch die Kondensationsströmung bestimmt und $k_G^* \approx v_{Stef}$. In diesem Fall ist die Iodkonzentration im Wasserfilm unabhängig von der Kondensationsrate, da der Iodeintrag mit zunehmender Kondensationsrate wächst aber dabei eben auch der Wassereintrag in den Wasserfilm zunimmt.

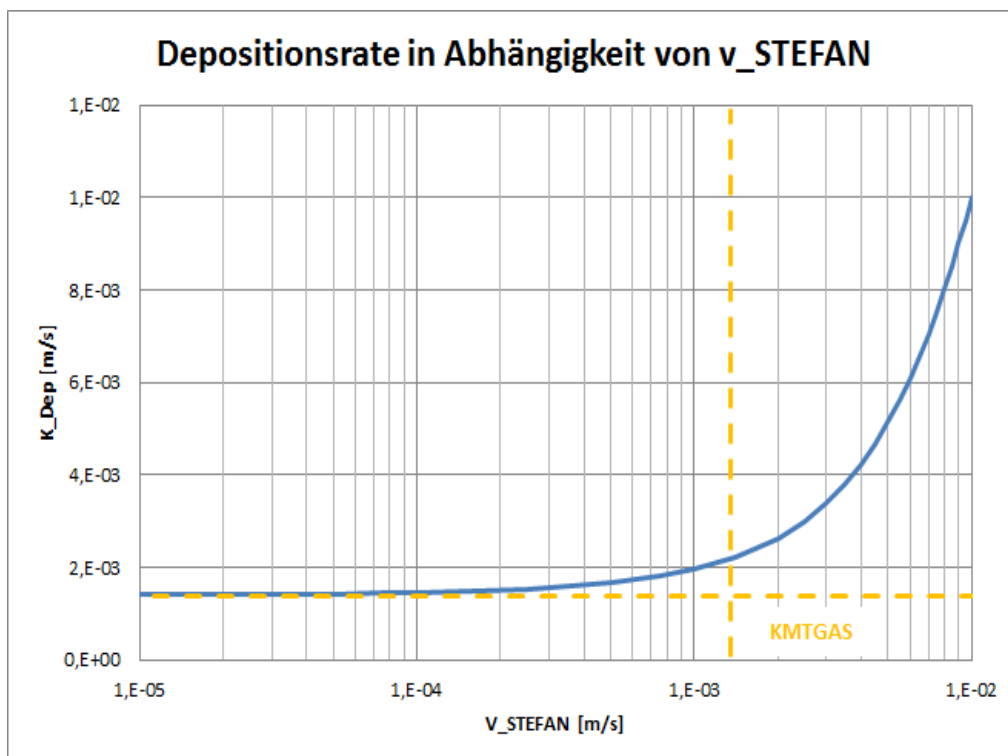


Abb. 2-10 Zusätzlicher Iodeintrag in den Wasserfilm bei Kondensation in Abhängigkeit von der Stefan-Geschwindigkeit

Das vorgestellte Filmmodell benötigt mehrere thermodynamische Größen wie die Wasserfiltemperatur oder die Wandkondensationsrate, welche durch das THY-Modul zur Verfügung gestellt werden. Die Wasserfilmdicke wird vom Anwender vorgegeben oder könnte alternativ mit der Nusseltschen Wasserhauttheorie berechnet werden.

Die Berechnung bzw. Vorgabe des pH-Wert im Wasserfilm sollte Gegenstand weiterer Untersuchungen sein, da einige Iodreaktionen (Hydrolyse-Gleichgewicht zwischen Iodid und elementarem Iod sowie die Iodid-Absorption an Farboberflächen) sensitiv gegenüber einer pH-Wert-Veränderung reagieren. Inwieweit das pH-Wert-Modell (Kapitel 2.4) auch auf die spezielle Situation des Wasserfilms anwendbar ist, muss geklärt werden.

Im Filmmodell ist außerdem vorgesehen, auch eine teilweise Bedeckung der betrachteten Wandfläche mit dem Wasserfilm zuzulassen, um der Inhomogenität der Kondensationsvorgänge (Auftreten von Rinnsalen, kein flächiger Wasserfilm) bei geringen Kondensationsraten Rechnung zu tragen.

Im Rahmen der Implementierung des Filmmodells erfolgte zudem eine Neubewertung der Chemisorptionsraten an Farboberflächen in Gas- und Wasserphase basierend auf Ergebnissen der THAI-Versuche. Es wird angenommen, dass chemisorbiertes Iod nicht mehr abgewaschen werden kann. Wie aus Abb. 2-7 aus dem THAI-Versuch ersichtlich wird, ist diese Chemisorption offenbar ein schnellerer Prozess (schwarz), als bisher angenommen (grün), da de facto bereits nach 4 Stunden kein weiteres Iod mehr abgewaschen wird. Zudem müssen die Chemisorptionsraten in Gas- und Wasserphase im Modell harmonisiert³ werden.

Das Filmmodell gilt für alle Typen von Oberflächen (Farbe, Stahl, Beton). Da I₂ von Stahl in der Gasphase absorbiert wird, während es sich unter Wasser nicht anlagert und in der Gasphase abgelagertes Iod durch fortwährende Kondensationsvorgänge vollständig abgewaschen werden kann, muss eine „Lösungsrate“ von in der Gasphase angelagertem Iod an Stahloberflächen bei Benetzung durch einen Wasserfilm eingefügt werden.

³ So wurde z. B. im bisherigen AIM-3 im Gegensatz zur Gasphase überhaupt keine Chemisorption von I₂(dep,p,w) an Strukturen in der Wasserphase angenommen. Diese Chemisorption wurde mit einer Rate von $1,1 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ergänzt; sie ist z. B. in den OECD-BIP-Versuchen auch explizit nachgewiesen worden.

2.1.3.3 Anwendung des Filmmodells auf THAI-Iod-21

Abb. 2-11 und Abb. 2-12 zeigen die Ergebnisse einer Rechnung mit dem Filmmodell (Wasserfilmdicke: 1 mm) für THAI-Iod-21 (rot) im Vergleich mit der Rechnung mit dem bisherigen AIM-3 bei abgeschalteten Reaktionen 9 und 44 (grün) und dem Experiment (schwarz). In beiden Rechnungen wurde die Iod-Absorptionsrate auf trockener Farbe in den ersten vier Stunden erniedrigt.

Die Ergebnisse des Filmmodells sind in zufriedenstellender Übereinstimmung mit dem Experiment und deutlich besser als die Ergebnisse mit dem bisherigen AIM-3 Modell (vgl. insb. Abb. 2-7 und Abb. 2-8 bei Standardeinstellung von Reaktionen 9 und 44). Trotzdem zeigt auch die Rechnung mit dem Filmmodell eine Abnahme der Iodbelegung auf der Farboberfläche während der Kondensationsphase (Abb. 2-12, im linearen Maßstab). Bezüglich dieser Fragestellung ist die Einstellung der Chemisorption von hoher Bedeutung, da chemisorbiertes Iod im Modell nicht mehr abgewaschen wird.

Das Filmmodell wurde ferner anhand des Versuchs THAI-Iod-24 im Rahmen von RS1190 validiert und hieraus wurden Hinweise für die weitere Verwendung bzw. Modifikationen des Filmmodells gewonnen. Der Versuch THAI-Iod-24 befasste sich ebenfalls mit Abwaschvorgängen an Farboberflächen mit unterschiedlichen Kondensationsraten, jedoch ohne vorherige trockene Beladephase. Auch die Rechnungen zu dem Versuch THAI-Iod-12 (Stahloberflächen, die Kondensation ausgesetzt waren) im Rahmen des SARNET2-WP 8.3 THAI-Benchmarks wurden zur Validierung des Filmmodells herangezogen.

Insgesamt konnte nachgewiesen werden, dass das neue Filmmodell eine bessere Übereinstimmung mit den Versuchsergebnissen zeigte als das bisherige Modell in AIM-3, und sich insbesondere besser an spezielle Bedingungen (z. B. stehende oder verbleibende Wasserfilme auf Oberflächen nach dem Ende von Kondensationsphasen) anpassen lässt. Zudem zeigte sich, dass die Rechenergebnisse insensitive gegenüber der Nutzer-Eingabegröße „Wasserfilmdicke“ sind.

Nichtsdestotrotz ergaben sich auch Differenzen zwischen berechnetem und gemessenem Iodverhalten. Die Rechnung reagiert recht sensitiv gegenüber Änderungen im Gleichgewicht zwischen Iodid und elementarem Iod im Wasserfilm, da die Absorption von $I^-(w)$ an Farboberflächen anders als von $I_2(w)$ ist. Gute Ergebnisse lassen sich nur erzielen, wenn das Gleichgewicht „gut“ eingestellt ist. Leider kann das Gleichgewicht

nicht direkt im Wasserfilm gemessen werden. Das I₂-Gleichgewicht kann durch den pH-Wert (unsichere Eingabegröße) oder durch Annahme zusätzlicher Reduktionsmittel (deren Austritt aus Farboberflächen ist in Laborversuchen beobachtet worden /HEL 96/) stark verschoben werden.

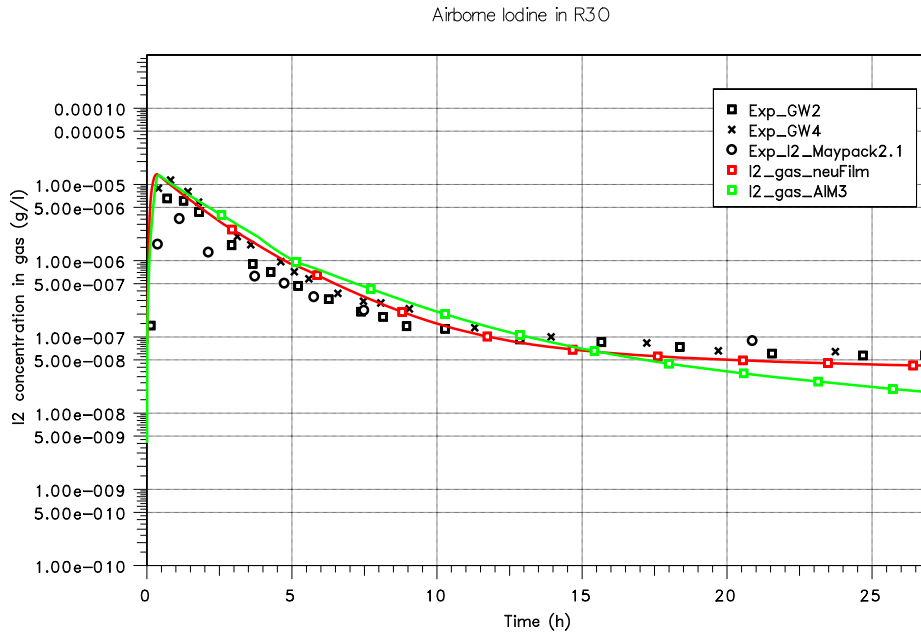


Abb. 2-11 I₂(g)-Konzentration in THAI-Iod-21

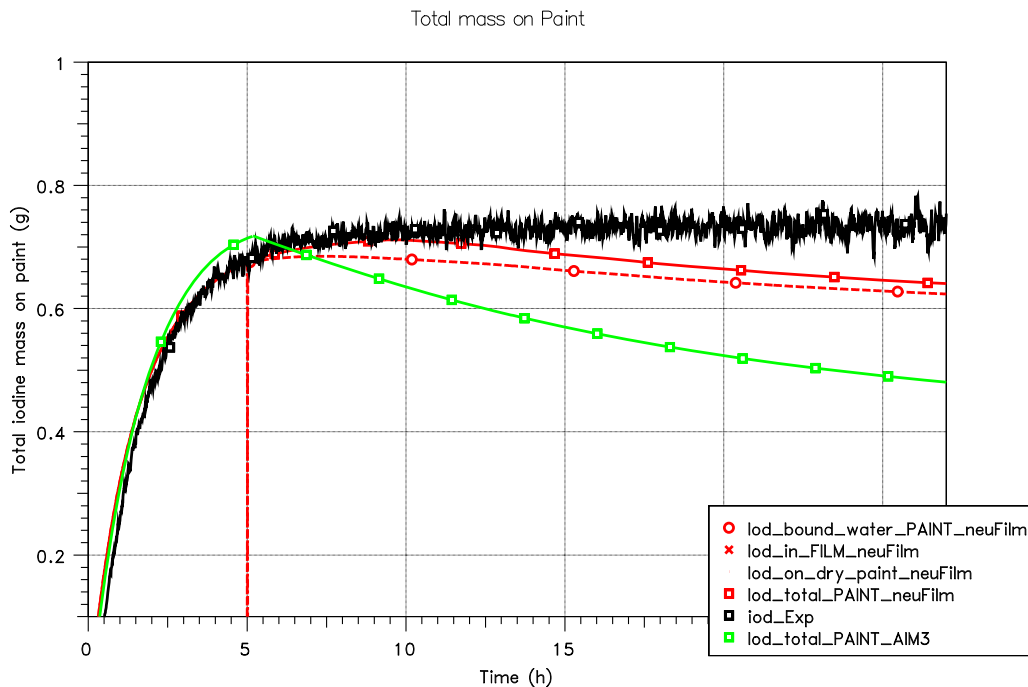


Abb. 2-12 Konzentration abgelagerten Iods auf der Farboberfläche in THAI-Iod-21

2.2 Iodverhalten

2.2.1 Iod/Stahl- und Iod/Farbe-Modelle

Im Rahmen des OECD-BIP-Programmes /GLO 09/ wurden Labortests zur Iodabsorption an Stahloberflächen in der Gasphase mit Stahlcoupons des in der THAI-Anlage verwendeten Stahles durchgeführt. Anhand dieser Tests konnte das im Rahmen des vorhergehenden COCOSYS-Weiterentwicklungsprojektes RS 1159 /SPE 09/ implementierte Iod-Stahl-Modell /LUD 08/ überprüft werden.

Dieses Iod-Stahl-Modell in AIM-3 (Abb. 2-13) sieht einen zweistufigen Absorptionsprozess vor: Nach einem relativ schnellen und reversiblen ersten Anlagerungsprozess („Physisorption“) wird das Iod in einem nachgelagerten, langsameren Prozess stärker an den Stahl als FeI_2 gebunden („Chemisorption“). Diese Chemisorption wurde zunächst als irreversibel angenommen (d. h. $k(75) = 0$ in Abb. 2-13) und stellt damit eine permanente und endgültige Iodsenke im Modell dar.

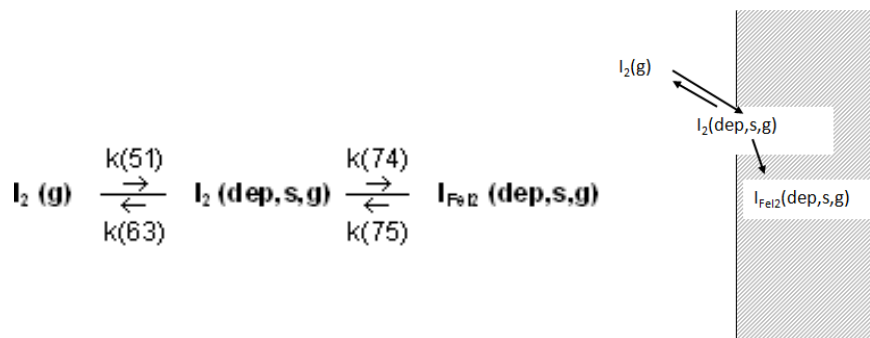


Abb. 2-13 Ursprüngliches zweistufiges Iod-Stahl-Modell in AIM-3 /WEB 09/

Einerseits konnte nun aus den OECD-BIP-Versuchen die Adsorptionsrate für die Physisorption $k(51)$ von $\text{I}_2(\text{g})$ direkt aus dem anfänglichen Anstieg der Iodbelastung auf dem Stahlcoupon abgelesen werden. Sie erwies sich um eine Größenordnung geringer als bisher angenommen. Entsprechend musste dann auch die Resuspensionsrate $k(63)$ anhand der relevanten THAI-Versuche (Iod-6, -7, -9, -16, -18) analog zu /LUD 08/ angepasst werden.

Ebenfalls wurde in diesem Rahmen die Feuchteabhängigkeit der Chemisorptionsrate anhand der aufgeführten THAI-Tests überprüft (Abb. 2-14). Die bisher implementierte Feuchteabhängigkeit (rot) unterschätzt hierbei die Iodablagerung für hohe relative Luft-

feuchten in den THAI-Versuchen (blaue Messpunkte). Daher wurde die Feuchteabhängigkeit durch

$$k(74) = \text{BAS1}_{74} * 0,1206 * \text{EXP}(0,0328 * rF) \quad (2-12)$$

ersetzt (grün).

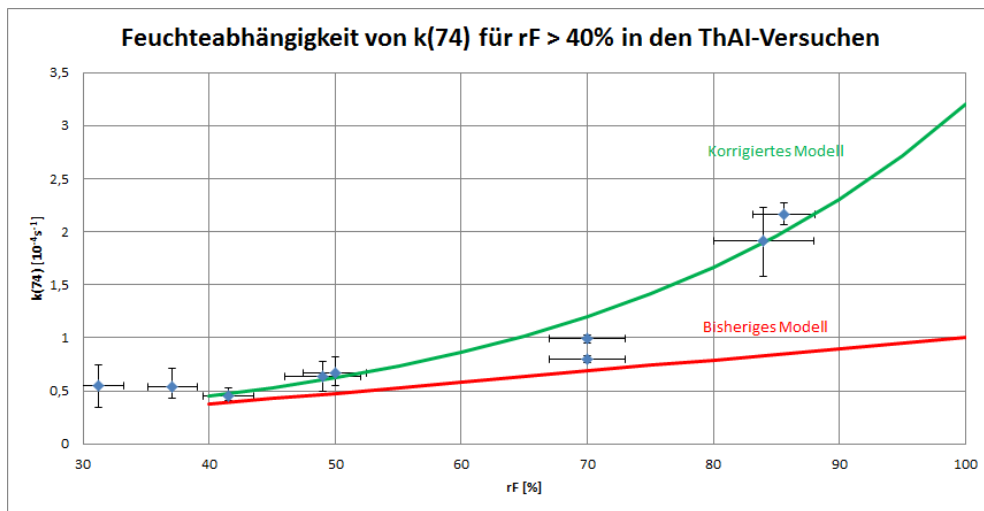


Abb. 2-14 Feuchteabhängigkeit der Chemisorptionsrate $k(74)$.

Abb. 2-15 zeigt nun die gemessene Iod-Ablagerung auf zwei identischen Stahl-Coupons im OECD-BIP-Labortest G-1.

Die Stahlcoupons (5,07 cm² Oberfläche) wurden in diesem Test zunächst einer 1·10⁻⁸ molaren I₂-haltigen Atmosphäre ausgesetzt, sodass sich I₂ an den Stahloberflächen anlagern konnte (0h – 20h). Anschließend werden die Coupons mit einem reinen Luftstrom gespült, wobei Iod teilweise wieder von den Couponoberflächen freigesetzt wird (20h - 45h). Beladung und Spülung wurden daraufhin wiederholt (Beladephase 45h – 65h, Spülphase 65h – 140h). In Abb. 2-15 fällt zunächst der große Unterschied zwischen dem Verhalten der beiden eigentlich identischen Coupons auf. Dieser Unterschied illustriert die Schwierigkeit, aus Labortests relevante Aussagen für die Iod-Modelle in COCOSYS-AIM-3 abzuleiten, welche dann „gemittelt“ für die großen Oberflächen eines Containments bzw. einer Testanlage gelten sollen. Letztlich unterstreicht dies die Notwendigkeit der Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit einem realistisch großen Unsicherheitsband für die Iod-Reaktionskonstanten bei der Anwendung von COCOSYS. Eine beispielhafte Studie

wird im Rahmen des Vorhabens RS1190 anhand des Versuches Phebus FPT1 durchgeführt.

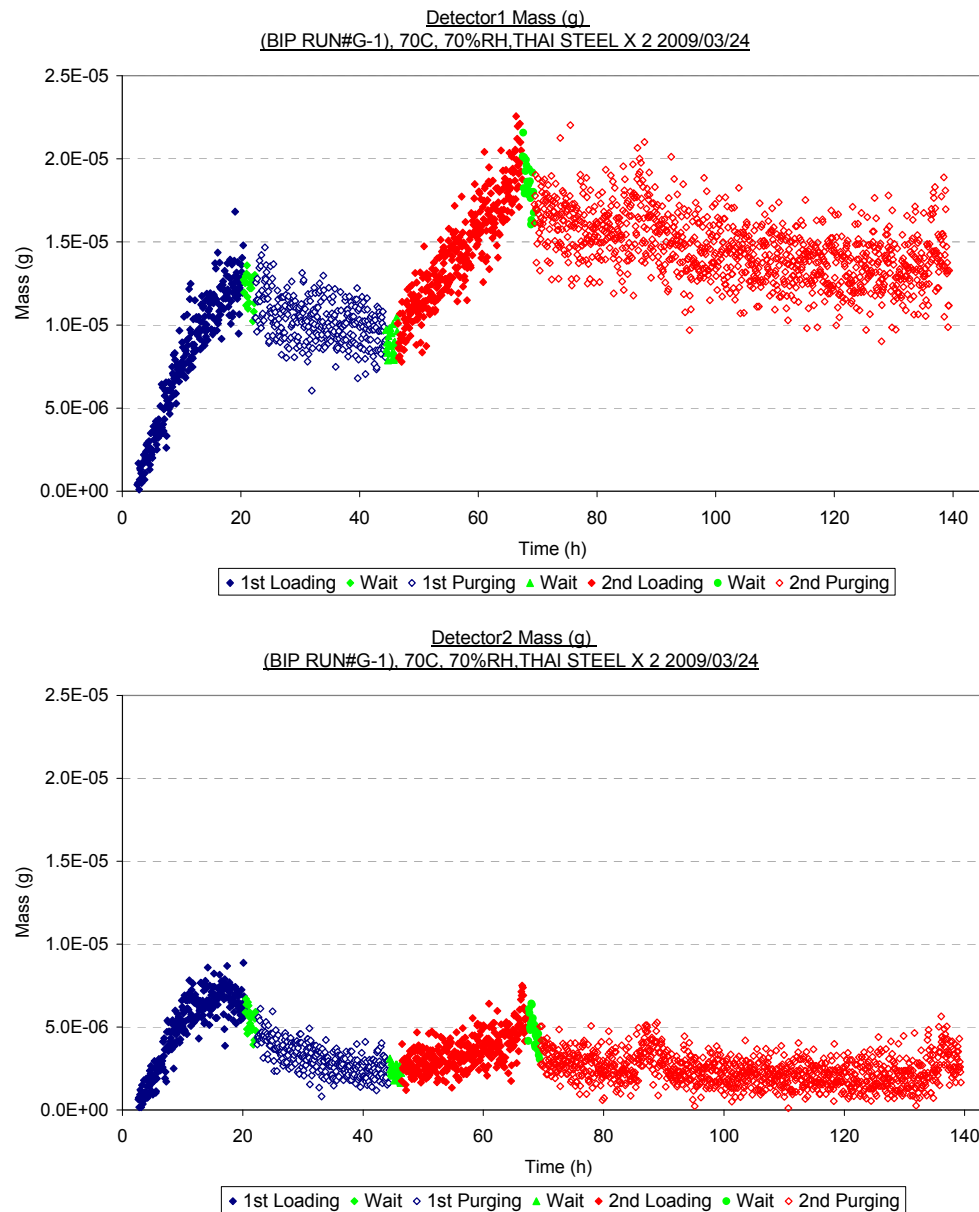


Abb. 2-15 Gemessene Iod-Ablagerung auf THAI-Stahl-Coupons im OECD-BIP-Test G-1 /GLO 09/

Angeichts der Experimentalergebnisse (Abb. 2-15) erweist sich nun das zweistufige Modell zur I₂-Absorption an Stahloberflächen in AIM-3 als unzureichend:

- In der Spülphase (20 – 40 h) findet über einen langen Zeitraum Iod-Wiederfreisetzung statt. Im bisherigen zweistufigen Modell wird das physisorbierte Iod jedoch schon innerhalb von 2-3 Stunden vollständig wieder freigesetzt. Ein

langsamer Freisetzungsprozess des chemisorbierten Iods ist also zu berücksichtigen.

- Trotzdem verbleibt auch trotz langanhaltender Spülung ein „Restsatz“ Iod an der Stahloberfläche, der nicht wieder freisetzbar ist. Es gibt also irreversibel gebundenes Iod.
- Am zweiten Coupon (Abb. 2-15, unten) wird deutlich, dass die gesamte Iodaufnahme einer Oberfläche „beschränkt“ zu sein scheint: Es gibt eine maximale Aufnahmekapazität für Iod, da die von der Oberfläche aus erreichbaren Eisenatome „beschränkt“ sind. Das unterschiedliche Verhalten der beiden Coupons ließe sich vielleicht mit einer unterschiedlichen maximalen Aufnahmekapazität (die aus statistischen Gründen variiert) erklären.

Um diese Unzulänglichkeiten des bisherigen Iod-Stahl-Modells zu bereinigen, wurde das zweistufige Modell um eine weitere Reaktion erweitert: Nach /WRE 01/ reagiert FeI_2 mit dem Luftsauerstoff weiter zu „wirklich“ fest gebundenen Eisen-Iod-Oxid $\text{FeI}_{2x}\text{O}_y$, wobei jedoch auch wieder elementares $\text{I}_2(\text{g})$ an die Atmosphäre freigesetzt wird (Abb. 2-16). Diese Erweiterung wurde in Form des Reaktionsschemas, welches in Abb. 2-17 dargestellt ist, in AIM-3 übernommen.

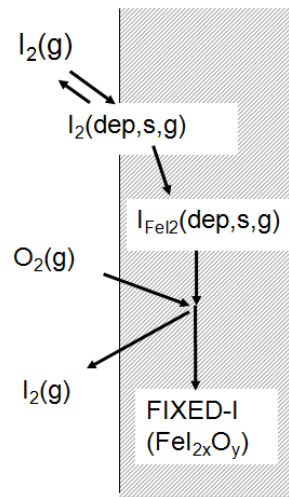


Abb. 2-16 Erweitertes Iod-Stahl-Reaktionsschema nach /WRE 01/

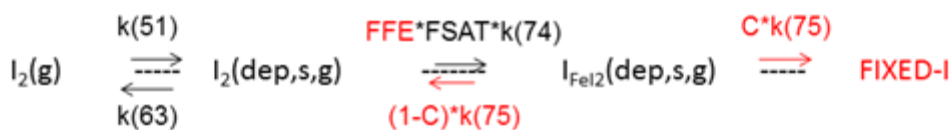


Abb. 2-17 Erweitertes Iod-Stahl-Modell in AIM-3

$k(75)$ bezeichnet hierbei die Reaktionskonstante für die Reaktion von FeI_2 mit Sauerstoff, wobei sich die Reaktion gemäß des Anwender-Eingabeparameters C auf die Weiterreaktion zu $\text{FeI}_{2x}\text{O}_y$ (FIXED-I) bzw. die Wiederfreisetzung zu $\text{I}_2(\text{g})$ aufteilt. Der Sättigungsfaktor

$$\text{FFE} = \left(1 - \frac{c_{\text{FeI}_2} + c_{\text{FIXED-I}}}{\text{FEMAX}} \right). \quad (2-13)$$

verlangsamt die Chemisorption, wenn sich die Konzentration des insgesamt abgelagerten Iods ($c_{\text{FeI}_2} + c_{\text{FIXED-I}}$) der maximalen Aufnahmekapazität FEMAX (User Eingabeparameter) nähert. Hierbei wird eine mögliche Oxidation von Stahl (welche die maximale Aufnahmekapazität des Stahls herabsetzt) nicht im Modell berücksichtigt.

Die Nachrechnung der OECD-BIP Laborexperimente mit dem erweiterten Iod-Stahl-Modell ist in Abb. 2-18 abgebildet. Die verwendeten relevanten User-Eingabeparameter (Reaktionskonstanten k , C , FEMAX) unterscheiden sich nur in der maximalen Aufnahmekapazität FEMAX für die beiden Rechnungen ($2 \cdot 10^{-4} \text{ mol/m}^2$ für den oberen, $2 \cdot 10^{-5} \text{ mol/m}^2$ für den unteren Coupon). Das erweiterte Modell reproduziert sogar das langsamere Absorptionsverhalten im zweiten Beladezyklus (gelbe Linien in Abb. 2-18, unten), da sich die Iodbeladung der maximalen Aufnahmekapazität nähert.

Der OECD-BIP-Test G-13 wurde als Wiederholungstest von G-1 wiederum mit THAI-Iod-Stahl-Coupons durchgeführt (Abb. 2-19). In diesem Test konnte alles abgelagerte Iod wieder freigesetzt werden. Die Relevanz und Notwendigkeit der Modellierung der Weiterreaktion von FeI_2 zu $\text{FeI}_{2x}\text{O}_y$ ist also – insb. im Hinblick auf Containmentanwendungen – nicht unbedingt klar. Daher wird die Anwendung des neuen, erweiterten AIM-3-Modells (Abb. 2-17) in zwei möglichen Varianten empfohlen: Entweder in der Vollversion mit Weiterreaktion zu $\text{FeI}_{2x}\text{O}_y$ und Modellierung der maximalen Aufnahmekapazität oder in vereinfachter Form, in der im Gegensatz zum bisherigen Modell (Abb. 2-13) nur die Rückreaktion zur Chemisorption ergänzt wurde. Die für diese jeweiligen Varianten empfohlenen Eingabeparameter sind in Tab. 2-2 aufgeführt.

Die Anwendung der beiden Varianten des erweiterten Iod-Stahl-Modells auf den THAI-Iod-Stahl-Test THAI-Iod-18 ist in Abb. 2-20 dargestellt: Die Übereinstimmung der AIM-3-Rechnung mit dem Experiment wurde durch die Anpassung der Feuchteabhängigkeit der Chemisorption nach (2-12) deutlich verbessert (rot: bisheriges Modell; grün: mit stärkerer Feuchteabhängigkeit). Die Auswirkung der Einführung des erweiterten Modells sind gering, genauso wie die Unterschiede zwischen den beiden Varianten (volle

Erweiterung: blau; nur Rückreaktion: orange). Als Effekt der eingeführten Reversibilität der Chemisorption schwächt sich in der letzten Versuchsphase nach 30 h jedoch nun in den Rechnungen mit dem erweiterten Modell die Iodabnahme aufgrund leicht sinkender Luftfeuchte in Übereinstimmung mit dem Experiment etwas ab.

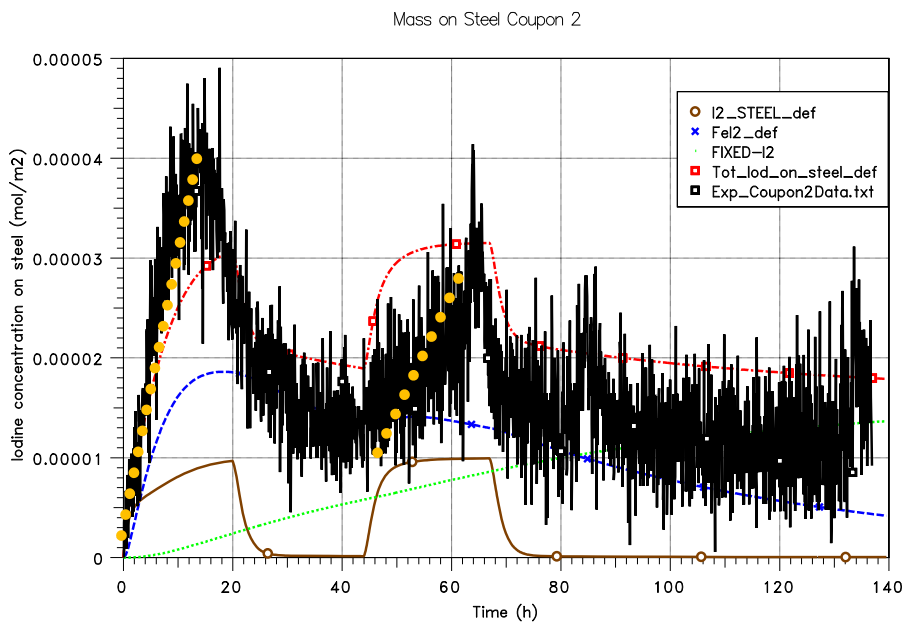
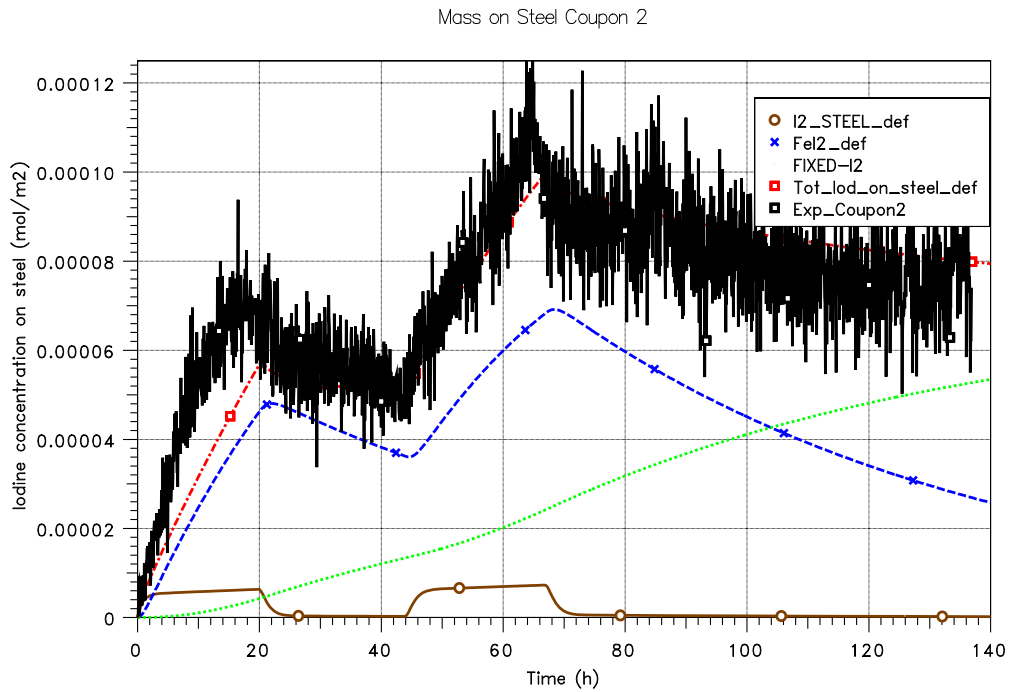


Abb. 2-18 AIM-3 Simulation der OECD-BIP G1 Tests

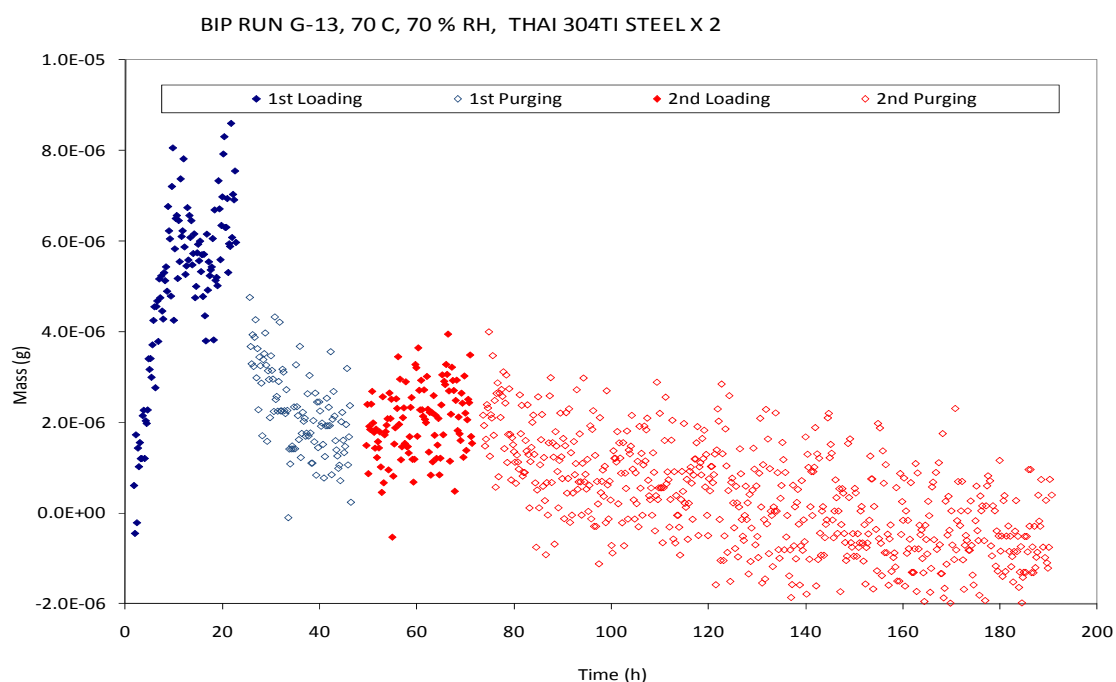


Abb. 2-19 OECD-BIP-Test G-13: Wiederholungstest von G-1 mit THAI-Stahl-Coupon /GLO 11/

Tab. 2-2 Reaktionskonstanten für das Iod-Stahl-Modell in AIM-3

	Parameter	Vollerweitertes Modell	Erweiterung: Rückreaktion	Bisheriges Modell
Physisorption auf Stahl	k(51)	$2,6 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$	$2,6 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$	$2,6 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$
Resuspension	k(63): BAS1	$1,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$1,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$1,5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
	k(63): EAKT1	$5,4 \cdot 10^{-4} \text{ J/mol}$	$5,4 \cdot 10^{-4} \text{ J/mol}$	$5,4 \cdot 10^{-4} \text{ J/mol}$
Chemisorption	k(74)	$1,3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$1,3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	$1,0 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Weiterreaktion von FeI_2 (Oxidation / Freisetzung)	k(75)	$4,6 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$	$2,1 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$	0,0
“Aufteilungsfaktor” für die Weiterreaktion	C75	0,54	0,0	-
Maximale Aufnahmekapazität	FEMAX	$2 \cdot 10^{-4} \text{ mol/m}^2$	$1 \cdot 10^6 \text{ mol/m}^2$	-

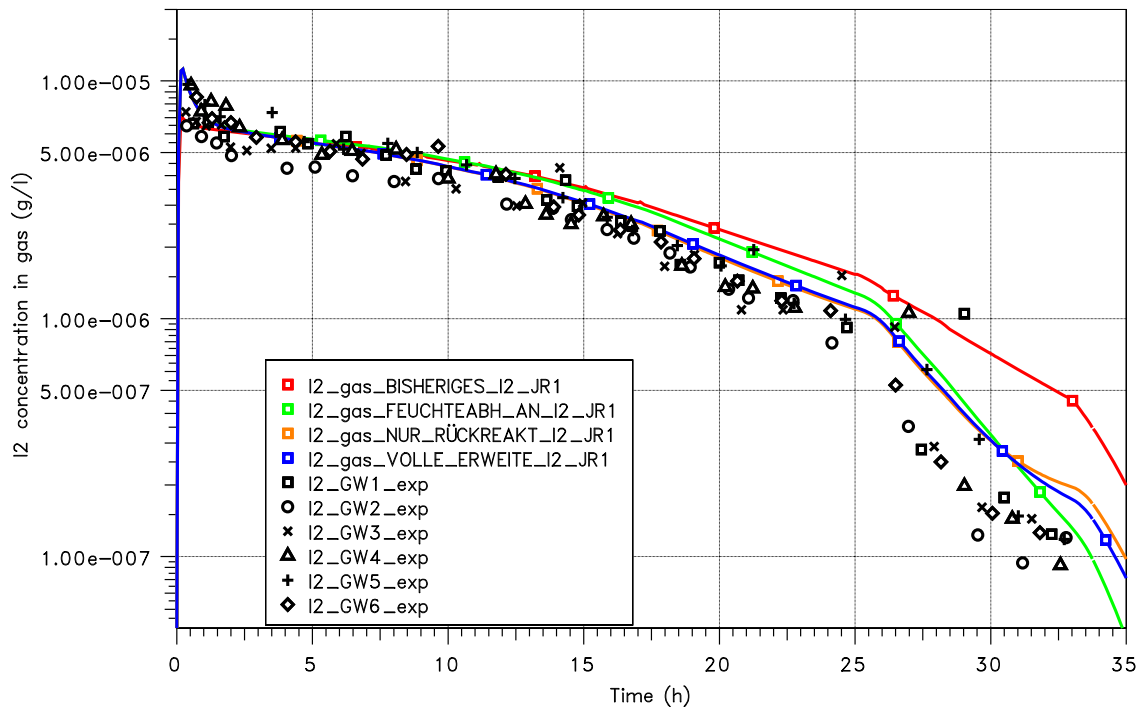


Abb. 2-20 I₂(g)-Konzentration in THAI-Iod-18 mit den verschiedenen Iod-Stahl-Modell-Modifikationen.

Da die Iod-Stahl-Reaktion die Randbedingung der Iodchemie im THAI-Behälter darstellt, wurden die THAI-Versuche, die sich der Iodablagerung auf trockenen Farboberflächen in der Gasphase gewidmet haben (Iod-15, -17 und -20) mit dem erweiterten Iod-Stahl-Modell erneut nachgerechnet und die in AIM-3 hinterlegten Reaktionsraten für die Iodabsorption an Farbe überprüft. Die sich aus der Überprüfung in Folge der Änderungen des Iod-Stahl-Modells ergebenden leicht variierten Reaktionsraten für das Iod-Farbe-Modell sind in Tab. 2-3 zusammengefasst. Abb. 2-21 illustriert beispielhaft die Unterschiede zwischen dem bisherigen Modell (grün) und den leicht variierten Reaktionsraten (rot) für THAI-Iod-20.

Gaseous Iodine concentration

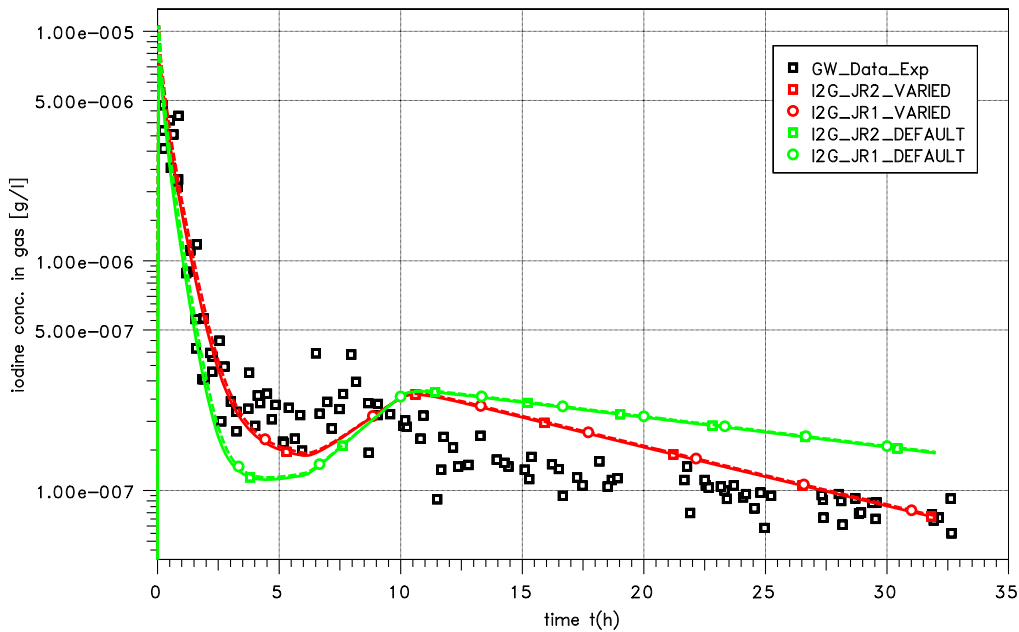


Abb. 2-21 $I_2(g)$ -Konzentration in THAI-Iod-20

Ebenfalls im Rahmen des OECD-BIP-Programmes /GLO 11/ wurde die Absorptionsrate von Iod auf trockenen Farboberflächen in der Gasphase in mehr als 25 Laborversuchen gemessen. Die gemessenen Absorptionsraten variierten hierbei bei gleichen thermodynamischen Bedingungen von $1 \cdot 10^{-3}$ m/s bis $1 \cdot 10^{-2}$ m/s, wobei sich die Variation nur z. T. durch den unterschiedlichen Farbtyp (Ripolin oder Amerlock) erklären ließ. Zudem wurde eine starke Abhängigkeit der Absorptionsrate von der relativen Luftfeuchte festgestellt. Berücksichtigt man die in den OECD-BIP gemessene Variationsbreite der gemessenen Adsorptionsraten, erscheinen die in Tab. 2-3 aufgeführten Anpassungen marginal. Die OECD-BIP Ergebnisse unterstreichen also auch für das Iod-Farbe-Modell die unbedingte Notwendigkeit von Unsicherheitsanalysen bei der Anwendung von COCOSYS-AIM-3, wobei die Unsicherheitsbandbreite für die Iodreaktionsraten hier durchaus im Bereich einer Größenordnung liegen kann.

Tab. 2-3 Aus den THAI-Versuchen abgeleitete Reaktionsraten für das Iod-Farbe-Modell

	Neu abgeleitete Werte	Bisheriges Modell
k(4) [BAS1] [EAKT1]	$3 \cdot 10^{-3}$ m/s 0 J/mol	$4 \cdot 10^{-3}$ m/s 0 J/mol
k(62) [BAS1] [EAKT1]	$8 \cdot 10^{-9}$ 1/s $8.22 \cdot 10^4$ J/mol	$5 \cdot 10^{-9}$ 1/s $8.22 \cdot 10^4$ J/mol
k(76) [BAS1] [EAKT1]	f(rh) 0 J/mol	$1 \cdot 10^{-5}$ 1/s 0 J/mol
	with $f(rh) = \begin{cases} 2 \cdot 10^{-5} \frac{1}{s} & \text{for } rh \leq 40\% \\ 2 \cdot 10^{-5} \frac{1}{s} + 0.15 \cdot 10^{-5} \cdot (rh - 40) \frac{1}{s} & \text{for } rh > 40\% \end{cases}$	-

2.2.2 Anlagerungsprozesse von Iod an Aerosolen

In COCOSYS-AIM aber auch in anderen vergleichbaren Iodmodellen ist die Anlagerung von gasförmigem I₂ an ein Aerosol bzw. die Resuspension von diesem bisher nicht berücksichtigt. Die Stärke des Effekts und damit die Notwendigkeit einer Modellierung waren bisher unklar. In zwei OECD THAI-Versuchen sollten daher die I₂-Anlagerung an ein inertes und ein reaktives Aerosol gemessen werden. Im Rahmen der vorgesehenen Modellentwicklung wurde zur Unterstützung der Auslegung des ersten Versuchs eine Vorausrechnung durchgeführt /WEB 11b/.

Vorausrechnung

In COCOSYS-AIM ist die I₂-Ablagerung auf Aerosol (noch) nicht modelliert. Es wurde daher unter Verwendung von AIM-Modellen eine Abschätzung anhand von EXCEL-Rechnungen gemacht. Im Experiment ist es vorgesehen, SnO₂ als Aerosol einzusetzen.

Die I₂-Ablagerung am Aerosol steht in Konkurrenz zur Ablagerung auf der Stahloberfläche des Behälters. Schließt man Chemisorptionsvorgänge aus, gibt es im Wesentlichen drei Iodspezies: gasförmiges Iod I₂(g), auf Stahl physisorbiertes Iod I₂ad(steel) und aerosolgebundenes Iod I₂ad(SnO₂).

Die I₂-Verteilung lässt sich unter den folgenden vereinfachenden Annahmen berechnen:

1. Keine Chemisorption von I₂ auf Stahl und SnO₂-Aerosol. Dies ist gut erfüllt, da die relative Feuchte niedrig ist (wichtig für Stahl). Unter diesen Umständen sind Stahl und SnO₂ nicht-reaktiv gegenüber I₂. Es erfolgt nur eine vergleichsweise lose I₂ Ablagerung auf den Oberflächen (Physisorption). Dies zeigen auch die AREVA Laborversuche mit SnO₂/FUN 11/. – Reaktive Aerosole binden I₂ durch Chemisorption fest. Diese sollen in einem späteren Versuch untersucht werden.
2. Die I₂-Adsorptionsgeschwindigkeit für Stahl und SnO₂ sowie die I₂-Desorptionsrate für Stahl und SnO₂ sind gleich groß. Die Werte für SnO₂ sind nicht bekannt, auch liefern die AREVA-Labortests keine Anhaltspunkte (siehe unten).
3. Die sich einstellende I₂-Gleichgewichtskonzentration zwischen Atmosphäre und SnO₂-Aerosol gilt auch für das am Boden abgelagerte Aerosol, d. h. abgelagertes Aerosol bindet I₂ durch Physisorption weiter.

Mit diesen Annahmen gilt für die Iodkonzentration im Gas (c_g) und auf den Oberflächen (c_{ad}):

$$c_g = \frac{P m_{tot}(I_2)}{A_{tot} + P V} \quad (2-14)$$

$$c_{ad} = \frac{m_{tot}(I_2)}{A_{tot} + P V} \quad (2-15)$$

m_{tot}(I₂) ist die gesamte I₂-Menge (1 g), A_{tot} die gesamte Oberfläche im Behälter, d. i. die Behälterwand plus die Oberfläche des luftgetragenen und abgelagerten Aerosols und V ist das Behältervolumen. Unter der Annahme eines I₂-Konzentrationsgleichgewichts zwischen Gas, Partikeln und Wand gilt

$$P = \frac{c_g}{c_{ad}} = \frac{k(63)}{k(51)} \quad (2-16)$$

P ist der Verteilungsfaktor für I₂, A_{tot} die Wand- und Aerosoloberfläche, m_{tot} die gesamte I₂-Menge und V das Behältervolumen. k(51) ist in AIM der Adsorptionskoeffizient und k(63) ist der Desorptionskoeffizient für I₂ auf Stahl. Der Desorptionskoeffizient und der Verteilungsfaktor P sind temperaturabhängig.

Eingespeistes SnO₂-Aerosol erhöht die Adsorptionsfläche. Die Stahloberfläche im THAI-Behälter ohne Einbauten beträgt 95 m².

Es sind zwei Aerosol-Einspeisungen geplant, eine spontane Freisetzung bei $t = 6$ h und eine kontinuierliche Einspeisung ab $t = 10$ h.

Spontane Aerosolfreisetzung

Bei der angestrebten SnO_2 -Aerosolkonzentration nach der spontanen Freisetzung von 2 g/m^3 beträgt die Gesamtoberfläche aller Partikel im Behälter

$$A_{ae,tot} = 96,6 \text{ m}^2 \text{ (kugelförmig),}$$

Tatsächlich ist die effektive Fläche wegen der quallenartigen Partikelform (Abb. 2-22) größer. Es werden daher hier 145 m^2 angenommen.

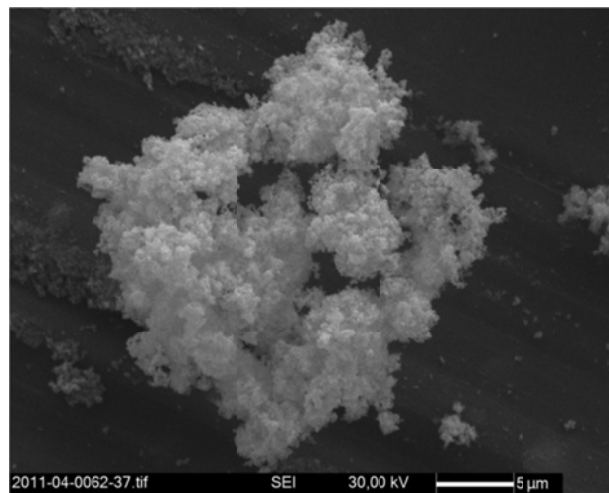


Abb. 2-22 Aufnahme einer SnO_2 -Partikel aus /FUN 11/

Kontinuierliche Aerosoleinspeisung

Mit der zweiten, kontinuierlichen Einspeisung soll die luftgetragene SnO_2 -Aerosolkonzentration nach dem Abbau der ersten Einspeisung auf ca. $1,5 \text{ g/m}^3$ angehoben und dann eine Stunde konstant gehalten werden. Der Zuwachs an Aerosolfläche beträgt demnach

$$\Delta A_{ae,tot} = 43,1 \text{ m}^2/\text{h} \quad (2-17)$$

Die damit berechnete Konzentration des gasförmigen I_2 und des auf dem luftgetragenen Aerosol abgelagerten Iods ist in Abb. 2-23 dargestellt.

Mit den beiden Aerosoleinspeisungen nimmt sowohl die Iodkonzentration im Gas als auch an den Oberflächen ab. Auch wenn die Absenkung der $I_2(g)$ -Konzentration durch das Aerosol relativ gering ist, wird doch ein erheblicher Teil des eingespeisten Iods vom Aerosol physisorbiert (bis zu 50 %).

Anhand dieser Rechenergebnisse konnten die folgenden Empfehlungen zu Optimierung der Fahrweise an die Experimentatoren gegeben werden /WEB 11b/:

1. Die Behältertemperatur sollte niedrig gewählt werden. Vorzugsweise 70 °C statt der geplanten 120 °C.
2. Die kontinuierliche SnO_2 -Aerosoleinspeisung sollte deutlich länger als geplant (1 h) laufen, idealerweise 5 oder 6 Stunden. $\Delta t = 5$ h
3. Die I_2 -Ablagerung auf einem SnO_2 -Coupon sollte gleichzeitig mit dem Stahl-Coupon gemessen werden. Die Coupons sind vertikale Flächen, an denen sich das gasförmige, radioaktiv getracerte I_2 ablagert. Durch ein Fenster im Behälter wird von außen die abgelagerte Menge mit einem Szintillationsdetektor gemessen. Bislang wurden in THAI nur Stahlcoupons, die aus dem gleichen Material wie die Behälterwände sind, eingesetzt. In Iod-25 wurde auch ein mit SnO_2 -beschichteter Coupon eingesetzt, mit dem das Ablagerungsverhalten auf dem gleichen Material, aus dem auch das Aerosol besteht, gemessen wurde.
4. Neben den Maypack-Messungen sollten einfache Filtermessungen zur Erfassung des am Aerosol abgelagerten I_2 gemacht werden.

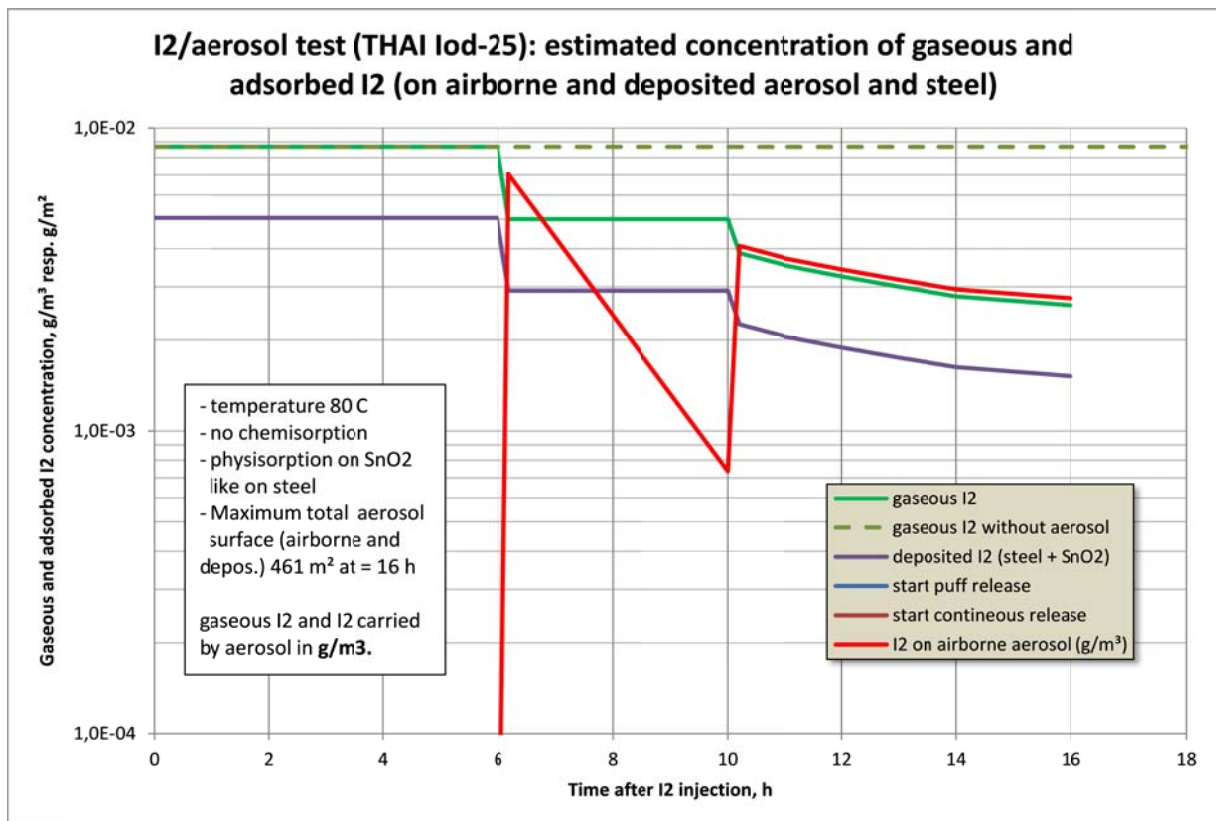


Abb. 2-23 Berechnete I₂-Konzentrationen im Gas und am luftgetragenen Aerosol

Alle Empfehlungen wurden bis auf Punkt (4), der aus technischen Gründen nicht möglich war, berücksichtigt und der Versuch wurde im November 2011 erfolgreich durchgeführt. Zurzeit liegen nur vorläufige Messergebnisse vor /GUP 12/. Sie erlauben aber einen ersten Vergleich der Vorausrechnung mit der Messung (Tab. 2-4).

In Anbetracht der Umstände (neuer Effekt, Versuchsbedingungen nur ungenau bekannt) ist die Übereinstimmung zwischen Vorausrechnung und Messung erstaunlich gut. Wie vorhergesagt, nimmt mit der Aerosoleinspeisung die Konzentration an gasförmigem I₂ deutlich ab. In der Vorausrechnung erfolgt die Abnahme etwas schneller als im Test. Ein Grund könnte der in der Rechnung etwas größer angenommene Partikeldurchmesser sein. Dies muss im Einzelnen noch analysiert werden. Wesentlich ist, dass die am Effekt beteiligten Prozesse offensichtlich richtig erkannt und beschrieben wurden.

Im geplanten Versuch mit reaktivem Aerosol (z. B. CsOH oder Ag) wird ein deutlich stärkerer Effekt erwartet. Erst nach Auswertung der Ergebnisse beider Versuche kann die I₂-Anlagerung in COCOSYS-AIM schließlich modelliert werden.

Tab. 2-4 Vergleich der Vorausrechnung mit den Messergebnissen; die größten Abweichungen sind grau hinterlegt

	Vorausrechnung	Messung
Aerosol	MMD = 3,3 µm σ = 1,96	MMD = 1,2 µm σ = 2
Spontane Einspeisung	c _{max} = 2 g/m ³	c _{max} = 2 g/m ³
Kontinuierliche Einspeisung	c _{max} = 1,5 g/m ³	c _{max} = 1 g/m ³
I ₂ -Ablagerung auf SnO ₂	wie für Fe	SnO ₂ > Fe
I ₂ (g)-Konzentration während spontaner Aerosoleinspeisung	8E-6 -> 5E-6 (- 37 %) Trend anfangs schneller	9E-6 -> 7E-6 (- 22 %)
I ₂ (g)-Konzentration während kontinuierlicher Aerosoleinspeisung	5E-6 -> 2,5E-6 (- 50 %)	7E-6 -> 5E-6 (- 29 %)

2.3 Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP

Bereits im Vorläufervorhaben wurden die Arbeiten zur Umstrukturierung des Hauptmoduls AFP begonnen. Diese Arbeiten wurden in diesem Vorhaben fortgesetzt, konnten aber aufgrund von Kapazitätsengpässen nicht wie geplant im vollen Umfang umgesetzt werden.

2.3.1 Zielsetzung und Motivation der Umstrukturierung

Die Zielsetzung und Motivation wurde bereits in /SPE 09/ ausführlich dargestellt. Das Hauptmodul AFP besteht im Wesentlichen aus den Modulen AERIKA zur Simulation des Aerosolverhaltens, FIPHOST für den Spaltprodukttransport, AIM zur Simulation der Iodchemie, FIPISO für das Nuklidverhalten und SPARC zur Simulation des Pool-Scrubbing. Diese Module basieren auf bereits bestehenden Programme, wie zum Beispiel IMPAIR für die Iodchemie. Als Folge sind die Module sowohl im Sinne der Modellierung (z. B. Abwaschen von Spezies) als auch im datentechnischen Sinne (z. B. separate Bilanzierung der Spezies) nicht vollständig kompatibel. Auch im Hinblick auf Eingabedaten müssen immer noch abhängige Eingabeparameter separat vorgegeben werden. Weiterhin sind manche Abhängigkeiten nicht vollständig berücksichtigt. Als Beispiel ist die fehlende Rückwirkung des Transports von Iodspezies (in AIM) auf den Spaltprodukttransport (FIPHOST) zu nennen. Im Rahmen des Vorhabens RS 1159

wurde ein Konzept einer gemeinsamen Bilanz aller im Hauptmodul AFP betrachteten Spezies entwickelt. Die daraus abgeleitete Spezifikation wurde im Rahmen dieses Vorhabens dokumentiert /KLE 12a/. Änderungen im Programm in Bezug auf die Umstrukturierung wurden in einem separaten COCOSYS V3.0 User und Reference Manual /KLE 12b / detailliert dokumentiert.

2.3.2 Konzeption

In diesem Abschnitt werden die wesentlichen Merkmale der neuen AFP-Struktur dargestellt.

2.3.2.1 Bilanzierung der Spezies

Im Hauptmodul AFP in der COCOSYS V3.0 Version werden alle Spezies in einer sogenannten Baumstruktur gespeichert (Abb. 2-24). Diese Struktur stellt die konsistente Bilanzierung auf allen Ebenen sicher. Im höchsten Level werden die sogenannten „Compositions“ (Agglomerate) behandelt. Diese werden in aerosolförmige Agglomerate mit einer Größenverteilung der Partikel und homogen vermischte Agglomerate unterschieden. Jedes Agglomerat kann aus mehreren chemischen Spezies zusammengesetzt sein (z. B. Csl mit angelagertem I₂). In Bezug auf chemische Spezies wird zwischen Verbindungen mit einer definierten Stöchiometrie und sogenannten generischen Verbindungen unterschieden, denen verschieden Elemente zugeordnet werden können. In den nächsten beiden Stufen werden die Elemente und Isotope behandelt. Aufgrund der Zuordnung zu den chemischen Spezies wird z. B. zwischen dem gasförmigen I₂ zugeordneten I und dem aerosolförmig Csl zugeordneten I unterschieden. Damit werden automatisch unterschiedliche Transporteigenschaften berücksichtigt. In der COCOSYS V2.4 AFP Version konnte dem Element I nur ein Aerosol zugeordnet werden.

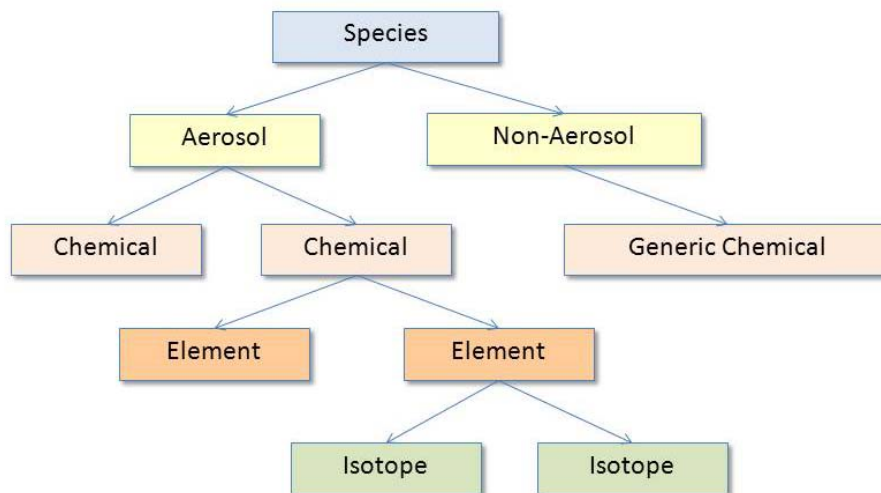


Abb. 2-24 Baumstruktur für die Spezies im Hauptmodul AFP

Um bei Massenänderungen von Spezies (Compositions, chemische Verbindungen, Elemente und Isotope) die Konsistenz sicherzustellen, werden folgende Gleichungen verwendet. Die hier betrachteten Massenänderungen können positiv oder negativ sein.

Composition (Agglomerat)

In diesem Fall wird die Massenänderung Δm_i zu der Composition i addiert. Weiterhin benötigt man für zugehörige chemische Verbindungen die Massenanteile f_{ci} (Profil). Die resultierenden Gleichungen sind:

$$m'_i = m_i + \Delta m_i$$

$$m'_{ci} = m_{ci} + f_{ci} \Delta m_i$$

Chemische Masse

In diesem Fall wird die chemische Masse Δm_c zu der zugehörigen Composition und der chemischen Verbindung c hinzu addiert. Falls die chemische Verbindung keine bestimmte Stöchiometrie hat müssen die Massenanteile f_{ec} der zugehörigen Elemente zusätzlich angegeben werden. Die verwendeten Gleichungen lauten:

$$m'_i = m_i + \Delta m_c$$

$$m'_{ci} = m_{ci} + \Delta m_c$$

$$m'_{eci} = m_{eci} + f_{ec}\Delta m_c$$

Elementmasse

In diesem Fall wird die Elementmasse Δm_e zu dem zugehörigen Element e (oder f) addiert. Im Fall, dass die zugehörige chemische Verbindung eine definierte Stöchiometrie hat müssen im Weiteren die anderen Elemente dieser Verbindung ebenfalls addiert werden. Beispiel: Wird das Element I in der chemischen Verbindung CsI addiert, muss auch die entsprechende Menge Cs addiert werden. Mit dem Molekulargewicht M_c der chemischen Verbindung, M_e des Elements und den Stöchiometriefaktoren n_e ergeben sich die Gleichungen:

$$m'_i = m_i + \Delta m_e$$

$$m'_{ci} = m_{ci} + \frac{M_c}{n_e M_e} \Delta m_e$$

$$m'_{fci} = m_{fci} + \frac{n_f M_f}{n_e M_e} \Delta m_e$$

$$m'_{nfc i} = m_{nfc i} + f_{nf} \frac{n_f M_f}{n_e M_e} \Delta m_e$$

Im Fall einer sogenannten generischen chemischen Verbindung vereinfachen sich die Gleichungen zu:

$$m'_i = m_i + \Delta m_e$$

$$m'_{ci} = m_{ci} + \Delta m_e$$

$$m'_{eci} = m_{eci} + \Delta m_e$$

$$m'_{neci} = m_{neci} + f_{ne} \Delta m_e$$

Isotopenmasse

In diesem Fall wird die Isotopenmasse Δm_n zu dem zugehörigen Isotop n und dem Element e addiert. In Bezug auf die Änderung der chemischen Masse gilt entsprechendes wie oben. Die Gleichung für Elemente und Isotope sind:

$$m'_{eci} = m_{eci} + \Delta m_n$$

$$m'_{neci} = m_{neci} + \Delta m_n$$

In der Programmiersprache FORTRAN 90 ist es möglich, die Verzweigungen direkt als sogenannte Pointer (Zeiger) zu realisieren. Zur Dokumentation des neuen Hauptmoduls AFP wird DOXYGEN verwendet. Hiermit lassen sich die erstellten FORTRAN 90 Typen graphisch darstellen. Aus Beispiel wird die Datenstruktur des obigen Baums in Abb. 2-25 dargestellt.

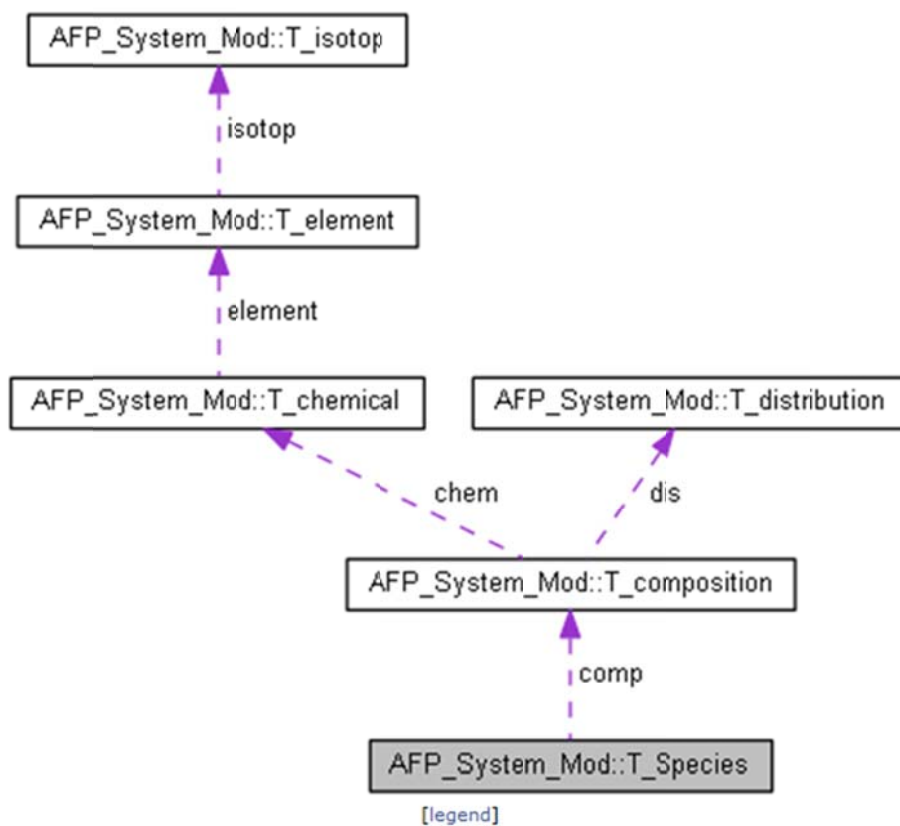


Abb. 2-25 Realisierte Datenstruktur zur Darstellung des Baums

Basierend auf dieser Datenstruktur wurden verschiedene Routinen erstellt, welche diese Datenstruktur aufbauen (z. B. Define_Composition), eine Kontrolle der Datenstruktur ermöglichen (z. B. Print_Balance_Species_Structure), gewünschte Daten auslesen (z. B. Get_Aerosol_Mass), sowie eine Manipulation des Inhalts ermöglichen (z. B. Add_Mass_to_Species_Tree). Eine detaillierte Beschreibung findet sich im Reference Manual sowie durch DOXYGEN erzeugten Manual.

2.3.2.2 Verfügbare Operatoren

Neben den oben genannten Routinen wurden Operatoren programmiert, die die sehr komplexen Rechenoperationen in der Baumstruktur in Bezug auf Massenänderungen einfach realisieren lassen.

Gleichheitszeichen (=)

Mit diesem Operator ist es möglich die gesamte Struktur der Spezies für eine bestimmte Position (Host, siehe unten) oder Verbindung (Transfer-Objekt) zu initialisieren („Null setzen“). Das Statement ist dann einfach:

```
junc_species = init_species
```

add_f

Die häufig benötigte Rechenoperation $m' = m + f \cdot \Delta m$ kann mit dieser Routine realisiert werden. Die Bilanzierung von Massenstromgleichungen der Atmosphärenverbindungen läßt sich dann wie in Abb. 2-26 dargestellt, sehr elegant realisieren. Es sei hier betont, dass mit add_f alle in AFP verwendeten Spezies behandelt werden. Somit entfallen separate Transferberechnungen so wie sie jetzt in den Routine für AERIKA, AIM und FIPHOST separat realisiert sind.

```
!      - -
!-    flow into junction
!
      Do j = 1, tr_obj(i)%n_interface
      if (tr_obj(i)%interf(j)%volume_flow < 0.d0 .and. tr_obj(i)%interf(j)%freegasvol > 1.D-10) then
        ex_rate = tr_obj(i)%interf(j)%volume_flow/tr_obj(i)%interf(j)%freegasvol
        tr_obj(i)%interf(j)%species = init_species
        call add_f (tr_obj(i)%interf(j)%species, ex_rate, tr_obj(i)%interf(j)%p_to_host%species)
        call add_f (junc_species, -1.d0, tr_obj(i)%interf(j)%species)
      else
        tot_flow_out = tot_flow_out + tr_obj(i)%interf(j)%volume_flow
      endif
    End do
!
!-    flows out of junction
!
      if (tot_flow_out > 0.d0) then
      Do j = 1, tr_obj(i)%n_interface
      if (tr_obj(i)%interf(j)%volume_flow >= 0.d0) then
        ex_rate = tr_obj(i)%interf(j)%volume_flow/tot_flow_out
        tr_obj(i)%interf(j)%species = init_species
        call add_f (tr_obj(i)%interf(j)%species, ex_rate, junc_species)
      endif
    End do
      endif
      tr_obj(i)%ldef_species_tree = .true.
    endif
  End do
```

Abb. 2-26 Auszug aus der Routine „tr_objects“ zur Berechnung der Massenströme

2.3.2.3 Verallgemeinerte Objektstruktur

Die verschiedenen Prozesse in Bezug auf das Aerosol- und Spaltproduktverhalten hängen im Wesentlichen von der Phase des Hintergrundfluids ab /KLE 12a/. Ziel ist es, die Gleichungen und Module in AFP so zu gestalten, dass die Modellierung für jede Phase einheitlich ist. Dabei werden folgende Phasen unterschieden:

- Gasförmige Volumina
Dies sind z. B. das Atmosphärenvolumen der Zonen und der sogenannten eindimensionalen Verbindungen
- Flüssige Volumina
Hier sind z. B. die Sumpfvolumina sowie die Wasserfilme zu nennen
- Oberflächen
Dies sind Wandflächen, welche zusätzlich in trockenen und nassen Wänden unterschieden werden

Somit sind die im Thermohydraulik-Hauptmodul eingeführten Objekte wie Zonen, Verbindungen, 1D-Verbindungen und Wandstrukturen nicht optimal für die einheitliche Modellierung in AFP. Daher wird in AFP eine neue Objektstruktur eingeführt. Für jedes dieser Objekte wurden separate Module implementiert. Dabei werden die Daten zwischen diesen Modulen nur über Funktionen ausgetauscht. In der FORTRAN 90 Programmierung ist es notwendig, verschiedene Ebenen einzuführen. Dabei können von Routinen in einem Modul nur Funktionen/Routinen und Daten aufgerufen werden, welche aus den Modulen in einer darunter liegenden Ebene implementiert sind. Aus diesem Grund wurden Zwischenebenen wie z. B. für „Interface-Objekte“ eingeführt, da sie von mehreren Modulen benötigt werden. Ein Überblick mit den Verknüpfungen für Gasvolumina und Verbindungen (Transfer) ist in Abb. 2-27 gezeigt.

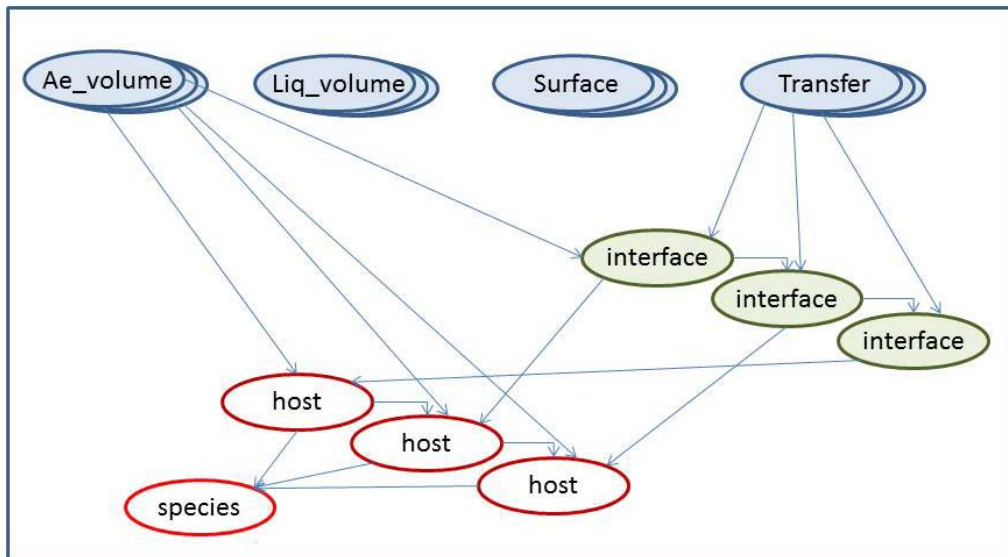


Abb. 2-27 Struktur und Verknüpfung der Objekte im AFP-Hauptmodul

Das Objekt „Species“ enthält die sogenannte Baumstruktur aller möglichen Spezies sowie deren Verknüpfung (Abb. 2-24). Für jeden Ort (z. B. Gasvolumen in einer Zone, Wasserfilm in einer Wand usw.) wird ein „Host“ Objekt definiert. Diese sind als sogenannte Kette angelegt, so dass es möglich ist zusätzliche Hosts während der Rechnung anzulegen. Die jeweiligen Objekte Gasvolumina in Ae_volume sind mit diesen Host verknüpft. Hier ist festgelegt wie dieser Ort mit den Objekten in der Thermohydraulik verknüpft ist, sowie die entsprechenden Modelle (wie für Agglomeration) aufgerufen. Für die Bilanzierung ist es notwendig die Schnittstelle zu den Verbindungen (Transfer-Objekte) zu kennen. Dies wird über spezielle Interfaceobjekte realisiert. Hier sind die Daten wie z. B. Massenstromdichten für Aerosole enthalten. Auch diese Interface-Objekte sind als Kette angelegt, da sich die Anzahl während der Rechnung ändern kann. Der Inhalt der jeweiligen Objekte ist im COCOSYS V3.0 Reference Manual /KLE 12b/ detailliert beschrieben.

2.3.3 Umgesetzte Modelle

Im Folgenden wird der Stand der Umsetzung kurz beschrieben:

- Kommunikation zwischen den Modulen
In Vorbereitung zum Austausch von PVM durch MPI wurde eine Zwischenebene zwischen den Schnittstellenroutinen in AFP und PVM realisiert. Damit kann das

PVM durch MPI ausgetauscht werden, ohne dass die Schnittstellenroutinen modifiziert werden müssen.

- Einlesen der notwendigen Geometriedaten und Randbedingungen
Die Routinen zum Einlesen der notwendigen Geometriedaten und Randbedingungen wurden umgesetzt. Dies gilt im Wesentlichen für Zonen, Verbindungen und Wandstrukturen. Ebenso wurden die Einleseroutinen zum Einlesen der Spezies entsprechend des neuen Konzepts realisiert
- Integrationsroutine FEBE
Das Integrationspaket FEBE wurde ebenfalls umstrukturiert. Dabei werden nun konsequent FORTRAN 90 Anweisungen verwendet. Weiterhin wurde das Paket so erweitert, dass es für andere Module verwendet werden kann, so dass eine mehrfache Implementation in AFP (wie jetzt für AERIKA und FIPHOST) nicht mehr notwendig ist und das Paket in AIM ersetzt werden kann.
- Strömung durch Atmosphärenverbindungen
Die entsprechenden Routinen wurden realisiert. Wie in Kap. 2.3.2.2 gezeigt, ist die einheitliche Umsetzung nun möglich.
- Agglomeration
Die Routinen zur Berechnung der Aerosolagglomeration wurden implementiert. Hierzu gehören die Berechnung der Koeffizienten sowie deren Integration über ein Gauß-Legendre-Verfahren.
- Darstellung der Aerosolgrößenverteilung mit COCPLOT
Das Programm wurde entsprechend erweitert. Dabei wird die Einteilung der Größenklassen automatisch übernommen.

2.3.4 Durchführung von Testrechnungen

Zur Überprüfung der Umsetzung wurden einfache Testrechnungen durchgeführt. In dem hier dargestellten Test mit 4 verbundenen Räumen mit jeweils 1000 m^3 (siehe Abb. 2-28) wurden Aerosole und Spaltprodukte in dem unteren Raum R1 eingespeist. Zur Überprüfung des Agglomerationsverhaltens wurde angenommen, dass die eingespeisten Aerosole sich alle in einer Größenklasse befinden, also monodispers sind.

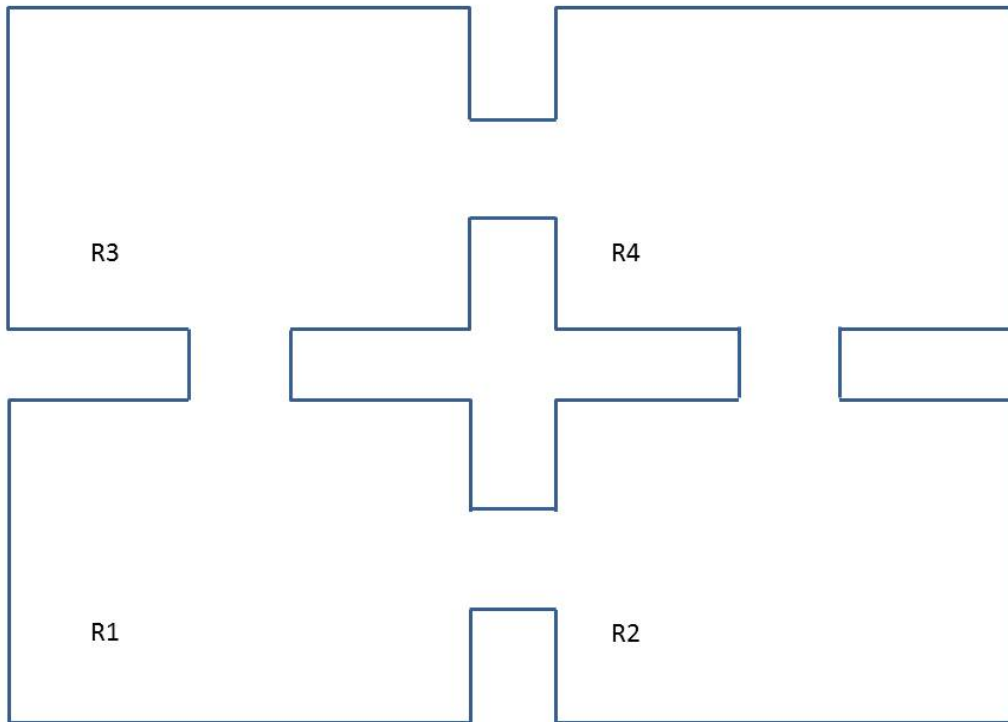
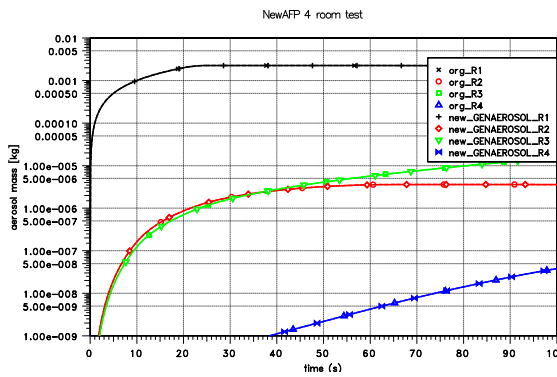
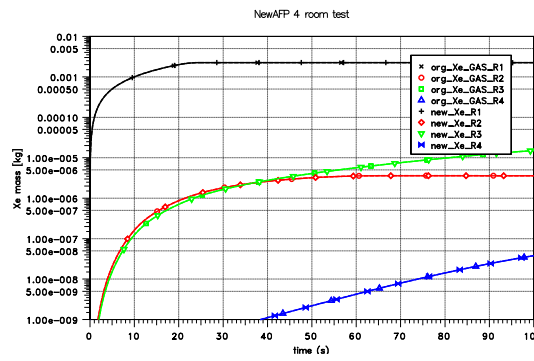


Abb. 2-28 Nodalisation des einfachen Testbeispiels

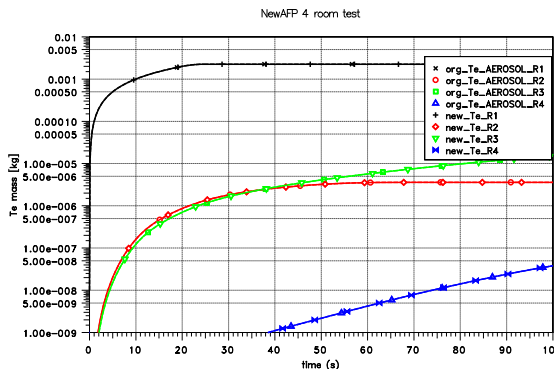
In der folgenden Abbildung wird der Vergleich zwischen dem originalen AFP aus der Entwicklerversion von COCOSYS V2.4 und dem umstrukturiereten AFP dargestellt. Da die eigentliche Modellierung nicht verändert wurde, sollten die Ergebnisse zwischen beiden Programmversionen exakt übereinstimmen. Dies wird hier für die luftgetragene Aerosolmasse, die Xenon-Masse (gasförmiges Spaltprodukt), die Tellur-Masse (aerosolförmiges Spaltprodukt) und die Aerosolgrößenverteilung im Raum 1, 2 und 4 gezeigt.



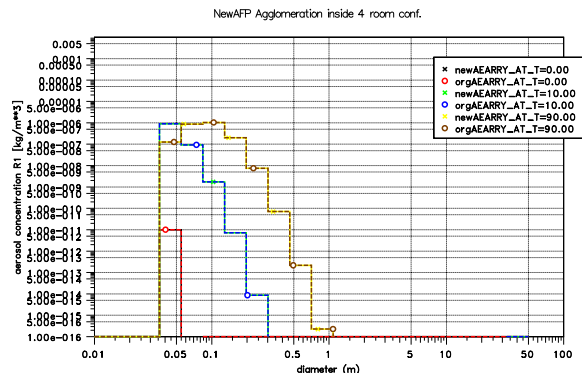
Vergleich der Aerosolmasse



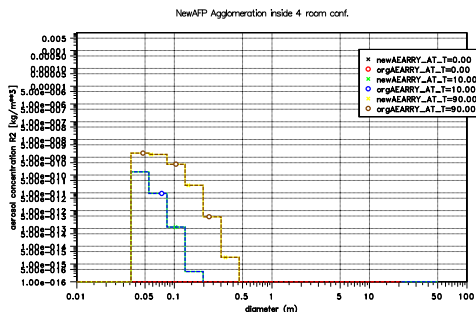
Vergleich der Xe-Masse



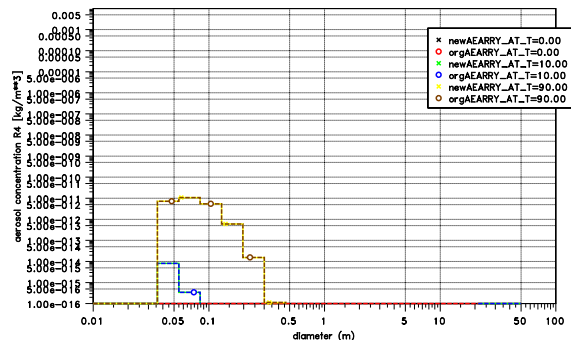
Vergleich der Te-Masse



Größenverteilung in R1



Größenverteilung in R2



Größenverteilung in R4

Abb. 2-29 Exemplarische Ergebnisse der Testrechnung

2.4 Verbesserung des pH-Wert-Modells in COCOSYS

Für einen Einsatz in COCOSYS-AIM wurden schon früher pH-Wert-Modelle überprüft und miteinander verglichen /WEB 08, SPE 09/. Es standen zur Verfügung:

- alleinstehendes Modell von F. Funke /FUN 07/, auch als AREVA-Modell bezeichnet,

- pH-Modell im Radionuklid-Teil von MELCOR /GAU 05/,
- Modell aus IMOD/LIRIC von AECL.

Die Wahl fiel auf das pH-Modell von AREVA, welches in diesem Vorhaben in die Struktur von COCOSYS-AIM integriert und im Hinblick auf seine Funktionalität anhand eines sogenannten Basisfalls überprüft wurde. Die Entscheidung für das Modell von AREVA ist u. a. auch dadurch begründet, dass ein direkter Kontakt zum Entwickler möglich ist. Das MELCOR-Modell würde prinzipiell auch die Anforderungen erfüllen. Das AECL-Modell ist aus mehreren Gründen nicht für den Einbau in COCOSYS geeignet, da u. a. weder Borsäure noch Spaltprodukte berücksichtigt werden.

Im Folgenden wird das zugrunde liegende Modell beschrieben und die jetzige Programmstruktur in COCOSYS erläutert. Außerdem werden die Ergebnisse des Basisfalls im Vergleich zum MELCOR-Modell gezeigt und es wird der pH-Wert für das PHEBUS FPT-1 Containment mit COCOSYS berechnet. Hier werden offene Fragestellungen im Zusammenhang mit der Bildung von Salpetersäure thematisiert. Für eine detaillierte Darstellung des pH-Wert-Modells in COCOSYS, s. a. /ECK 11b/.

2.4.1 AREVA-Modell

In Tab. 2-5 sind die wesentlichen Merkmale des AREVA-Modells dargestellt. Die erfassten Substanzen (Elektrolyte), die den pH im Sumpf beeinflussen, sind:

- Borsäure (H_3BO_3)
- Lithiumhydroxid (LiOH)
- Ammoniak (NH_3)
- Cäsiumhydroxid (CsOH)
- Kohlendioxid (CO_2).

Mit der Spezie CsOH kann auch in guter Näherung implizit die alkalisierende Wirkung anderer Substanzen wie Rb, D oder Ba berücksichtigt werden. Die Herkunft der Substanzen im Sumpfwasser als Beispiel für einen DWR und typische Konzentrationen sind in Tab. 2-5 näher beschrieben.

Tab. 2-5 Im pH-Wert Modell erfasste Substanzen (Beispiel DWR)

Gelöste Substanz	Herkunft	Effekt auf pH	Typische Konzentration
H₃BO₃ Borsäure	Zusatz im Primärkühlmittel zur Bindung von Überschussreaktivität bei frisch beladenen Kernen	↓	0 – 2500 mg/l
LiOH Lithiumhydroxid	Zusatz im Primärkühlmittel zur Alkalisierung zur (Korrosionsschutz, Kompensation der sauren Borsäure	↑	0 – 6 mg/l
NH₃ Ammoniak	Entsteht im Primärkühlmittel aus Hydrazin (N ₂ H ₄), das zur Sauerstoffbegrenzung eingesetzt wird.	↑	0,5 – 1,5 mg/l
CsOH Cäsiumhydroxid	Das Spaltprodukt Cs wird als Aerosol (CsI, CsOH und Cs ₂ MoO ₄) ins Containment freigesetzt, abgelagert und in den Sumpf abgewaschen. Nur CsOH wird berücksichtigt.	↑	0 – 10 mg/l
HNO₃ Salpetersäure	<ul style="list-style-type: none"> - Entsteht bei der Radiolyse der Containmentatmosphäre und wird von dort in den Sumpf gewaschen - Entsteht auch und bei der Radiolyse gelöster Luft im Sumpf 	↓	1 – 100 mg/l (dosisabhängig)
CO₂ Kohlendioxid	Entsteht bei der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. <ul style="list-style-type: none"> - Ein Teil wird direkt in den Sumpf freigesetzt - Der andere Teil gelangt zuerst in die Atmosphäre und von dort über Massentransfer in den Sumpf und die Pools 	↓	0 – 1000 mg/l (abhängig von Beton-Erosion)

Zum Vergleich der pH-Wert-Modelle von AREVA und in MELCOR wurden zuerst Rechnungen zum sogenannten Basisfall (s. Abschnitt 2.4.3) gemacht. Danach wurden der Temperatureffekt und die Effekte einzelner Elektrolyte auf den pH-Wert untersucht.

Das pH-Wert-Modell ist in den Berichten /FUN 07/ und /CRU 95/ detailliert beschrieben.

2.4.2 Modellerweiterung und Umsetzung in COCOSYS

Als wesentliche Erweiterung des AREVA Modells wird in /WEB 10/ der Einbau von Radiolyse in der Gasphase einer Zone sowie der Transport des entstandenen HNO_3 von der Gasphase direkt in den Sumpf bzw. über Ablagerung an der Wand in den Sumpf vorgeschlagen.

Die Bildung von HNO_3 durch Radiolyse in der Wasserphase wird durch das Beahm-Modell /BEA 91/ beschrieben und die entsprechende Differentialgleichung für die Konzentration von HNO_3 , C_{HNO_3} (in mol/l),

$$\dot{C}_{HNO_3,w} = 6,24 \cdot 10^{16} \cdot g D \frac{\rho_{H_2O}}{N_A}, \quad (2-18)$$

wird in afpjdimpa.f gelöst. Hierbei ist D die Dosisrate in kGy/h, ρ_{H_2O} die Dichte des Sumpfs in kg/m³, g die Zahl der HNO_3 Moleküle pro 100 eV und N_A die Avogadro-Zahl. Im AREVA Modell ist $g = 0,007/\text{kg} \cdot \text{Gy}$, in COCOSYS/AIM ist aufgrund der Untersuchungen in /HOE 10/ $g = 0,0097/\text{kg} \cdot \text{Gy}$ vorgegeben worden. Der Nutzer kann g durch Angabe von BAS1(86) bzw. BAS2(86) (bei kondensierenden Randbedingungen) im Eingabedatensatz verändern.

Die Bildung von HNO_3 in der Gasphase wird analog zu MELCOR beschrieben durch die Rate

$$\dot{C}_{HNO_3,g} = k m_{N_2} D_g, \quad (2-19)$$

in mol/(l s) mit m_{N_2} der Masse von N_2 in der Gasphase in kg, D_g der Dosisrate in der Atmosphäre in kGy/h und $k = 5,43 \cdot 10^{-3}$ in entsprechenden Einheiten. Der Nutzer kann g durch Angabe von BAS1(87) bzw. BAS2(87) (bei kondensierenden Randbedingungen) im Eingabedatensatz verändern. Die Änderung \dot{C}_g der HNO_3 -Konzentration (in mol/(l s)) in der Atmosphäre durch die genannten Transportprozesse wird dann berechnet zu

$$\dot{C}_g = \dot{C}_{HNO_3,g} - C_g \frac{1}{V_g} (k_w A_w + k_p A_p), \quad (2-20)$$

mit: V_g Volumen der Atmosphäre in m³, k_w Transportkoeffizient von der Atmosphäre an die Wand in m/s, A_w Wandoberfläche in m², k_p Transportkoeffizient von der Atmosphäre in den Pool in m/s, A_p Oberfläche Sumpf-Atmosphären Trennfläche in m². Für die weitere Entwicklung ist zunächst $k_p = 10^{-4}$ m/s. Die beiden Transportkoeffizienten k_w, k_p können vom Benutzer überschrieben werden und sollten im Rahmen einer Validierung eines weiterentwickelten Radiolysemodells anhand eventuell vorhandener Experimente fixiert werden.

In COCOSYS ist zur Zeit $k_w = 0$, d. h. es findet nur ein Transport von Salpetersäure über die Sumpfoberfläche statt. Um das Radiolysemodell signifikant weiterzuentwickeln, ist eine genauere Kenntnis der beteiligten Transportprozesse notwendig. Dies

soll in der weiteren Entwicklung in einem verfeinerten Radiolysemodell umgesetzt werden, was wiederum die abgeschlossene Umstrukturierung des AFP-Hauptmoduls erfordert.

Das Modell ist im Unterprogramm `afpdph.f` implementiert und wird innerhalb jedes AFP Zeitschrittes für jede Iod-Zone innerhalb von `afpdcalc.f` aufgerufen und berechnet anhand der Konzentrationsverteilung für den Sumpfteil den pH-Wert. Das grobe Konzept ist in /WEB 10/ dargestellt. Dieser pH-Wert bestimmt dann die H^+ Konzentration und geht so in verschiedene Reaktionen in AIM ein. Die bisherige Vorgabe eines zeitlichen Verlaufs des pH-Wertes für den Sumpfteil einer Zone ist damit nicht mehr notwendig, kann aber weiterhin optional erfolgen.

Das AREVA Modell ist insbesondere in Verknüpfung mit dem stark vereinfachenden Beahm Modell nicht für alle möglichen Sumpfzusammensetzungen gültig. Fällt der pH Wert unter einen Wert von 0,4, so bricht die Programmausführung ab und dem Nutzer wird empfohlen, für die betreffende Zone das pH Modell zu deaktivieren und den zeitlichen Verlauf des pH-Wertes für diese Zone in Tabellenform vorzugeben.

Die in COCOSYS/AIM verwendeten Reaktionskonstanten für die Ablagerung von I^- auf Oberflächen /WEB 09/ sind abhängig vom pH Wert und verlieren für kleine pH-Werte ihre Gültigkeit. Wird der pH-Wert zu klein, werden die entsprechenden Reaktionen nicht weiter berücksichtigt und es wird in der Ausgabe eine Warnung verzeichnet. Auch hier kann der Nutzer den pH-Wert ggf. wieder in Tabellenform vorgeben.

2.4.3 Beispielrechnungen

Für die Beispielrechnung wurde ein sogenannter Basisfall erstellt. Nacheinander werden die Substanzen Borsäure, CsOH, HNO_3 und CO_2 in den Sumpf freigesetzt, s. a. Tab. 2-6. Dadurch ist gewährleistet, daß die Wirkung jeder einzelnen Substanz auf den pH-Wert erfasst wird. Mit dem alleinstehenden AREVA-Modell konnten nur konstante Zusammensetzungen gerechnet werden, durch die Integration in COCOSYS/AIM-3 ist es nun möglich, transiente Vorgänge während der Einspeisung zu berechnen. Es zeigt sich, daß das pH-Wert Modell von AREVA korrekt in COCOSYS/AIM-3 implementiert ist, da eine Übereinstimmung zwischen den beiden gezeigt werden kann.

Als Basisfall wurde ein Reaktorsumpf in einen DWR-Containment unter Unfallbedingungen mit Schmelze-Beton-Wechselwirkung grob angenommen. Das Sumpfvolumen

beträgt 2000 m^3 , das Containmentvolumen 70.000 m^3 , die Temperatur $T = 100 \text{ }^\circ\text{C}$ und der Druck $p = 1,06 \text{ bar}$. Die Reihenfolge und die Konzentration, in der die Substanzen eingespeist werden, entspricht in etwa jener in einem Reaktorunfall.

Tab. 2-6 Einspeisung in den Sumpf und berechneter pH-Wert bei $T = 100 \text{ }^\circ\text{C}$

Einspeisung in den Sumpf				Berechneter pH-Wert	
Substanz	Zeit nach Einsp., h	Masse, kg	Konzentration, mol/l	AREVA-Modell	MELCOR
Wasser, Neutralpunkt bei $100 \text{ }^\circ\text{C}$	2 - 5	$2 \cdot 10^6$	---	6,144	6,138
+ Borsäure	6 - 8	$22,8 \cdot 10^3$	$1,85 \cdot 10^{-1}$	4,66	4,94
+ CsOH	13 - 15	337,2	$1,09 \cdot 10^{-3}$	6,37	6,9
(+Dosis) HNO_3	18 - 25	18,3	$1,5 \cdot 10^{-4}$	6,34	6,89
+ CO_2	28 - 30,5	52,6	$5,98 \cdot 10^{-4}$	6,12	6,72

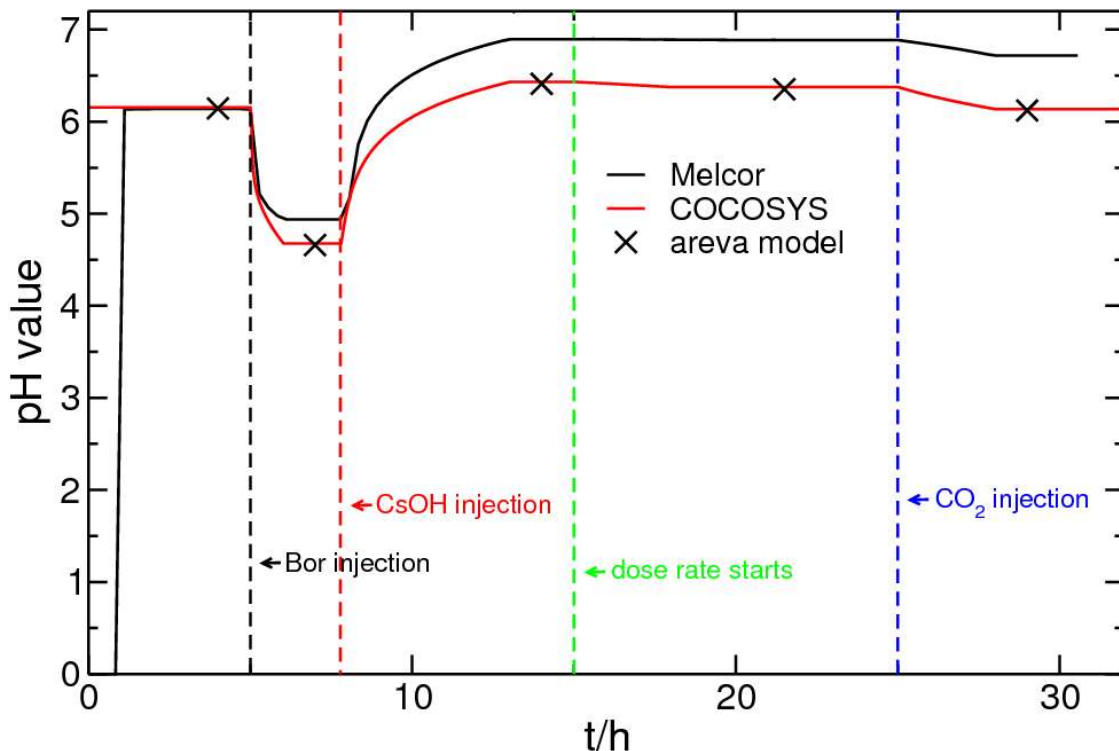


Abb. 2-30 pH-Verlauf im Basisfall für $T = 100 \text{ }^\circ\text{C}$

Abb. 2-30 zeigt den berechneten pH-Verlauf für den Basisfall. Der Neutralpunkt bei $100 \text{ }^\circ\text{C}$ stimmt in beiden Modellen gut überein (AREVA: $\text{pH}_N = 6,144$; MELCOR: $\text{pH}_N = 6,138$).

Mit dem AREVA-Modell wird der Sumpf generell saurer berechnet als mit MELCOR. Im Wesentlichen trägt dazu die unterschiedlich berechnete Wirkung der Borsäure (vgl. Tab. 2-6 bzw. Abb. 2-30) bei.

$$\text{AREVA: } \Delta\text{pH} = 4,661 - 6,144 = -1,48 \quad (\text{Borsäure})$$

$$\text{MELCOR: } \Delta\text{pH} = 4,938 - 6,138 = -1,2 \quad (\text{Borsäure})$$

Auch die Wirkung der starken Base CsOH (vgl. Tab. 2-6 bzw. Abb. 2-30) ist etwas unterschiedlich.

$$\text{AREVA: } \Delta\text{pH} = 6,372 - 4,661 = 1,71 \quad (337 \text{ kg CsOH})$$

$$\text{MELCOR: } \Delta\text{pH} = 6,9 - 4,938 = 1,96 \quad (337 \text{ kg CsOH})$$

Im AREVA-Modell und in MELCOR wird die Salpetersäuremenge im Sumpf unterschiedlich berechnet. Im AREVA-Modell wird pauschal angenommen, daß HNO_3 nur im Sumpf gebildet wird. Tatsächlich wird HNO_3 auch in der Gasphase gebildet. Durch radiolytische Prozesse entstehen in der Luft Stickoxide, die mit der vorhandenen Feuchtigkeit HNO_3 -Tröpfchen bilden, die sich ablagern oder durch Massentransfer in ablaufende Wasserfilme oder direkt in den Sumpf gelangen. In MELCOR sind die HNO_3 -Produktion in der Gasphase und der Transport in den Sumpf vereinfacht modelliert. Für den Vergleich wurden in beiden Rechnungen die gleichen HNO_3 -Menge eingestellt.

Beispiele für die Temperaturabhängigkeit des pH Modells sind in /ECK 11b/ gezeigt.

2.4.4 PHEBUS FPT-1

Um das Modell weiter zu überprüfen wurde der Datensatz zum PHEBUS FPT-1 Experiment in der Fassung vom 22.10.2010 gewählt. Die Anfangskonzentration im Sumpf beträgt 24,0 g/l Borsäure und 0,0089 g/l NaOH bei einer Sumpftemperatur von $T = 90 \text{ }^\circ\text{C}$. Experimentell wurde ein pH-Wert von 4,92 bei $27 \text{ }^\circ\text{C}$ ermittelt. Für die COCOSYS-Rechnung wurde NaOH durch die AIM Komponente LiOH dargestellt. Bei Sumpftemperatur ergibt die Rechnung für die gewählten Anfangsbedingungen einen pH-Wert von 4,92 bei Sumpftemperatur bzw. 4,69 bei $27 \text{ }^\circ\text{C}$. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Rechnung mit dem Experiment.

Der zeitliche Verlauf des pH-Wertes (kleines Diagramm in Abb. 2-31) stimmt in der Folge nicht mit dem Experiment überein: Dort zeigt sich kein so deutlicher Abfall des pH-Wertes im dargestellten Zeitraum. Wird das Radiolysemodell in COCOSYS deaktiviert, so bleibt der pH-Wert auf seinem Anfangswert stehen. Die Bildung von Salpetersäure im Sumpf und in der Gasphase führt dazu, daß der pH-Wert des Sumpfes viel zu sauer berechnet wird. Dies liegt an der fehlenden Bilanzierung der Substanzen zwischen dem Thermohydraulik- und dem AFP-Teil in COCOSYS, s. a. Abb. 2-31. Durch den den fehlenden Umsatz von N_2 bei der Radiolysereaktion wird über die Zeit zuviel Salpetersäure gebildet und der pH-Wert fällt zu stark ab. Die fehlende Bilanzierung wird innerhalb der Neustrukturierung des AFP-Teils ergänzt.

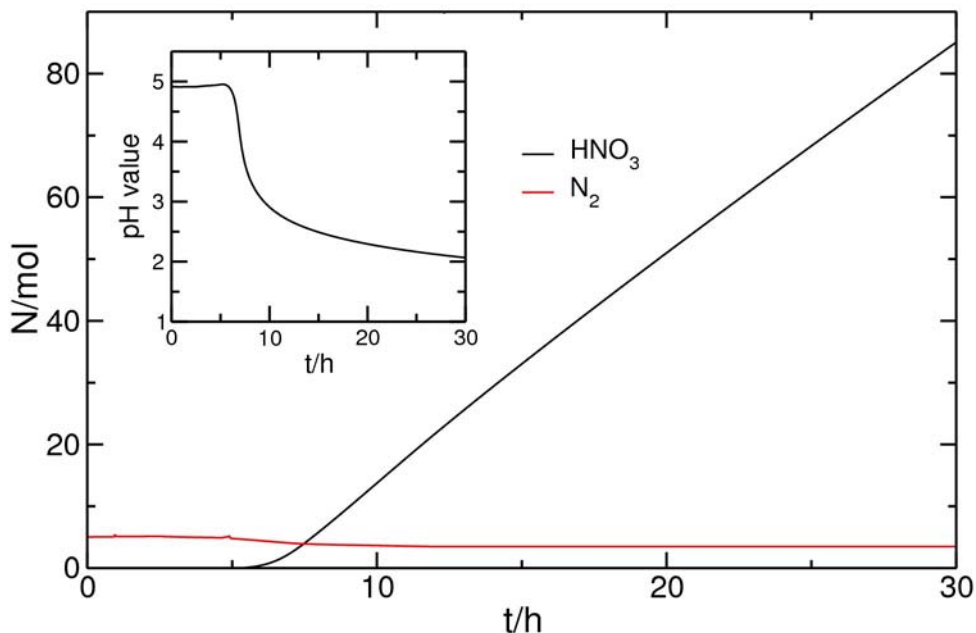


Abb. 2-31 Stoffmenge der bei der Radiolyse beteiligten Substanzen. Kleines Diagramm: Zeitlicher Verlauf des von COCOSYS berechneten pH-Wertes für das PHEBUS FPT-1 Experiment

3 Verbesserungen von Modellen für das Schmelzeverhalten im Sicherheitsbehälter in COCOSYS

Ein kurzer Überblick über COCOSYS wurde Eingang zu Kapitel 2 gegeben. In diesem Kapitel werden die Arbeiten zu Modellverbesserungen für die folgenden Phänomene beschrieben:

- Freisetzung der Schmelze aus dem RDB unter Druck und direkte Beheizung des Sicherheitsbehälters (engl.: "Direct Containment Heating" = DCH) durch fragmentierte und suspendierte Schmelze sowie Ablagerung dieser außerhalb der Reaktorgrube,
- Wechselwirkung einer größeren Schmelzeansammlung (Pool) mit Wand- und/oder Bodenstrukturen aus Beton (Schmelze-Beton-Wechselwirkung, engl.: "Molten Corium Concrete Interaction" = MCCI) innerhalb des Sicherheitsbehälters,
- Spaltproduktfreisetzung aus dem Schmelzepool in einer Reaktorgrube,
- Kontakt des Schmelzepools in einer Reaktorgrube mit (von oben) eingespeistem Wasser (Flutung).

Zielsetzung der durchgeführten Arbeiten war es, unter Einbezug aktueller experimenteller Forschungsarbeiten die Modelle für die genannten Phänomene in COCOSYS zu vervollständigen bzw. zu verbessern.

Für DCH wurde kürzlich die umfangreiche experimentelle Datenmatrix an der Karlsruher DISCO-Anlage mit Experimenten für Konvoi-Verhältnisse der Reaktorgrubengeometrie erweitert (DISCO-KH-Versuche). Des Weiteren stehen Einzeleffekt-Experimente zur Wasserstoffverbrennung unter DCH-Bedingungen in zwei unterschiedlichen Längenmaßstäben im Vergleich zum Design eines Europäischen Druckwasserreaktors (EPR) für Auswertungen zur Verfügung: DISCO-G, Maßstab 1:18 und DISCO-GL, Maßstab 1:7.

Für MCCI stehen neue Erkenntnisse aus dem OECD-MCCI2-Programm für die Modellentwicklung zur Verfügung. Dort wurde speziell die Zerstörung des Betons an Seitenwänden und Boden durch einen oxidischen Schmelzepool, also in einer zweidimensionalen Versuchskonfiguration (2D-MCCI) sowie der Einfluss einer Flutung der Schmelze von oben mit Wasser untersucht. Weitere Versuchsdaten zu 2D-MCCI stehen aus Experimenten in der VULCANO-Anlage bei CEA Cadarache, Frankreich, zur Verfügung.

Mit klein-maßstäblichen Versuchen wurden Untersuchungen zur Schichtung von Schmelzen und zu 2D-MCCI in der Versuchsanlage von AREVA Erlangen durchgeführt.

Weitere Phänomene, die für die Reaktorsicherheit im Zusammenhang mit dem Schmelzeverhalten im Sicherheitsbehälter relevant sind, aber in diesem Vorhaben nicht behandelt werden, sind:

- Ausbreitung größerer Schmelzeansammlungen im Sicherheitsbehälter. Schmelzeausbreitungen können als Teil der Anlagenauslegung (wie z. B. beim EPR) oder als Konsequenz im konkreten Unfallablauf (z. B. nach weitreichender, seitlicher Erosion der Schmelze in der Reaktorgrube bis zur Penetration seitlicher Wände) auftreten. Die zu diesem Phänomen gehörende „Issue“ wurde im Rahmen des 5. EU-Forschungsrahmenprogramms geschlossen. Es stehen ausreichend validierte Modelle zur Verfügung. COCOSYS beinhaltet eine Schnittstelle zu dem GRS-Ausbreitungscode LAVA, mit dem Grenzsituationen für die Ausbreitung (hohe Viskosität der Schmelze, kleiner Volumenstrom) analysiert werden können. Im nächsten Entwicklungsvorhaben für COCOSYS und ASTEC soll die Anbindung von LAVA in den beiden Codes verbessert werden, mit der Zielsetzung, das EPR-Konzept zur Stabilisierung einer Kernschmelze im Kernfänger durchgängig simulieren zu können.
- Absturz der Schmelze in tiefe Wasservorlagen, wie in einigen SWR möglich (z. B. in Schweden) oder auch in Anlagen, die auf die RDB-Außenkühlung setzen, nach einem unterstellten Versagen dieser (z. B. AP-1000 und ähnliche). Hierbei sind folgende Einzelvorgänge möglich:
 - Dampfexplosion,
 - Fragmentierung der Schmelze und Bildung eines Schüttbettes,
 - Kühlung eines wasserumströmten Schüttbettes.

Für diese Phänomene hat das Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) Stuttgart seit mehreren Jahren detaillierte mechanistische Modelle entwickelt. Eine Aufbereitung dieser Modelle für die zukünftige Anbindung an COCOSYS ist seitens des IKE in Planung.

3.1 DCH-Modellierung

Versagt bei einem Unfall der Reaktordruckbehälter (RDB) unter erhöhtem Innendruck, wird die Kernschmelze (Corium) zusammen mit dem Gasinventar des Reaktorkreislaufes aus dem RDB über die Reaktorgrube in den Sicherheitsbehälter beschleunigt freigesetzt (Abb. 3-1). Die vom Gas mitgerissenen, fein fragmentierten, heißen metallischen Schmelzeanteile können mit dem ausgetragenen Wasserdampf aus dem Primärkreis reagieren und kurzzeitig größere Mengen Wasserstoff bilden. Verbrennungsvorgänge des so produzierten Wasserstoffs (wenn brennbare Zustände lokal vorliegen) und auch die Reaktion von noch nicht oxidierte metallischer Schmelze mit dem Luft-sauerstoff können zu beträchtlichen lokalen Energiefreisetzungsraten führen. In jedem Fall gibt es einen beträchtlichen direkten Energieübertrag von der fein verteilten, gasgetragenen Schmelze an die Atmosphäre. Der schnelle Druckanstieg im Containment hängt u. a. vom Druck im RDB zum Versagenszeitpunkt, von der Menge des Schmelzeaustrags, vom transienten Blowdown-Vorgang und von den Zuständen in der Containment-Atmosphäre, wie z. B. der Gaszusammensetzung, ab.

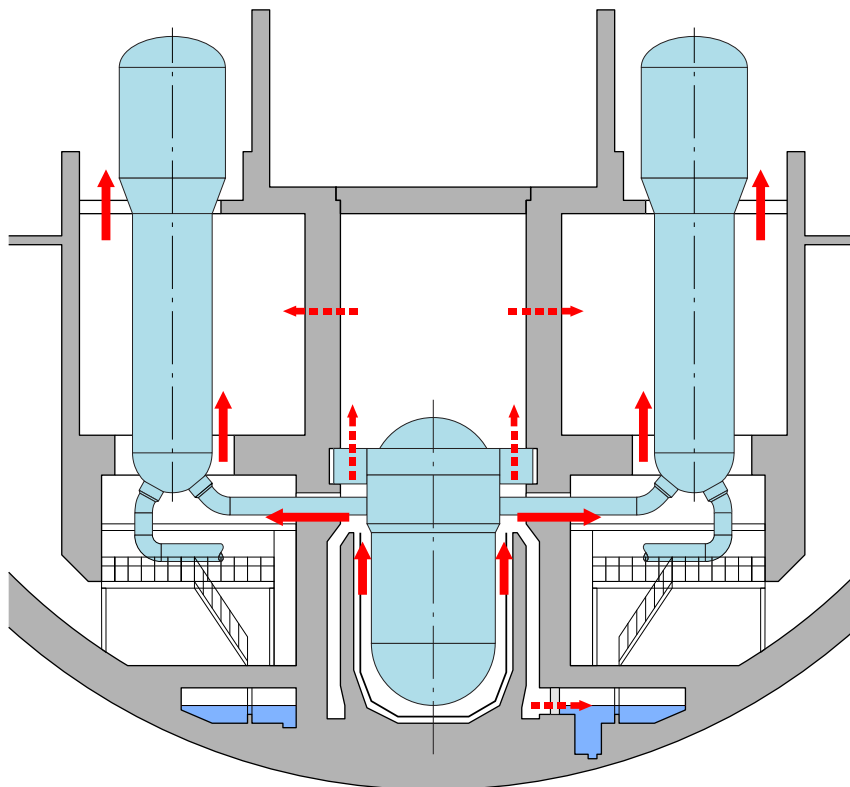


Abb. 3-1 Schematische Darstellung möglicher Abströmungswege für das Gas-/Schmelzegemisch bei einem Blowdown nach RDB-Versagen in einer Konvoi-Reaktoranlage *)

*) - Die Abdichtung in der RDB-Tragkonstruktion behindert den direkten Strömungsweg aus der Reaktorgrube nach oben, Klappen im Tragschild sowie Wasser im Sumpf behindern diesen im unteren Bereich (Bildquelle: L. Meyer, Karlsruher Institut für Technologie)

Zur Simulation der Vorgänge bei DCH steht in COCOSYS aus vorlaufenden Entwicklungsarbeiten in RS 1152 und RS 1159 eine spezielle Modellerweiterung zur Verfügung /SPE 06/. Diese Modellerweiterung, die sich in wesentlichen Zügen an dem Modell des U.S.-amerikanischen Rechenprogramms CONTAIN anlehnt, hat sich in einer Basisabsicherung sowie in gemeinschaftlich im internationalen Verbund von SARNET durchgeführten Untersuchungen als prinzipiell geeignet für die Berechnung wichtiger Größen wie z. B. des maximalen Druckaufbaus im Sicherheitsbehälter während DCH oder der resultierenden örtlichen Verteilung der Schmelze im Sicherheitsbehälter erwiesen.

Die Modellierung setzt auf zwei Kernprozessen für die Wirkung von DCH auf:

1. Die Beschreibung des Austrags von fein fragmentierter Schmelze aus der engen Reaktorgrube in größere Raumbereiche des Sicherheitsbehälters, wo die Schmelzepartikel längere Zeit mit großem Oberfläche-zu-Volumenverhältnis mit dem Gasstrom bzw. mit der Behälteratmosphäre wechselwirken.
2. Die Verbrennung von mit dem Gas-Schmelze-Gemisch in große Raumbereiche einströmendem Wasserstoff bzw. die Verbrennung von bereits vorvermischem Wasserstoff in der Behälteratmosphäre, der bei Freisetzung der Schmelze gezündet wird.

Zu diesen beiden Kernprozessen wurden weitere Untersuchungen in diesem Vorhaben angestellt.

3.1.1 Modellierung des Schmelzeintrags in die Gasströmung (Entrainment)

Die zentrale Fragestellung bei der Modellierung des Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube bezieht sich auf das Entrainment, d. h. die Aufwirbelung und Dispersion von zunächst am Boden abgelagerter Schmelze durch die Gasströmung in der Reaktorgrube. Als Quelle für die aufgewirbelte Schmelze berücksichtigt das Modell den Mittriss von Schmelze am Boden der Reaktorgrube, d. h. nur im unteren Bereich der Reaktorgrube gibt es im Modell eine Quelle für die Feldvariable der atmosphärisch getrage-

nen Schmelzemasse m_{atm} (Abb. 3-2). Entsprechend der Annahmen im Modell wird Schmelze zunächst einphasig oder zusammen mit dem Gas aus dem RDB freigesetzt (Annahme: Versagen am tiefsten Punkt des RDB) und in der Reaktorgrube (lower cavity) am Boden abgelagert. Nach Durchbruch des Gases wird Schmelze durch die Gasströmung aufgewirbelt und in den oberen Bereich (upper cavity) der Grube mitgerissen (entrainment). Dort ist – abhängig von der Konstruktion der Reaktorgrube – ein Austrag nach oben oder in Seitenräume der Anlage möglich. Die Ablagerung von Schmelze (deposition), die in allen COCOSYS-Zonen simuliert wird, wird auf den Einfluss von Schwerkraft mit der Gravitationsbeschleunigung g zurückgeführt.

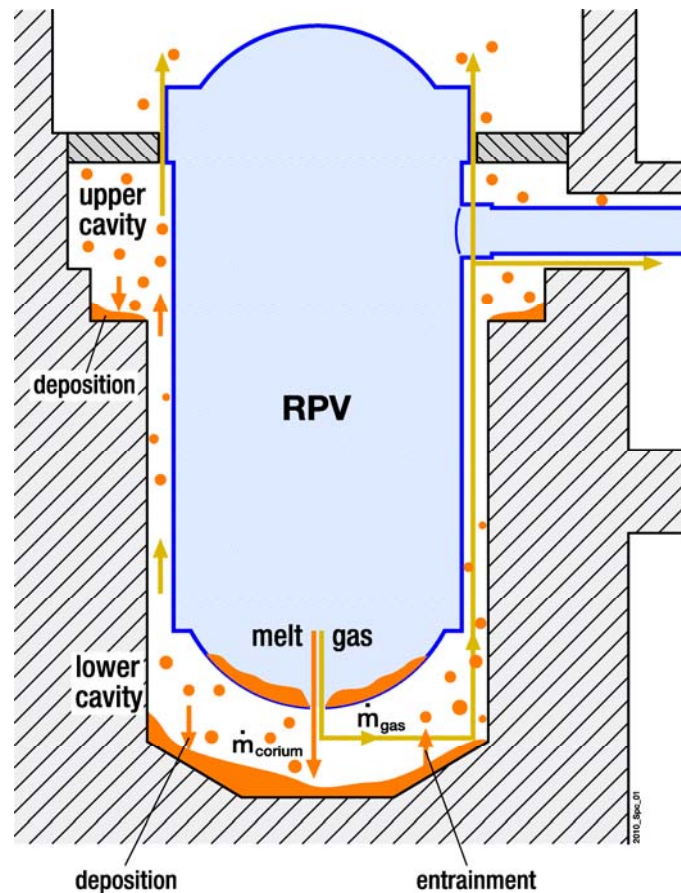


Abb. 3-2 Schematische Darstellung der simulierten Phänomene bezüglich des Transports von Gas und Schmelze in einer Reaktorgrube; Annahme: zentrales RDB-Versagen am tiefsten Punkt

Wie bereits in /SPE 06/ dargelegt setzt nach derzeitigem Wissen das Entrainment erst bei bestimmten Bedingungen ein. Hierzu wird in COCOSYS eine kritische Kutateladze-Zahl Ku geprüft;

$$Ku = \frac{\rho_g v_g^2}{\sqrt{g \rho_l \sigma}} \quad (3-1)$$

diese beschreibt das dimensionslose Verhältnis von dynamischer Kraft der Gasströmung in der Reaktorgrube (als Maß für die Scherkräfte an der Schmelzeoberfläche) im Vergleich zur Oberflächenspannung σ der Schmelze, wenn als charakteristische Länge die Kapillarlänge ($\sqrt{\sigma/g\Delta\rho}$) der Schmelze angenommen wird. In der Literatur gibt es verschiedene Experimente mit stationären Ringströmungen (mit Wasser/Luft) in vertikalen Rohren, bei denen Korrelationen für die Entrainment-Rate $\dot{\epsilon}$ (kg/s) für den Fall, dass die kritischen Bedingungen für das Entrainment erfüllt sind, ermittelt wurden. Hierbei wurde oft der naheliegende Zusammenhang

$$\dot{\epsilon} \propto v_g^2 \quad (3-2)$$

ermittelt, der die Entrainment-Rate proportional zur Scherkraft an der Schnittstelle zwischen Atmosphäre und Schmelze ansetzt. Weitere physikalische Größen, die in die verschiedenen, in der Literatur bekannten Entrainment-Raten-Korrelationen eingehen, sind: die Oberflächenspannung σ der Flüssigkeit, die Dichten von Flüssigkeit bzw. Gas $\rho_{l,g}$ und die Viskosität der Flüssigkeit η_l .

Die bekannten Experimente in der Reaktorsicherheit zum Austrag von Schmelze aus dem RDB unter hohem Druck bzw. DCH sind aber integrale Experimente (Beispiel: DISCO beim KIT). Der Vorgang des Entrainments wurde hier nicht isoliert beobachtet bzw. gemessen, sondern nur das integrale Ergebnis aller beteiligten Phänomene, z. B. der integrale Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube. Ferner sind die Geometrie der Versuchsanordnung, die sich an Verhältnissen in realen Reaktoranlagen orientiert, und die Strömungsverhältnisse in dem Bereich, wo der Vorgang des Entrainments vermutet wird (Reaktorgrube), sehr viel komplexer als bei den klassischen Ringströmungsexperimenten in vertikalen Rohren. Die folgenden Fragen können also nach derzeitigem Kenntnisstand nicht beantwortet werden:

1. Zu welchem Anteil ist das Entrainment, d. h. die Ablösung von Flüssigkeitstropfen aus dem Schmelzefilm an den Wänden, ursächlich für den Austrag von Schmelze aus der Grube? Schmelze kann auch auf anderem Weg, nämlich in Form der Filmströmung aus der Reaktorgrube ausgetrieben werden. Dies ist insbesondere für Experimente relevant, bei denen eine Strömungsverbindung im unteren Bereich

der Reaktorgrube existiert, z. B. für die DISCO-Experimente in der Geometrie der französischen P4-Reaktoren. Der Teil der Schmelze, der über diesen Vorgang in nicht-fragmentierter (flüssiger) Form aus der Reaktorgrube ausgetragen wird, bildet in der Folge nur geringes Potential für DCH und wird vermutlich im angrenzenden Raum eingefangen werden.

2. Inwiefern kann der tatsächlich vorkommende Entrainment-Vorgang in Reaktoranlagen im Bereich der Reaktorgrube auf dieselben Mechanismen wie in den vertikalen Ringströmungsexperimenten zurückgeführt werden? Hier fehlt sowohl die isolierte Beobachtung wie auch die Messung des Entrainment-Vorgangs als auch eine ausreichende Parametrierung der Versuchsmatrix im Hinblick auf die Stoffdaten (z. B. Oberflächenspannung, Viskosität), um die Relevanz einer klassischen Entrainment-Raten-Korrelation auch für Reaktorbedingungen nachzuweisen.
3. In der Reaktorgrube gibt es sowohl Entrainment als auch – simultan dazu – Ablagerung bzw. Einfang von Schmelze. Mögliche Modelle dazu können nur im Hinblick auf ihren kombinierten Effekt, dem Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube, überprüft werden.
4. Letztlich spielt auch der Versagensort des RDB – im tiefsten Punkt der Bodenkalotte oder seitlich – eine wesentliche Rolle bezüglich der zu betrachtenden Phänomene.

Angesichts dieser Unsicherheiten wird für die Modellierung in COCOSYS auf die fundamentale Beziehung (3-2) zurück gegangen. Dies ist in Übereinstimmung mit einem Vorschlag aus /WIL 96/, bei dem der integrale Anteil F_d von während des Blowdown aus der Reaktorgrube ausgetragener Schmelze (bezogen auf die insgesamt aus dem RDB frei gesetzte Schmelze) proportional dem Produkt aus Kutateladze-Zahl Ku und Blowdown-Zeit t_b vermutet wird:

$$F_d \sim Ku t_b \quad (3-3)$$

In Übereinstimmung mit diesem Vorschlag wird für das Modell in COCOSYS die Hypothese aufgestellt, dass das integrale Verhältnis F_d von aus der Reaktorgrube ausgetragener (dispergierter) Schmelze M_{disp} zur gesamten aus dem RDB freigesetzten Schmelzemasse M_{tot} mit dem Integral über die quadrierte Gasgeschwindigkeit korreliert:

$$F_d = \frac{M_{\text{disp}}}{M_{\text{tot}}} \propto \int v_g^2 dt \quad (3-4)$$

Das Entrainment erfolgt im mechanistischen Sinn aufgrund der Scherkraft, die auf die Flüssigkeitsoberfläche A_l einwirkt. Hierzu ist eine charakteristische Gasgeschwindigkeit zu ermitteln. Eine weitere Unsicherheit stellt hierbei folgende Frage dar:

Wie ist eine mittlere Gasgeschwindigkeit zu bestimmen, mit der die Gasströmung auf den Flüssigkeitsfilm mit welcher Oberfläche A_1 effektiv einwirkt?

Diese Unsicherheit wird folgenderweise behandelt: Der von COCOSYS berechnete, aus der Reaktorgrube abströmende Volumenstrom wird auf die kleinstmögliche Querschnittsfläche entlang des Strömungsweges projiziert. Die dort so ermittelte Geschwindigkeit ist für den Blowdownvorgang eine obere Abschätzung, also konservativ im Sinne eines maximalen Schmelzeaustrages aus der Reaktorgrube, und die Vorgabe für den Anwender ist eindeutig, nämlich die kleinste Fläche heranzuziehen. Es verbleibt die Frage nach der Größe A_1 der Schmelzeoberfläche auf die später zurückgekommen wird. Die insgesamt ausgetragene Schmelzemasse akkumuliert sich demnach also aus differenziellen Mengen $\sim v_g^2 dt$. Dies konnte sehr gut anhand der DISCO-Experimente, z. B. der Serie DISCO-„D“ /MEY 06/ mit Wasser als Simulatschmelze, nachgewiesen werden (Abb. 3-3).

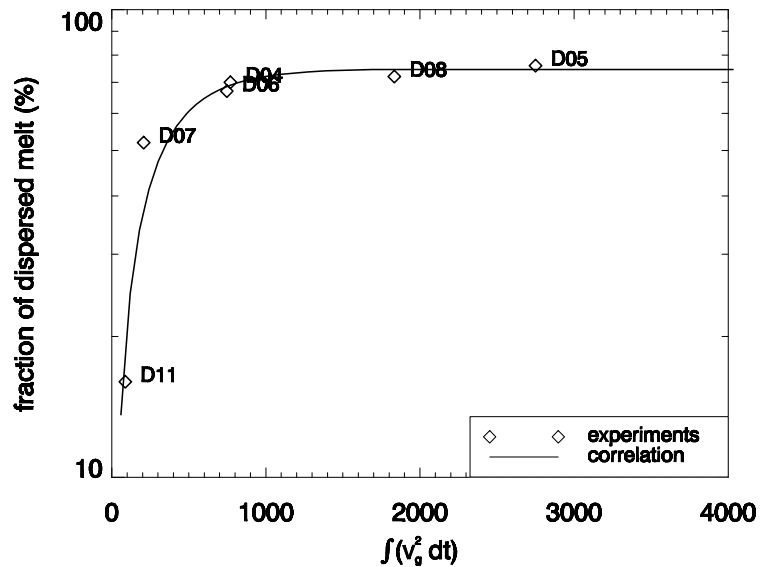


Abb. 3-3 Der integrale Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in den DISCO-Versuchen D04, D05, D06, D07, D08, D11 korreliert mit dem Integral über der quadrierten Gasgeschwindigkeit

Auch für andere „kalte“ (d. h. mit Flüssigkeiten bei Umgebungstemperatur durchgeführte) Versuchsserien am DISCO-Versuchsstand (z. B. mit einer Bismut-Legierung mit großer Dichte $\rho = 9104 \text{ kg/m}^3$) konnte eine Korrelation derselben Form (3-5) abgeleitet werden.

$$F_d = F_{d,\max} \left[1 - \exp \left(- \frac{\int_0^t v_g^2 dt'}{\xi} \right) \right] \quad (3-5)$$

Alle Experimente, die mit ein und demselben Schmelzematerial in derselben Geometrie (z. B. Konvoi, oder für den französischen P'4 Reaktor) durchgeführt worden sind, können hinsichtlich des integral erzielten Austrags von Schmelze aus der Grube mit diesem Ausdruck mit zwei konstanten Parametern $F_{d,\max}$ und ξ basierend auf der in COCOSYS (ohne Berücksichtigung von Entrainment) berechneten Gasgeschwindigkeit in der Reaktorgrube korreliert werden. Unter Kenntnis des Integrals (3-5) kann gezeigt werden, dass für kleine Zeiten unter vereinfachten Annahmen /SPE 10/ die Entrainment-Rate mit dem Ausdruck

$$\dot{\varepsilon}(t \ll 1) \approx M_{\text{cav}}(t) \frac{F_{d,\max}}{\xi} v_g^2 \quad (3-6)$$

angenähert werden kann. Die beiden Parameter $F_{d,max}$ und ξ variieren hierbei je nach Geometrie und Schmelzmaterial und sollten in der korrelativen Auswertung zu einem einzigen Parameter zusammengefasst werden. Parametrische Testrechnungen mit diesem zeitabhängigen Ansatz für die Entrainment-Rate im COCOSYS-Modell zeigten, dass der so verbliebene Parameter noch zu einem erheblichen Anteil abhängig von der Dichte der Schmelze ist. Für das Entrainment-Modell in COCOSYS wurde daher schlussendlich der Einfluss der Dichte folgenderweise herausgerechnet:

$$\dot{\varepsilon}(t) \approx K_c \frac{M_{cav}(t)}{\rho} v_g^2(t) \quad (3-7)$$

Dieser neu eingeführte Parameter K_c ist nun im Prinzip mit den oben genannten Unsicherheiten behaftet. Bereits die korrelative Auswertung des maximalen Schmelzeausstrags mit (3-5) zeigt, dass der Parameter prinzipiell abhängig von der Anlagengeometrie und von Stoffwerten ist, wobei in den parametrischen Rechenergebnissen zu (3-7) nur noch eine schwache Abhängigkeit von der Dichte fest gestellt werden konnte. Die so fest gelegte Entrainment-Rate (kg/s) skaliert mit dem Volumen der fließenden Schmelze in der Reaktorgrube, eine Berechnung der Schmelzeoberfläche A_l ist in diesem Ansatz nicht nötig.

Unter der Annahme, dass (3-7) eine gute Annäherung an die Versuche erlaubt, ist für eine adäquate Berechnung der Entrainment-Rate $\dot{\varepsilon}(t)$ eine genaue Berechnung der Gasgeschwindigkeit $v_g(t)$ in der Reaktorgrube nötig, die in dieser Gleichung quadratisch eingeht. Dies wurde anhand der DISCO-Versuche L04 und L05 überprüft. In diesen Versuchen wurde nur Gas aus dem RDB ausgeblasen, d. h. es gab keine komplexe Wechselwirkung zwischen Schmelze- und Gasströmung. Abb. 3-4 zeigt, dass die Gasgeschwindigkeiten während des einphasigen Blowdown beim Experiment L05 (ohne Ausblasen einer flüssigen Schmelze) von COCOSYS korrekt wiedergegeben werden.

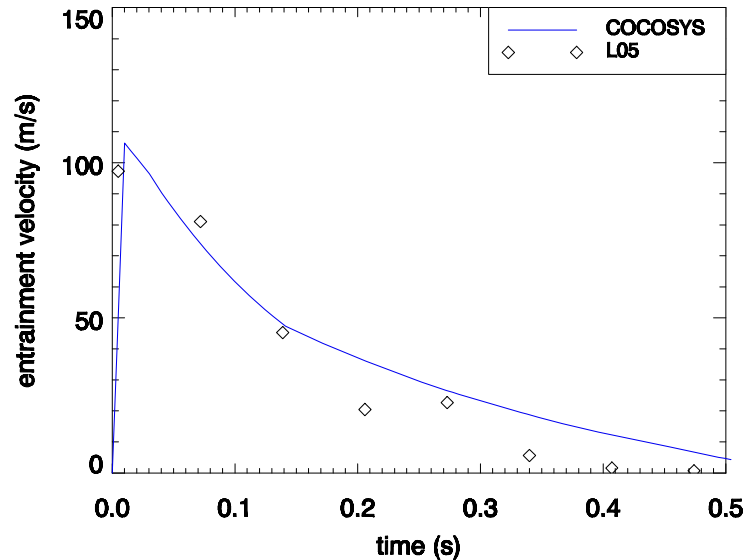


Abb. 3-4 Überprüfung der mit COCOSYS berechneten Gasströmungsgeschwindigkeiten im Ringspalt zwischen RDB und Grubenwand im Vergleich zum „trockenen“ Blowdown-Experiment DISCO-L05 (ohne Schmelzesimulation)

Das beschriebene Modell (3-7) in COCOSYS wurde auf verschiedene integrale DCH-Experimente (unter Verwendung eines flüssigen, heißen Schmelzesimulats und Wasserdampf) in der Karlsruher DISCO-Anlage angewandt /SPE 10/. In den Experimenten wurden die Reaktorgruben von Konvoi (DISCO-KH), EPR (DISCO-H) und französischem P'4-Reaktor (DISCO-FH) nachgebildet. In allen genannten Experimenten wurde ein Versagen des RDB an der tiefsten Stelle des RDB unterstellt. Dabei wurde der offene Modellparameter K_c in der Korrelation für die Entrainment-Rate (3-7) empirisch an die verfügbaren Experimente (sowohl mit kalten als auch mit heißen Schmelzesimulaten) in den verschiedenen Geometrien angepasst. Insgesamt wurden zufriedenstellende Übereinstimmungen der integral ausgetragenen Schmelzeanteile F_d und der maximalen Drücke P_{max} im Vergleich zu den Messdaten erzielt (vgl. Tab. 3-1 und Abb. 3-5 am Beispiel der DISCO-Versuchsserie „H“ für den EPR).

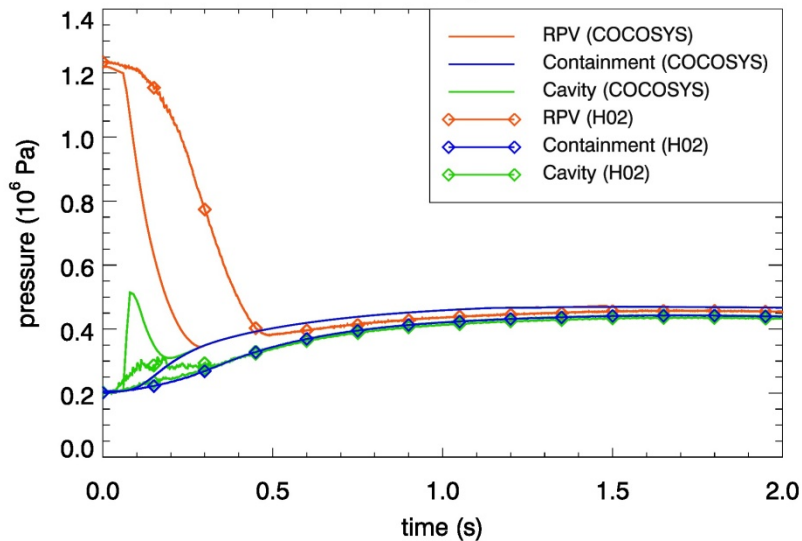


Abb. 3-5 Zeitabhängig berechnete Drücke in RDB (RPV), Containment und Reaktorgroße (Cavity) im Vergleich zum Experiment H02 für den EPR

Tab. 3-1 Integrale Anteile der aus der Reaktorgroße in andere Anlagenräume ausgetragenen Schmelze und maximale Drücke im Containment im Vergleich zu den DISCO-Experimenten „H“ für die EPR-Geometrie.

Experiment	$F_{d,exp}$ (%)	$F_{d,calc}$ (%)	$P_{max,exp}$ (MPa)	$P_{max,calc}$ (MPa)
H01	36	51	0.37	0.40
H02	61	72	0.44	0.47
H03	46	74	0.32	0.35
H04	74	80	0.26	0.27
H05	38	48	0.29	0.32
H06	49	63	0.40	0.47

Die an der DISCO-Anlage beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) zuletzt durchgeführten DISCO-Versuche KH03-KH07 für den Konvoi-Anlagentyp /MEY 11/ sind sogar "blind", d. h. ohne Kenntnis der Ergebnisse, mit COCOSYS berechnet worden (Abb. 3-6). Zur Nachrechnung dieser Versuche wurden Modellparameter verwendet, die an den verfügbaren EPR-Versuchen in der DISCO-Anlage überprüft worden waren. In den blinden Rechnungen zeigt sich, dass die ausgetragenen Schmelzmassen und deren Verteilung auf die Räume in zufriedenstellender Übereinstimmung mit den Experimenten prognostiziert wurden. Damit wurde das Entrainment-Modell erfolgreich überprüft.

Allerdings besteht eine Unsicherheit in dem Einfluss der anfänglichen Wasserstoffkonzentration im Containment, die bei den Konvoi-Versuchen um einen Faktor von ca. 2

höher liegt als bei den EPR-Versuchen: Der mit dem Schmelzeaustrag verbundene maximale Druckanstieg im Containment ist nicht immer genau voraus gesagt worden. Bei der Wasserstoffverbrennung unter DCH-Bedingungen gibt es eine komplexe Wechselwirkung von einströmendem Wasserstoff, der als Diffusionsflamme verbrennt, und der Verbrennung von vorvermischem Wasserstoff. Hier zeigt sich, dass das einfache Wasserstoffverbrennungsmodell mit den gewählten Parametern den Einfluss der anfänglichen Wasserstoffkonzentration in der Anlage nicht ausreichend wiedergibt.

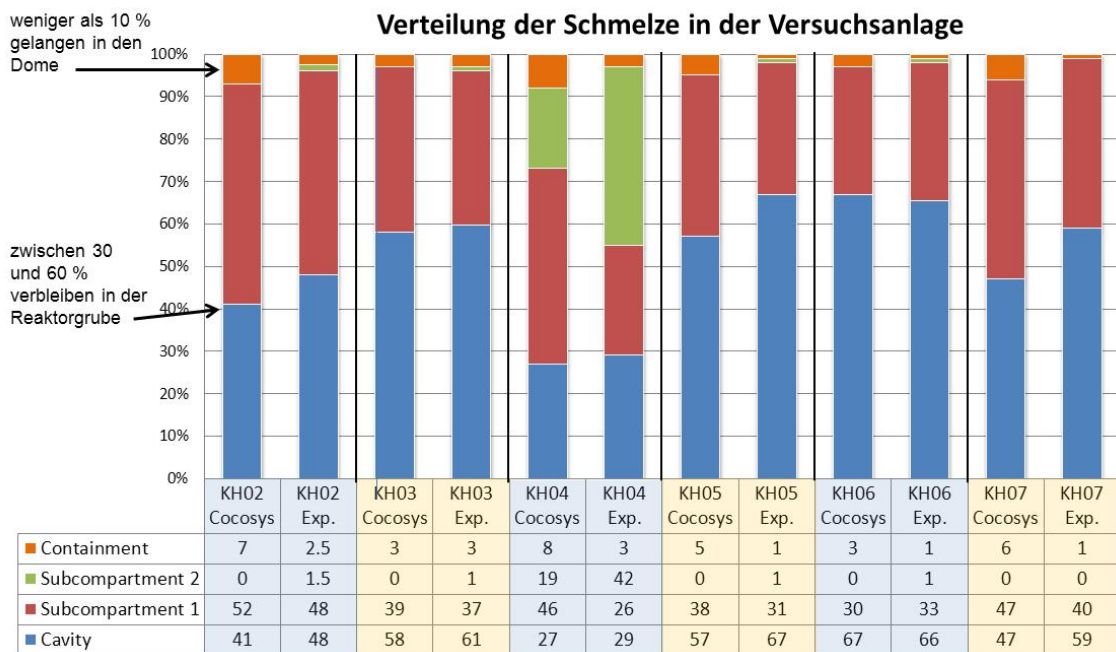


Abb. 3-6 Anwendung des DCH-Modells auf DISCO-Experimente für die Konvoi-Geometrie (RDB-Druck beim Versagen: 10...26 bar). KH03-KH07 sind „blind“ berechnet worden.

Fazit

Für die Simulation des Schmelzeaustrages in das Containment wurde aus den verfügbaren Experimenten eine Korrelation für die Beschreibung der Entrainment-Rate abgeleitet und in COCOSYS erfolgreich getestet. Als dominanter Effekt für das Entrainment werden in dieser Arbeit die von der Gasströmung ausgeübten Scherkräfte gesehen. Es konnte gezeigt werden, dass der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in Experimenten mit dem Integral der quadrierten Gasgeschwindigkeit (v_g^2) über den Zeitbereich des Blowdown korreliert. Für die Berechnung der Entrainment-Rate in COCOSYS wurde ein Ansatz proportional zum Volumen der Schmelze in der Reaktorgrube und zu $v_g^2(t)$ vorgeschlagen. Der hierbei im Input vorzugebende Vorfaktor K_c ist typisch für ei-

ne spezielle Geometrie der Reaktorkaverne (Konvoi und EPR: $K_c = 20$, franz. P4: $K_c = 1,5$). Für die Ermittlung des integralen Schmelzeaustrags aus der Reaktorgrube sind eine Auftrennung der Reaktorgrube in zwei Teilbereiche sowie der Einfang von Schmelze im oberen Bereich der Reaktorgrube von entscheidender Bedeutung. Die genannten Parameterwerte für K_c sind nur in Verbindung mit dem gewählten Ablagerungsmodell und entsprechenden Parametern (effektive Höhe) in unterem und oberem Bereich der Reaktorgrube zu verwenden. In Nachrechnungen zeigte sich dieser Ansatz – kombiniert mit dem gravitationsgetriebenen Ablagerungsmodell – sogar in „blinden“ Rechnungen erfolgreich bei der Ermittlung des Schmelzetransports aus der Reaktorgrube in den Sicherheitsbehälter. Für die Analysen wurde von einem Versagen des RDB am tiefsten Punkt der Bodenkalotte ausgegangen. Es bestehen aber weiterhin Unsicherheiten bei der Übertragbarkeit von klassischen Korrelationen für das Entrainment aus Separate Effekt-Versuchen mit idealen Verhältnissen (vertikale Ringströmung, bekannte Stoffwerte, stationäre Strömungen) auf transiente DCH-Experimente mit reaktortypischen Geometrien und Materialien (Stichworte: Strömungsform in komplexer Geometrie, Identifikation und Lokalisierung des Mechanismus, simultanes Entrainment und Einfang von Schmelze, Ermittlung der effektiven Gasgeschwindigkeit), die nicht weiter aufgelöst werden können.

Für die Anwendung auf die Reaktorsituation wird davon ausgegangen, dass, sofern die Experimente die Verhältnisse für den Transport des Schmelze-Gas-Gemisches in Reaktoranlagen gut wiedergeben, das Modell eine gute Prognosefähigkeit bezüglich des Austrags von Schmelze aus der Reaktorgrube sowie deren Transports im Sicherheitsbehälter besitzt. Der Einfang von Schmelze allerdings weist eine Unsicherheit auf: Das Gravitationsmodell für die Ablagerung ist nicht zutreffend in großen Räumen, die viele Einbauten bzw. Umlenkungen im Strömungsweg aufweisen (z. B. die Dampferzeuger bzw. Pumpenräume), da hier eine Ablagerung durch direkten Aufprall erfolgt. Die größere Effektivität der Ablagerung in solchen Räumen muss zurzeit durch Benutzereinfluss mit der Vorgabe von effektiv verkürzten Höhen für die Ablagerung erreicht werden. Fraglich ist, wie diese Vorgehensweise auf die Reaktorsituation zu übertragen ist. Rückflüsse werden aus den Arbeiten zur Modellübertragung nach ASTEC (im Nachfolgevorhaben) sowie aus der Anwendung des Modells für die Reaktorsituation (im geplanten Validierungsvorhaben) erwartet.

3.1.2 Überprüfung des vereinfachten H₂-Verbrennungsmodells für DCH-Bedingungen / Skalierungseffekte

Das einfache H₂-Verbrennungsmodell in COCOSYS, das auf dem in ASTEC verfügbaren Modell COMB beruht, wurde auf die beiden KIT-Versuchsserien G und GL zur Wasserstoffverbrennung unter DCH-Bedingungen angewandt. Dabei unterscheidet sich die GL-Versuchsserie durch ihren größeren Maßstab (Längenmaßstab 1:7 im Vergleich zum EPR) von der G-Versuchsserie (Längenmaßstab 1:18) /MEY 11b/, Abb. 3-7.

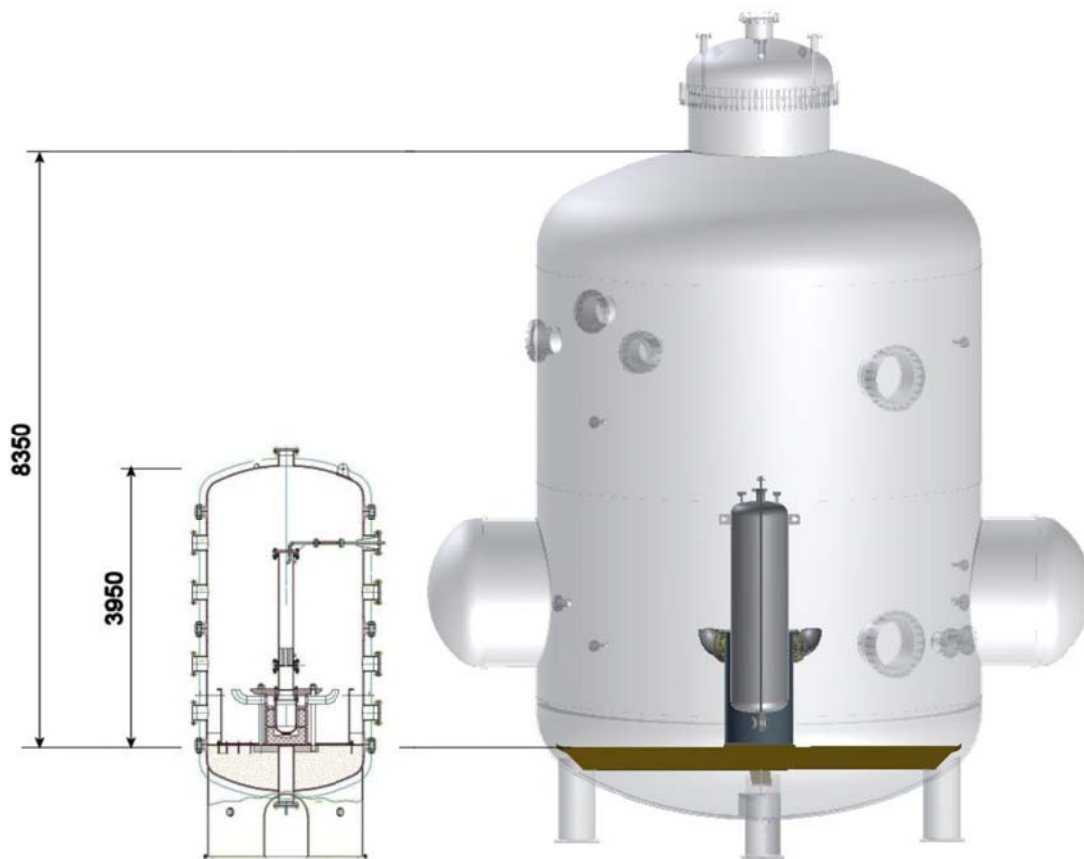


Abb. 3-7 Größenvergleich der beiden Versuchsstände G (links) und GL (rechts) (aus /MEY 11b/)

In diesen Versuchen wurde ein Wasserstoff/Stickstoff-Gemisch unter einem Druck von ca. 20 bar zentral nach unten (Annahme RDB-Versagen am tiefsten Punkt der Bodenklotte) in ein Modell einer Reaktorgrube ausgeblasen. Über kurze Rohrleitungen wurde die Strömung aus der simulierten Reaktorgrube in einen großen Versuchsbehälter umgeleitet, der einen großen offenen Bereich eines Containments einer Reaktoranlage, z. B. oberhalb der Dampferzeuger- / Pumpenräume darstellen soll. Am Ausgang

von diesen Rohrleitungsansätzen wurde das in den Versuchsbehälter einströmende Gemisch gezündet. Hierbei wird der in den großen Raumbereich des Behälters einströmende Wasserstoff in einer Diffusionsflamme verbrannt (Abb. 3-8, linke Seite). Solche Flammen sind auch in DCH-Experimenten mit Schmelze und Wasserdampf am Eintritt in den großen Behälter-Raum beobachtet worden. Parallel dazu gibt es eine Vermischung des einströmenden Gasgemisches inkl. von noch unverbranntem Wasserstoff mit der zuvor vorhandenen Behälteratmosphäre (Abb. 3-8, rechte Seite).

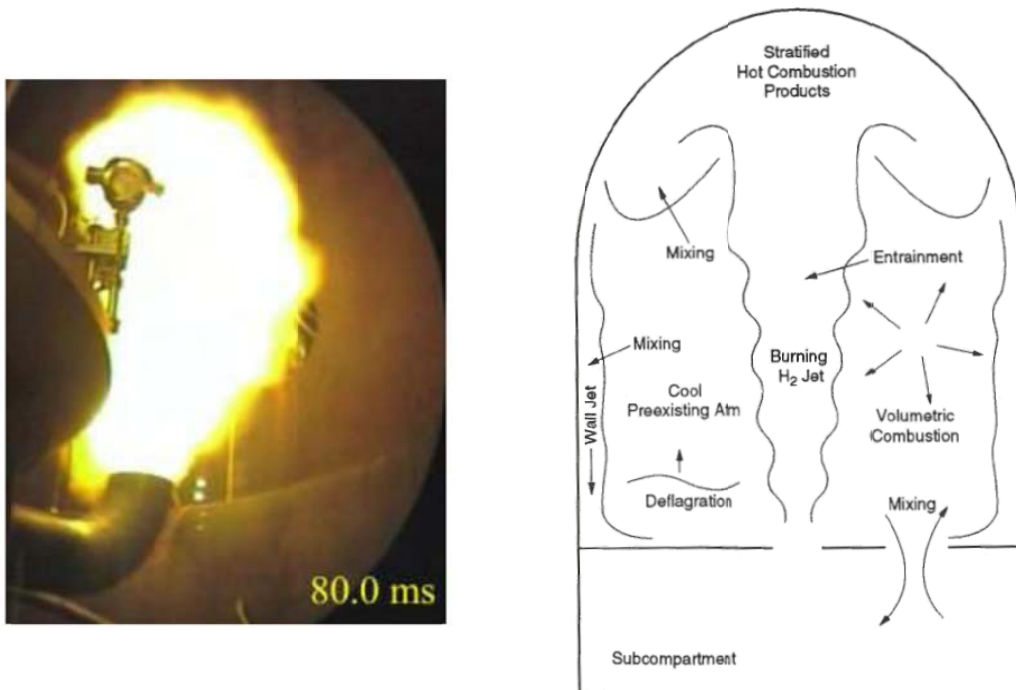


Abb. 3-8 Linke Seite: Wasserstoff-Flamme am Ausgang der Rohrleitungen in den G-Versuchen (Bildquelle: KIT Karlsruhe). Rechte Seite: Phänomenologie der Wasserstoffverbrennung unter DCH-Bedingungen (aus /PIL 96/)

In beiden Versuchsserien wurde das Verhältnis von während des Blowdowns in den Behälter einströmendem zu bereits vorhandenem, vorvermischem Wasserstoff variiert, vgl. die ersten beiden Zeilen in der Versuchsmatrix der G-Versuche, Tab. 3-2.

Die H_2 -Verbrennung in dem vereinfachten COCOSYS-Modell simuliert den Prozess der langsamen Verbrennung von vorvermischem Wasserstoff („Deflagration“ in Abb. 3-8, rechte Seite). Das Modell basiert auf dem in ASTEC implementierten COMB-Modell /SER 05/ und ist für Situationen geeignet, wo die geometrische Flammenpropagation von Raum zu Raum nicht im Mittelpunkt des Interesses steht (hierfür käme das Flammenfront-Modell FRONT zum Einsatz), sondern die Konkurrenz aus der Energiefreisetzung durch den Verbrennungsvorgang einerseits und den Wärmeübergängen durch

Strahlung und Konvektion zwischen Atmosphäre und Strukturen andererseits. In diesem Modell müssen zwei Parameter gewählt werden:

- die Dauer Δt des Verbrennungsprozesses und
- die verbleibende H_2 -Konzentration c_{res} nach Ende des Verbrennungsprozesses.

Ein weiterer Parameter, nämlich der Diffusionskoeffizient D_1 für die flüssige Schmelze, nimmt über die im DCH-Modell berechnete chemische Reaktion zwischen Metall und Wasserdampf auf die Wasserstoffproduktion während des Blowdowns (DCH-Vorgangs) Einfluss, d. h. auf die für die Wasserstoffverbrennung insgesamt zur Verfügung stehende Menge an Wasserstoff.

Die Reaktionsrate r_{H_2} (kg/s) für die Verbrennung von Wasserstoff wird in dem sogenannten „linearen“ Ansatz mit dem verbleibenden Wasserstoffmassenanteil α_{res} (der aus c_{res} umgerechnet wird) für den Fall von Sauerstoffüberschuss aus

$$r_{H_2} = \frac{(1 - \alpha_{res}) m_{H_2}}{\Delta t} \quad (3-8)$$

berechnet. Dabei wird m_{H_2} zu Beginn der Verbrennung in der Zone vom Modell abgefragt. Alle Größen α_{res} , m_{H_2} , Δt liegen damit bei Beginn der Verbrennung in einer Zone vor. Durch nachträglich in die Zone einströmenden Wasserstoffs als Folge der DCH-Reaktion wird in diesem linearen Ansatz also nicht mehr die Rate für die Verbrennung verändert.

Um erste grundlegende Erfahrungen mit dem vereinfachten Verbrennungsmodell unter DCH-Bedingungen zu sammeln, wurde dieses unter Verwendung der linearen Option auf verschiedene DCH-Experimente angewandt.

Aus parametrischen Untersuchungen zu dem DISCO-Experiment KH02 (in derselben Skalierung der G-Versuche) unter Variation der Modellparameter geht hervor, dass die Brenndauer Δt kaum Einfluss auf das Druckmaximum im Sicherheitsbehälter, aber großen Einfluss auf dessen Zeitpunkt hat. Dagegen hat die Wasserstoffmenge, die in der Rechnung insgesamt bei der Verbrennung umgesetzt wird, großen Einfluss auf das Druckmaximum. Großen Einfluss auf das Druckmaximum haben daher die beiden Parameter residuale Wasserstoffkonzentration c_{res} und der schmelzeseitige Diffusionskoeffizient D_1 im chemischen Modell für die Reaktionen zwischen Metall und Wasserdampf/Sauerstoff. Mit Variation von c_{res} werden die Menge an verbranntem Wasser-

stoff und die verbleibende H_2 -Konzentration verändert. Mit Variation von D_1 verändern sich die Mengen des produzierten (und nachfolgend verbrannten) Wasserstoffs. In beiden Fällen verschiebt sich der Zeitpunkt für das Druckmaximum nur geringfügig.

Da die Variation der Brenndauer in dem Parameter-Bereich, wo es gute Übereinstimmungen zu den Experimenten gibt (bei ca. $\Delta t \approx 0,5 \text{ s}$), faktisch keinen Einfluss auf das Druckmaximum hat, erfolgt die Verbrennung unter DCH-Bedingungen also vergleichsweise schnell gegenüber dem Wärmübertrag von der Atmosphäre an die Strukturen – also quasi adiabat –, sodass der Druckanstieg ΔP nur mit dem Gesamtumsatz bei der Verbrennung korreliert.

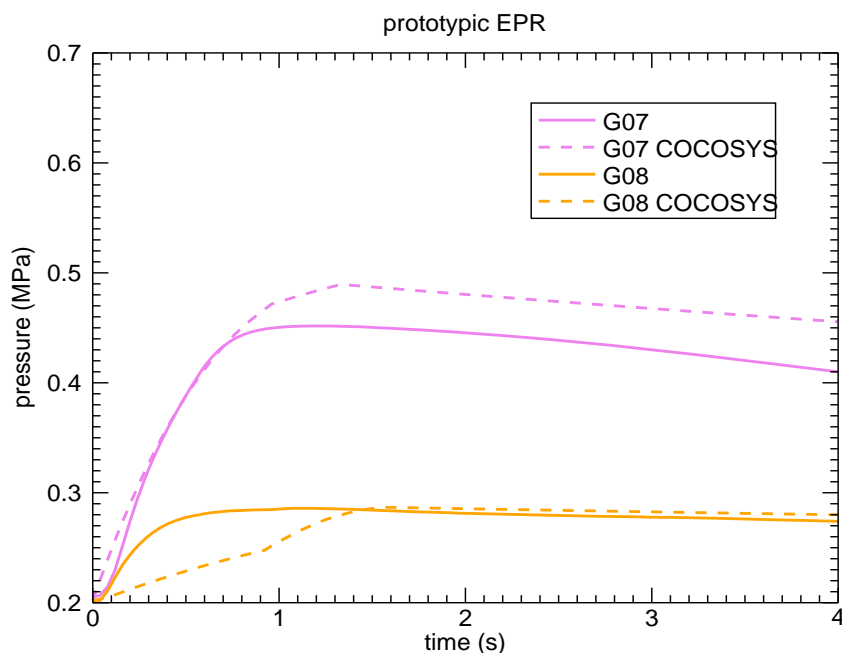


Abb. 3-9 Drücke im Versuchsbehälter für die prototypischen⁴ Experimente aus der Versuchsserie DISCO-G und Vergleich mit COCOSYS.

Für die Nachrechnung der G-Versuche wurden die Modellparameter

- $\Delta t = 0,5 \text{ s}$
- $c_{\text{res}} = 2,0 \text{ Vol.} - \% H_2$

⁴ „Prototypic EPR“: Blowdown erfolgt durch die Reaktorgrube zunächst in einen Zwischenraum (der die DE-/Pumpen-Räume beim EPR simuliert) und dann in den großen Behälter. In beiden Räumen wird das Gemisch gezündet.

ermittelt, die eine akzeptable Übereinstimmung zu den experimentellen Daten erlauben (Abb. 3-9).

Mit denselben Parametern wurden die Experimente der GL-Serie berechnet (Abb. 3-10), die bzgl der Anfangskonzentration von H₂ im Containment in einem ähnlichen Parameterbereich wie die G-Experimente durchgeführt worden sind. In den Nachrechnungen fällt auf, dass die Zeitpunkte der Druckmaxima von COCOSYS (= gestrichelt gezeichnete Linien in Abb. 3-10) zu früh berechnet werden. Während in der Rechnung die Drücke schon im Zeitbereich $t = 0,7 \dots 1,5$ s ihr Maximum erreichen, erfolgt dies im Experiment erst nach ca. $t = 3 \dots 5$ s. Der größere Längenmaßstab in der Serie GL (Faktor 2,6) benötigt daher eine ungefähr entsprechende Vergrößerung des Modellparameters für die Brenndauer Δt .

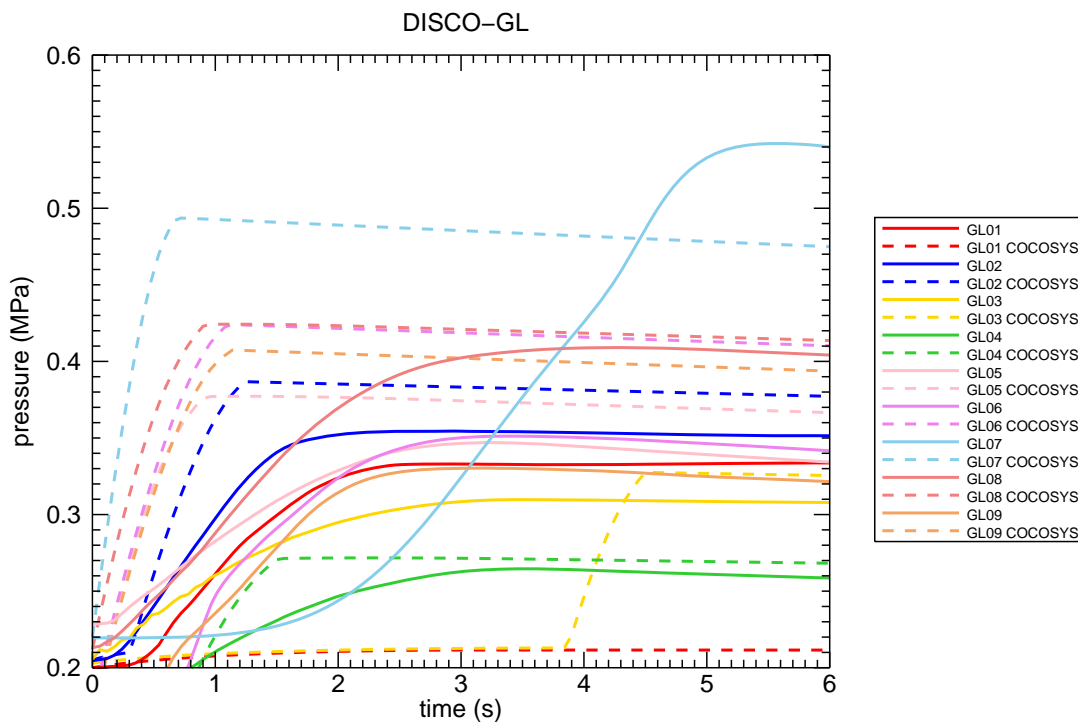


Abb. 3-10 Drücke im Versuchsbehälter für die Experimente der Versuchsserie DISCO-GL und Vergleich mit COCOSYS-Rechnungen.

Fazit

Die H₂-Verbrennung in dem vereinfachten COCOSYS-Modell COMB simuliert den Prozess der langsamen Verbrennung von vorvermishtem Wasserstoff in einem Einzelraum ohne Flammenausbreitungsprozesse zwischen Räumen, der aber immer noch

schnell gegenüber den Abkühlungsmechanismen der Atmosphäre ist. In den Nachrechnungen der Verbrennungsexperimente unter DCH-Bedingungen G und GL zeigt sich, dass damit der reale Verbrennungsvorgang in den Experimenten, der auf den zwei komplex interagierenden Prozessen:

- Verbrennung eines einströmenden Wasserstoffstrahls als Diffusionsflamme und
- Verbrennung des vorvermischten Wasserstoffs im Behälter

beruht, nur unzureichend erfasst werden kann.

Der erste Vorgang (Diffusionsflamme, durch Schmelzepartikel gezündet) hat aber prinzipiell geringere Auswirkung auf den Druckanstieg im Behälter als der zweite Vorgang (vorvermischte Verbrennung). Um die beiden wichtigen Größen Druckanstieg im Behälter sowie den Abbrand von H_2 mit dem einfachen Verbrennungsmodell akzeptabel für die Versuche zu treffen, müssen die Modellparameter so eingestellt werden, dass der Druckanstieg möglichst moderat ist. Gleichzeitig sollte aber der Gesamtumsatz der Verbrennung korrekt prognostiziert werden. Wie aus den parametrischen Voruntersuchungen bekannt war, hat der Parameter c_{res} einen großen Einfluss auf den Gesamtumsatz der Verbrennung und damit auf den Wert des Druckmaximums. Die Nachrechnungen der DCH-Verbrennungsversuche zeigen, dass der Beitrag der Diffusionsflamme am Gesamtumsatz der Wasserstoffverbrennungsprozesse zu groß ist, als dass beide Parameter (Druckanstieg im Behälter und Gesamtumsatz der Verbrennung) mit dem einfachen Modell COMB allein zufriedenstellend getroffen werden können.

Mit den Parametern $\Delta t = 0,5 \text{ s}$ und $c_{res} = 2,0 \%$ zeigen die Ergebnisse tendenziell eher eine Unterschätzung des H_2 -Abbrands (= Anteil von verbranntem Wasserstoff bezogen auf den insgesamt zur Verfügung stehenden Wasserstoff) bei eher überschätztem Druckmaximum im Behälter (Tab. 3-2). Unterschätzt wurde der maximale Druck nur für GL01 (Brennbarkeit in COCOSYS nicht erreicht, weil kein vorvermischter Wasserstoff präsent) und GL07 (keine Einspeisung von Wasserstoff, Abbrand von vorvermischem Wasserstoff). Für GL07 wäre ein kleineres c_{res} nötig, was aber für die Experimente mit Einspeisung von Wasserstoff zu einem zu großen Druckanstieg führen würde.

Tab. 3-2 Übersicht über die Randbedingungen der GL-Versuche /MEY 11b/ sowie die Parameter Wasserstoffabbrand und Druckmaximum im Vergleich zwischen COCOSYS-Rechnung und Experiment

	GL01	GL02	GL03	GL04	GL05	GL06	GL07	GL08	GL09
Wasserstoffmasse (g) RDB	1476	1375	803	816	827	1378	-	808	1276
Wasserstoffmasse (g) Containment	0	814	700	711	1610	1497	2421	1607	1435
Wasserstoffkonz. (%) Containment	0	2,82	2,24	3,05	6,79	5,87	7,82	5,43	5,94
Dampf in Atmosphäre ?	nein	nein	nein	ja	ja	ja	nein	nein	ja
Wasserstoffabbrand (COCOSYS)	0,00	0,50	0,48	0,45	0,61	0,62	0,56	0,55	0,63
Wasserstoffabbrand (Experiment)	0,97	0,91	0,57	0,6	0,76	0,76	0,87	0,76	0,78
Druckmaximum (bar) (COCOSYS)	2,1	3,9	3,3	2,7	3,8	4,2	4,9	4,2	4,1
Druckmaximum (bar) (Experiment)	3,3	3,5	3,1	2,6	3,5	3,5	5,4	4,1	3,3

Für die korrekte Darstellung des H₂-Verbrennungsvorganges unter den im Experiment angenommenen DCH-Bedingungen ist offensichtlich die gleichzeitige Simulation der zwei Vorgänge 1) Diffusionsflamme (wird in der Anlagensituation beim Austritt aus den Dampferzeugerräumen erwartet, wo der Schmelzepartikel/Wasserdampf/Wasserstoff-Strahl in die sauerstoffhaltige Atmosphäre des Domebereiches eintritt) und 2) vorvermischte Verbrennung im offenen Behälterbereich (Dome in der Anlagensituation), die sich allerdings gegenseitig beeinflussen, erforderlich. Beide Phänomene waren auch in den DCH-Experimenten in der DISCO-Anlage unter Verwendung einer zur Modellierung von Reaktorgrube, Pumpen- bzw. Dampferzeugerräumen und Containmentdome unterteilten Behältergeometrie beteiligt.

Eine präzise Simulation der Vorgänge bei der Wasserstoffverbrennung geht für ein großes Spektrum von Randbedingungen über die Möglichkeiten in „Lumped Parameter“-Rechenprogrammen hinaus. Daher wurde bis auf weiteres keine gezielte Verbesserung der COCOSYS-Modelle für die Wasserstoffverbrennung mit Blick auf DCH-Bedingungen durchgeführt. In dem geplanten Anschlussvorhaben ist eine Modellübertragung des DCH-Modells nach ASTEC vorgesehen. In diesem Zusammenhang wird geprüft, ob durch begrenzte Modellerweiterungen zur Wasserstoffverbrennung eine verbesserte Simulation dieser Phänomene während DCH ermöglicht werden würde. In diesem Fall werden auch Rückwirkungen auf die COCOSYS-Modelle erwartet. Weitere Anhaltspunkte von evtl. erforderlichen Verbesserungen – insbesondere unter dem Aspekt der Anwendung auf die Reaktorsituation und der verbleibenden Unsicherheiten –

können sich durch die Validierung des DCH-Modells im geplanten Validierungsvorhaben ergeben.

3.2 Verbesserung MEDICIS

Im Zeitrahmen des Projektes waren Fragestellungen im Zusammenhang mit einer Schmelze-Beton-Wechselwirkung (englisch: Molten Core Concrete Interaction – MCCI) ein wichtiges Thema in der internationalen Forschung. Die im Arbeitspaket „Severe Accident Research Priorities“ in SARNET2 (SARNET2-SARP) fortgeführte Liste von derzeit 21 offenen EURSAFE Research Items (ERI), sieht weiterhin eine hohe Priorität von experimentellem Forschungsbedarf auf diesem Gebiet vor:

- *ERI-Issue 2,1: MCCI: molten pool configuration and concrete ablation*, Priorität: hoch,
- *ERI-Issue 2,2: ex-vessel corium coolability, top flooding*, Priorität: hoch

Im Vorhaben RS 1159 war das Modell MEDICIS für die Simulation von MCCI-Phänomenen in ASTEC verbessert und nach COCOSYS übertragen worden. Im aktuellen Vorhaben sind ergänzende Arbeiten, insbesondere auch die Auswertung der verfügbaren experimentellen Daten im Hinblick auf eventuelle Verbesserungen in MEDICIS zu den Themen:

- Flutung der Schmelze mit Wasser von oben,
- 2D-Erosionsverhalten und Schichtungsphänomene und
- Spaltproduktfreisetzung während MCCI

durchgeführt worden. Die Auswertung von experimentellen Daten und die Ergänzung von Modellen erfolgten auf Basis einer neuen MEDICIS-Version, die in einem vorausgehenden Arbeitsschritt hierzu aus ASTEC-V2 nach COCOSYS übertragen wurde.

3.2.1 Erkenntnisse aus Versuchsprogrammen

Wichtige neuere experimentelle Arbeiten mit nachbeheizten Schmelzen (Simulation der Nachzerfallsleistung) wurden bzw. werden beim Karlsruher Institut für Technologie (MOCKA), bei den Argonne National Laboratories (OECD-CCI), bei CEA Cadarache (VULCANO) sowie bei AREVA Erlangen durchgeführt.

Die experimentellen Programme sind vor allem auf eine Erweiterung der Datenbasis für die zweidimensionale Erosion in radialer und axialer Richtung sowie für stratifizierte Schmelzepools (Metall/Oxid) ausgelegt. Aufgrund unterschiedlicher Beheizungstechniken (elektromagnetische Induktion oder direkte elektrische Wärme) des Schmelzepools und der damit verbundenen Einschränkungen sind allerdings nicht alle Versuche einheitlich interpretierbar.

3.2.1.1 Experimente mit homogenen oxidischen Schmelzen

In den CCI-Versuchen des OECD-MCCI-Projektes wurden prototypische, vorwiegend oxidische Schmelzen (mitunter mit kleinen Anteilen von Fe und Cr) mithilfe einer Thermit-Reaktion erzeugt und mit elektrischem Strom direkt beheizt. In rechteckigen Geometrien der Versuchsanlage (ca. 50 cm × 50 cm) wurde der Strom zwischen zwei sich gegenüber stehenden Wänden durch die Schmelze (anfänglich ca. 400 kg) geleitet, welche an den beiden anderen Seitenwänden sowie mit der Bodenplatte aus Beton wechselwirkt (s. Abb. 3-11 und Abb. 3-12). Die Beheizung mit direktem elektrischem Strom setzt eine vorwiegend oxidische Schmelze voraus, eine Schichtung Metall/Oxid kann hier nicht untersucht werden. Es wurden ein kalksteinreicher Beton (LCS-Typ) sowie ein silikatischer Betontyp untersucht.

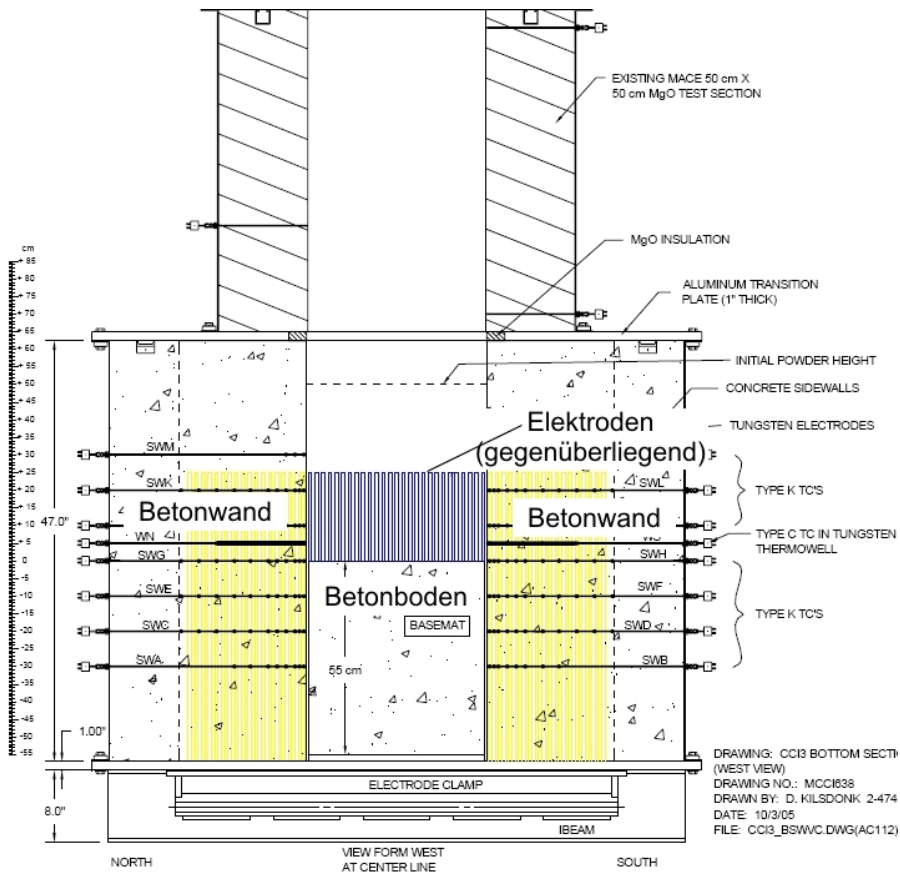


Abb. 3-11 Schnittbild durch die CCI-Versuchsanlage (Seitenansicht) /FAR 04/



Abb. 3-12 Zusammenbau der Betonkomponenten (Seitenwände und Boden, in Folie verpackt) und Elektrodenbänke vor dem Hinzufügen der inerten Seitenwände (aus MgO) hinter den Elektrodenbänken für die CCI-Versuche /FAR 06/

Bei dem thermischen Schock, den die frisch durch die exotherme Thermit-Reaktion hergestellte Schmelze im Kontakt mit den kalten Betonwänden erleidet, wird aus den Grenzschichten der Schmelze sehr viel Wärme entspeichert und es lagert sich erstarrtes Material (Krusten) an der Betonoberfläche an. Die Kontakttemperatur zwischen diesen anfänglichen Krusten und dem Beton ist allerdings immer noch hoch genug, um den Beton darunter thermisch zu attackieren, die anfänglichen Krusten wirken aber wie ein Widerstand für den Wärmefluss aus der Schmelze, so dass die Erosionsgeschwindigkeit in dieser Phase klein bis vernachlässigbar ist. Es dauert in den Versuchen eine beträchtliche Zeit („Inkubations“-Zeit) im Vergleich zur gesamten Versuchsdauer, bis sich eine Art quasi-stationärer Zustand eingestellt hat und die bei Versuchsbeginn erzeugten Krusten wieder aufgeschmolzen worden sind. In diesem quasi-stationären Zustand werden höhere Wärmeübergänge bzw. Erosionsgeschwindigkeiten beobachtet und die mittlere Verteilung der intern frei gesetzten Wärme auf die Oberfläche der Schmelze (Wände, Boden, Oberseite) hat sich nahezu stationär ausgebildet. Lokal stellen sich aber nie wirklich stationäre Strömungsgeschwindigkeiten und Temperaturen in der Schmelze ein, da das Problem der Konvektion in beheizten Schmelzen einen instationären Charakter hat. Aufgrund dieses instationären Charakters können der Zeitpunkt und der Ort von einem lokalen Versagen der Krusten nicht vorausgesagt werden.

Wenn an Seitenwänden und Boden die Erosion begonnen hat, so zeigt sich bei LCS-Beton, dass die Erosionsgeschwindigkeit am Boden ungefähr identisch ist mit der Erosionsgeschwindigkeit an der Seitenwand. Bei silikatischem Beton zeigt sich dagegen, dass die Erosionsgeschwindigkeit des Bodens langsamer ist als die der Seitenwände. Dieses typische Verhalten zeigt der Versuch CCI-3 (Abb. 3-13, /FAR 05/).

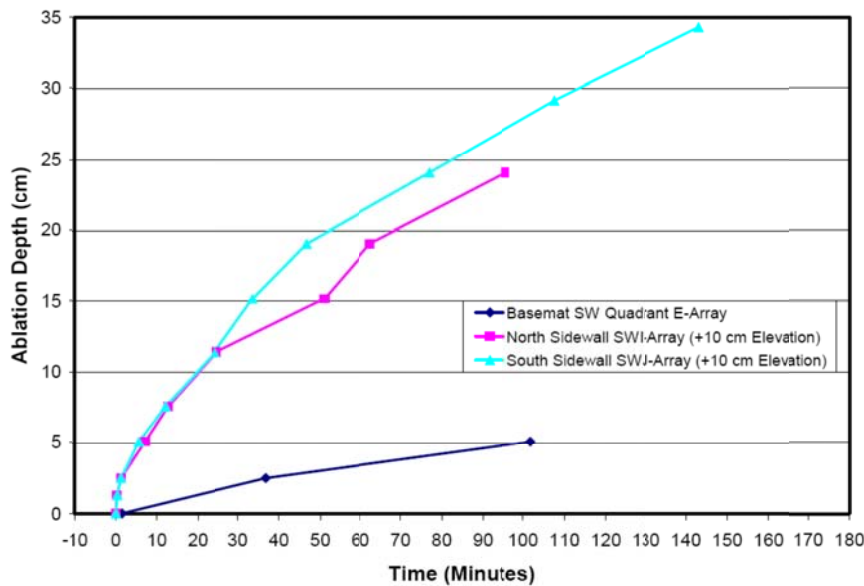


Abb. 3-13 Unterschiedliche maximale Erosionsfortschritte in den Boden (Rauten: „Basemat“) und Seitenwände (Quadrate, Dreiecke: „Sidewall“) im Versuch OECD-CCI-3, aus /FAR 05/.

Die späteren Versuchen CCI-5 und CCI-6 mit silikatischem Beton im OECD-MCCI2-Projekt bestätigten diese Schlussfolgerung.

In den Versuchen CCI-1, CCI-6 und WCB-1 (alle mit silikatischem Beton) zeigte sich nach einer Phase, wo an der Messstelle (Seitenwand bei CCI-1 und CCI-6, Boden bei WCB-1) keine nennenswerte lokale Erosion erfolgt, ein plötzlicher, rascher Erosionsfortschritt. Dies wird von der GRS folgenderweise interpretiert: Auch wenn lokal kein nennenswerter Erosionsfortschritt erfolgt, z. B. aufgrund einer anfänglichen Kruste, so wird durch Wärmeleitung und das Eindringen der Temperaturfront in den Beton der Beton dennoch vorgeschädigt. Wenn die Kruste versagt, kommt die Schmelze mit einem nicht mehr intakten Beton in Kontakt. Die Erosion erfolgt an diesen Orten zu diesem Zeitpunkt daher rascher.

Bezüglich der Wärmestromverteilung Seitenwand/Boden wurde prinzipiell ein ähnliches Verhalten in den Versuchen an der VULCANO-Anlage bei CEA beobachtet. In dieser Anlage wird die Schmelze mit elektromagnetischer Induktion beheizt. Es wurden auch Untersuchungen zu geschichteten Konfigurationen angestellt. Die VULCANO-Versuche sind aufgrund ihres kleineren Maßstabs, d. h. wegen ihrer großen Oberfläche im Vergleich zum Volumen, aber noch anfälliger für den Einfluss des thermischen Schocks bei erstem Kontakt der Schmelze mit dem Beton.

Erkenntnisse aus den Versuchen bei AREVA zum 2D-Erosionsverhalten in einer Kaverte aus silikatischem Beton liegen zurzeit noch nicht in detaillierter Form vor. Aus den veröffentlichten Informationen (SARNET-Fortschrittstreffen, BMWI-Fortschrittsberichte) ist zu entnehmen, dass auch dort zunächst eine deutliche Erosion in radialer Richtung beobachtet wurde, und die Erosion am Boden aufgrund anfänglicher Kruste bzw. einer lokalen Anhäufung von erstarrtem Material nicht stark ausgeprägt war. Es gibt jedoch Anhaltspunkte dafür, dass nach Auflösung dieses offensichtlichen thermischen Widerstandes am Boden das anfängliche große Verhältnis von radialer zu axialer Erosion reduziert wird, allerdings unter der Randbedingung einer niedrigeren inneren Leistungsfreisetzung.

In vorangegangenen Arbeiten /SPE 09/ wurden die vorliegenden experimentellen Daten aus MCCI-Experimenten zur Betonerosion im Hinblick auf den resultierenden Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Schmelze und Betonkontur der Reaktorgrube ausgewertet.

In dieses Auswertungsschema wurden die aktuell durchgeführten Experimente CCI-6, WCB-1 (beide aus dem OECD-MCCI2-Projekt), die beiden VULCANO-Versuche VB-U5 und VB-U6 sowie der bei AREVA durchgeführte 1D-Versuch 9e /HEL 11/ hinzugefügt. Die Abb. 3-14 zeigt effektive Wärmeübergangszahlen für den Wärmeübergang zur unteren und seitlichen Begrenzung des Pools durch den Boden bzw. die Wände der Reaktorgrube. Es werden radiale und axiale Wärmeübergänge unterschieden sowie die Betonsorten silikatischer („siliceous“) und kalksteinreicher („LCS“) Beton.

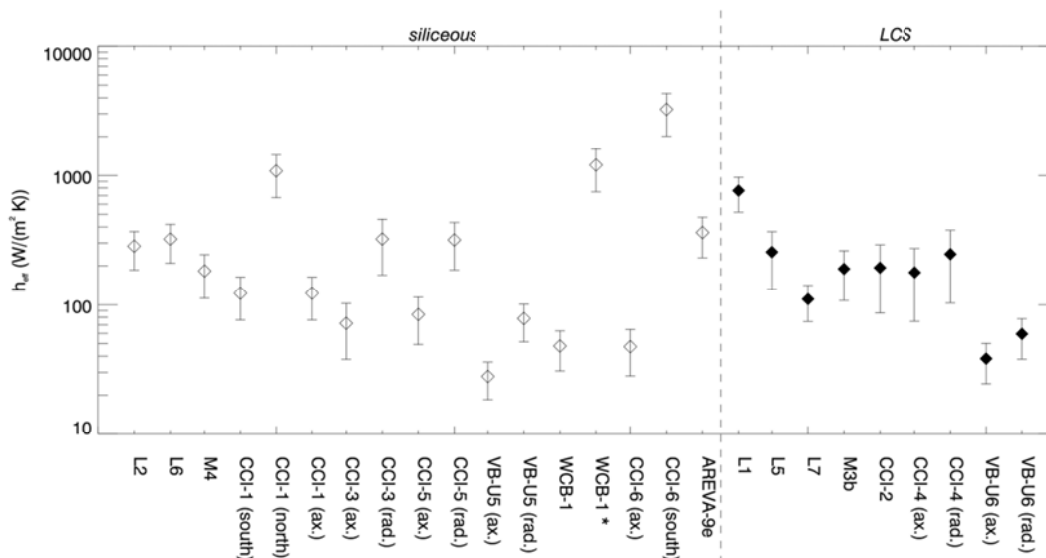


Abb. 3-14 Auswertung der effektiven Wärmeübergänge zwischen homogener oxidischer Schmelze und Beton

Aus der Abb. 3-14 ist ersichtlich, dass die Wärmeübergänge an Boden und Seitenwänden für viele Experimente mit durchschnittlichen Wärmeübergangszahlen im Wertebereich $\sim 60 \dots 300 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ angenähert werden können. Es gibt aber auch einige Ausnahmen:

- Die Experimente CCI-1 (nördlicher Seitenwand), CCI-6 (südliche Seitenwand), WCB-1* (Bodenplatte nach ca. 60 min moderater Erosion) zeigen plötzlich beschleunigte Erosionsfortschritte, die mit um nahezu eine Größenordnung angehobenen, lokalen Wärmeströmen verbunden sind. Es wird vermutet, dass die bei sehr langsamer Erosionsrate vorseilende Temperaturfront im Beton dort, d. h. ein Stück weit vor der Erosionsfront, zur Ausdampfung von Wasser aus dem Beton führt und infolge dieses Vorgangs die Gefügestruktur des Betons lokal vorgeschädigt wird. In diesen Bereichen kann sich dann die Erosionsfront plötzlich rascher ausbreiten als in intakten Bereichen des Betons. Aufgrund der zu vermutenden lokalen Strömungsmuster kann so Wärme in verstärktem Maße an genau diese Stelle herangeführt werden, sodass dieser Effekt zeitweilig selbstunterstützend wirkt. Bei CCI-6 wurde jedoch beobachtet, dass der lokale Erosionsschub in die Seitenwand von selbst abgeschwächt wurde. Es ist noch nicht klar inwiefern der Alterungsprozess des Betons Auswirkungen auf dieses Phänomen hat.
- Die VULCANO-Experimente VB-U5 und VB-U6 zeigen in der Auswertung von Abb. 3-14 relative niedrige Wärmeübergangszahlen. Diese beruhen aber zu einem großen Teil auf einer einzigen verfügbaren Temperaturmessung in den beiden Expe-

rimenten, die nach einiger Zeitdauer in beiden Fällen deutlich angehobene Pooltemperaturen im Vergleich z. B. zur MEDICIS-Nachrechnung signalisiert. In SARNET2 ist ein internationaler Benchmark zu diesen beiden VULCANO-Experimenten durchgeführt worden /JOU 12/. Niedrige Pooltemperaturen, wie von MEDICIS berechnet, wurden dort auch von einigen anderen Codes bestätigt. Unter der Annahme, dass die Pooltemperatur in den Experimenten deutlich niedriger lag als wie von den einzelnen Messungen angegeben (und damit in besserer Übereinstimmung zur MEDICIS-Rechnung), lägen die Experimente VB-U5 und VB-U6 in besserer Übereinstimmung zu den vielen anderen Experimenten und stellten dann keine Ausnahme mehr dar.

Für das 1D-Experiment 9e bei AREVA mit homogener oxidischer Schmelze (für andere Versuche bei AREVA liegen leider keine verwertbaren Temperaturmessungen in der Schmelze vor) liegt der Wärmeübergang im Bereich der anderen experimentellen Daten für oxidische Schmelze (Abb. 3-14), wobei offenbar im 1D-Fall, wie auch bei MACE-M4, der Wärmeübergang nach unten gleich groß ist wie im Falle von 2D-Experimenten zur Seite.

Aus Abb. 3-14 werden für die 2D-Experimente ungefähre Wärmeübergangskoeffizienten von:

- 80 W/(m²K) für die axiale Richtung nach unten im Fall eines silikatischen Betons,
- 300 W/(m²K) für die seitliche Richtung im Fall eines silikatischen Betons,
- 200 W/(m²K) sowohl für die axiale als auch für die seitliche Richtung im Falle des LCS-Betons,

geschätzt. Die genannten Wärmeübergangszahlen wurden erfolgreich in Testrechnungen mit MEDICIS zur Interpretation der Experimente verwendet /SPE 10b/. Es zeigt sich, dass die Vorgabe konstanter Wärmeübergangszahlen ausreichend zur Simulation der wesentlichen Parameter im Verlauf eines gesamten Versuches ist. Unsicherheiten verbleiben in diesem Punkt allerdings für die Übertragung auf Langzeitsituationen in Reaktoranlagen, da über die genauen Mechanismen des Wärmetransports nur unzureichende Erkenntnisse vorliegen.

Zur Abklärung von möglichen Mechanismen wurden im Validierungsvorhaben RS1190 bei der GRS numerische Untersuchungen zur Konvektion in der Schmelze zu Beginn

des Experimentes CCI-5 durchgeführt, bei denen unterstellt wird, dass die Konvektion in der Schmelze aufgrund von Temperaturgradienten hervorgerufen wird /SPE 10a/. Diese Untersuchungen zeigen, dass sowohl qualitativ als auch quantitativ die Wärmeübergänge aufgrund der angenommenen natürlichen Konvektion erklärt werden könnten. Die dabei erzielten Wärmeübergangszahlen für den Wärmeübergang nach unten und zur Seite werden quantitativ in guter Näherung durch die Korrelation von Jahn auf Basis der bei der TU Hannover durchgeführten Untersuchungen /JAH 75/ bestätigt. Der Temperaturverlauf bzw. Viskositätsverlauf in den gekühlten Grenzschichten ist hierbei eine entscheidende Größe. Dieser Hinweis zur Erklärung der beobachteten Wärmeübergänge wurde von der GRS in die internationale Diskussion eingebracht /SPE 10a/, er wird aber von internationalen Experten bislang noch kritisch gesehen, da es Beobachtungen aus Experimenten mit gasdurchsprudelten Flüssigkeiten (in der Regel Wasser/Luft-Gemische) gibt, bei denen der Einfluss des Gases schon bei geringen Volumenströmen des Gases den Einfluss der natürlichen Konvektion auslöscht. In diesem Punkt bestehen aber immer noch Zweifel, da in Experimenten mit prototypischen Schmelzen beobachtet wurde, dass die anfänglichen Krusten gasundurchlässig sind und daher die natürliche Konvektion zumindest zu Beginn der Experimente bis zum Eintritt nennenswerter Erosion die Wärmeübergänge und die Stabilität der anfänglichen Krusten bestimmen könnte.

Im Hinblick auf den möglichen Mechanismus für die Wärmeübergänge von der Schmelze an den Beton werden neben der natürlichen Konvektion in der Schmelze und dem Einfluss des aufgrund der Betonerosion injizierten Gases auch noch folgende Phänomene diskutiert:

- Konvektion aufgrund von Konzentrationsgradienten. Diese könnte gerade an der Bodenfläche den Einfluss der natürlichen Konvektion überwiegen, da hier mit den verflüssigten Betonzersetzungsprodukten ein spezifisch leichter Stoff im Vergleich zum Corium eingebracht wird.
- Periodische Kontakterneuerung. Die Annahme ist hierbei, dass Schmelze und Beton periodisch einen idealen Kontakt herstellen und der Wärmeübergang aus der Schmelze in den Beton durch transiente Wärmeleitung in der kurzzeitig als ruhend angenommenen Grenzschicht der Schmelze erfolgt. Der transiente Wärmestrom sinkt dabei mit der Zeit ab. Nach einer charakteristischen Zeitspanne τ wird die Schmelze neu durchmischt – aufgrund lokalen Eintrags von Gas oder flüssigen Zersetzungsprodukten des Betons – und der ideale Kontakt wird mit neuer einheitlicher Temperatur der Schmelze wiederhergestellt. Je kürzer die charakteristische

Zeitspanne τ ist, desto mehr Vermischung gibt es in der Schmelze und desto größer ist der Beitrag des Spitzenwärmestroms direkt nach Herstellung des idealen Kontaktes zwischen Schmelze und Beton. Je länger diese Zeitspanne ist, desto weniger Vermischung gibt es und desto größer ist der Beitrag des flachen Abschnittes des transientem Wärmestroms zum effektiven Wärmeübergang.

- Stabile thermische Widerstände im Kontaktbereich zwischen Schmelze und Beton. Denkbar sind stabile Krusten oder auch eine Ansammlung von an die Struktur angelagerten Feststoffen (z. B. hochschmelzende Aggregate aus dem zersetzten Beton, s. u.).
- Zersetzungsprozess des Betons. Kalksteinreicher und silikatischer Beton weisen ein unterschiedliches Verhalten bei ihrer Auflösung auf: Bei silikatischem Beton wird zunächst die Zementmatrix verflüssigt und es verbleiben größere Aggregate (Kiesel) in festem Zustand, die in die Schmelze eingetragen werden und dort makroskopisch transportiert werden können, bevor sie schmelzen. Es ist auch denkbar, dass frei gesetztes Gas bevorzugt entlang von Pfaden durch die Zwischenräume der verbliebenen Kieselmatrix strömt. In kalksteinreichem Beton wird dagegen in einen scharf abgegrenzten Bereich an der Schnittstelle zwischen intaktem und aufgelöstem Beton nahezu die gesamte Zusammensetzung des Betons aufgelöst bzw. verflüssigt.

Bezüglich der Auswertung des Wärmeübergangs nach oben stellt sich aber ein grundsätzliches Problem in den Versuchen: Unter trockenen Bedingungen ist die Wärmeabfuhr an der freien Oberfläche der Schmelze nicht gut erfasst. Es fehlen Messungen zur Oberflächentemperatur der Schmelze, und die Aufheizung der Strukturen oberhalb der Schmelzeoberfläche durch Strahlung kann – wenn überhaupt – nur sehr ungenau aus den vereinzelt vorhandenen Temperaturmessungen in den Strukturen rekonstruiert werden. Zudem beeinflussen in der Atmosphäre suspendierte Aerosole die Strahlungswechselwirkung zwischen Schmelzeoberfläche und Strukturen. Genauere Aussagen lassen sich für geflutete Bedingungen treffen, da der Wärmestrom an der Oberfläche aus der Verdampfungsrate des Wassers rekonstruiert werden kann.

Fazit

Bislang gibt es noch keine abgesicherte, mechanistische Erklärung für die Bevorzugung der seitlichen Erosionsrichtung bei MCCI mit homogener oxidischer Zusammensetzung der Schmelze in einer Kaverne aus silikatischem Beton. Die Empfehlungen

der GRS für die Erfassung des Wärmeübergangs zwischen Schmelze und Beton in den Modellen sehen daher die Verwendung von empirischen Wärmeübergangszahlen wie in Abb. 3-22 skizziert vor.

Zu Beginn der Experimente gibt es eine transiente Phase (bzw. „Inkubationsphase“) mit einem Ausfrieren von Grenzschichten der Schmelze entlang des Betons und zeitweilig vernachlässigbarem bzw. sehr langsamem Erosionsfortschritt. Diese Inkubationsphase wird von vielen Experten als Ursache für die Anisotropie bei der 2D-Erosion in den Versuchen gesehen. Die anfängliche Entspeicherung von Wärme aus den Grenzschichten der Schmelze aufgrund des thermischen Schocks ist auch für die Reaktorsituation anzunehmen. In den CCI-Versuchen fehlt aber im Vergleich hierzu die Wärmefreisetzung in den Krusten (wegen der Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit der Schmelze von der Temperatur) sowie die starken Rühreffekte durch den unter Reaktorbedingungen anzunehmenden Absturz der Schmelze in die Kaverne. Der Einfluss von anfänglichen Krusten ist also – auch aus Skalierungsgründen – im Experiment dominanter als unter Reaktorbedingungen anzunehmen und er nimmt im Versuch einen relativ großen Anteil an der Versuchsdauer ein. Daher wird davon ausgegangen, dass der Einfluss von anfänglichen Krusten bzw. der Inkubationsphase in der langzeitigen Reaktorsituation geringer ist.

Weil die anfänglichen Krusten vermutlich gasundurchlässig sind, sind seitliche Krusten aufgrund des Einflusses von sich aufbauender natürlicher Konvektion in der Schmelze weniger stabil und werden evtl. schneller aufgeschmolzen. Die stärkere Gasfreisetzung bei kalksteinreichem Beton (aufgrund des größeren Massenanteils von Gas in diesem Beton) müsste ein rasches Versagen der Krusten auch am Boden – d. h. einen eher gleichzeitigen Erosionsbeginn an Boden und Seitenwänden – unterstützen. Dies wird durch die Experimente nahegelegt, da mit Ausnahme von CCI-5 die Experimente mit silikatischem Beton (CCI-1, CC-3, CCI-6) tendenziell Verzögerungen des Erosionsbeginns am Boden im Vergleich zur Seitenwand aufweisen. Der Versuch CCI-5 ist schwierig zu bewerten, da die Randbedingungen dort stark asymmetrisch waren. Der Effekt der anfänglichen Krusten und dem lokal unterschiedlichen Aufschmelzen (je nach Betontyp) reicht aber zur Erklärung der anisotropen 2D-Erosion bei silikatischem Beton nicht aus, da die Experimente zeigen, dass – wenn Erosion an Wand- und Bodenfläche gleichzeitig fortschreitet, d. h. anfängliche Krusten nicht mehr die Erosion verhindern – die Erosion am Boden im Falle von silikatischem Beton dennoch langsamer ist, als zur Seite, vgl. Abb. 3-13. Zur Erklärung der 2D-Anisotropie reicht also die Inkubationsphase (transientes Bilden und Abschmelzen von Krusten) in den Experi-

menten vermutlich nicht aus, d. h. es muss auch im Langzeitbereich der Reaktorsituation mit dominanter radialer Erosion bei oxidischer Schmelze und silikatischem Beton gerechnet werden.

3.2.1.2 Experimente mit geschichteten Schmelzen (Metall/Oxid)

Im typischen zu erwartenden Unfallablauf einer Reaktoranlage ist der oben beschriebene Fall eines homogenen Schmelzepools mit oxidischer Charakteristik ein Grenzfall. Dieser ist zu erwarten, wenn die Durchmischung des Schmelzepools, etwa aufgrund des starken Rühreffektes durch die bei der Erosion frei gesetzten Gase in der Schmelze und eines geringen Dichteunterschiedes zwischen Metall- und Oxidschmelze zur Auflösung und Durchmischung von Schichten führt. Eine oxidische Charakteristik ist dann zu erwarten, wenn die Masse der Metallschmelze klein gegenüber der Oxidschmelze ist, die Metallschmelze also als in der oxidischen Schmelze weitgehend dispergiert angenommen werden kann.

Prinzipiell ist eine Schichtung des Pools zu erwarten, da die Metall- und Oxidteil-schmelzen nicht mischbar sind und beträchtliche Dichteunterschiede aufweisen können. Nach Absturz aus dem RDB weist die oxidische Mischschmelze eine viel größere Dichte auf als die metallische Schmelze. Mit auch in der Reaktorsituation angenommener Inkubationsphase gibt es zunächst einen kurzen Zeitabschnitt, in dem anfängliche Krusten zur Betonoberfläche abgeschmolzen werden und die Erosion sehr langsam ist. Bei dann geringen Gasvolumenströmen fehlt der Rühreffekt, um die Schichten aufzulösen. Nach einer möglichen Inkubationsphase erfolgt die Erosion mit hoher Geschwindigkeit, also großen Gasvolumenströmen. Mit fortschreitender Reduktion der oxidischen Dichte durch Eintrag von spezifisch leichten Zersetzungsprodukten führen die starken Rühreffekte in einer frühen Phase des MCCI zu einer vermutlich homogenen Poolkonfiguration, bevor die auf den Querschnitt des Pools bezogene Gasgeschwindigkeit unter ein kritisches Niveau abfällt und eine Schichtung ermöglicht. Es hängt jetzt vom Dichteunterschied zwischen Metall- und Oxidschmelze ab, wie sich die Schichtungsreihenfolge (unten/oben) einstellt. In der Langzeitphase des MCCI ist anzunehmen, dass die Oxidschmelze spezifisch leichter ist als die Metallschmelze und sich oberhalb der Metallschmelze ablagert.

Der experimentelle Kenntnisstand zu MCCI bei Annahme einer geschichteten Schmelze in der Reaktorgrube ist noch unbefriedigend. Dies liegt daran, dass mit der Präsenz

einer zusätzlichen Schmelze-Schicht zusätzliche Parameter die Fragestellung der Wärmestromverteilung in einer 2D-Konfiguration beeinflussen, die in Experimenten mit reaktortypischen Schmelzen nur unzureichend bis gar nicht beobachtet oder quantifiziert werden konnten. Dies betrifft die Parameter

- Bedingungen für das Einsetzen bzw. Wiederauflösen von Schichtungen
- Temperaturdifferenz zwischen den Schichten
- Wärmeübergang zwischen den Schichten

In den Versuchen bei KIT in der COMET-Anlage, wo Hochtemperaturschmelzen aus einer Aluminiumoxid-basierten Thermit-Reaktion in axialsymmetrischen Tiegeln in Verbindung mit einer induktiven Nachbeheizung zum Einsatz kamen, zeigt sich aufgrund der starken Dichteunterschiede eine ausgeprägte Stratifikation: Eisenschmelze unten, oxidische Schmelze (Hauptbestandteil: Al_2O_3) oben. Die Skalierung ist mit einem Tiegeldurchmesser von 60 cm und ca. 500...600 kg anfänglicher Schmelze ähnlich wie bei den CCI-Experimenten. Die geschichtete Konfiguration (Metall unten, Oxid oben) repräsentiert aber eher die späte Phase von MCCI.

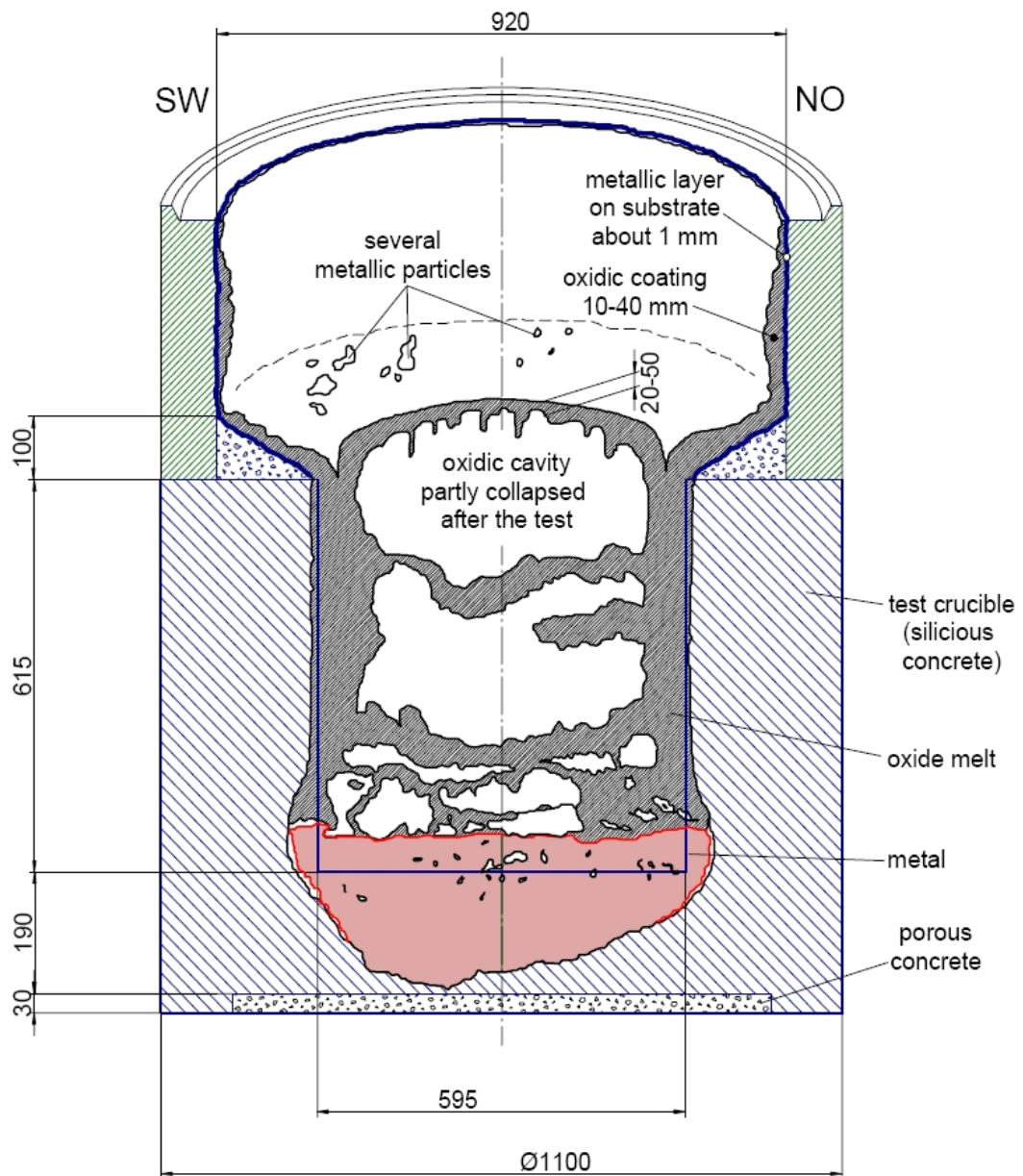


Abb. 3-15 Schnitt durch den Versuchstiegel nach Ende des Experimentes COMET-L2 und Projektion der geometrischen Größen der Versuchsanlage /SDO 06/

In diesen Versuchen lässt sich aber (aufgrund technischer Einschränkungen bei induktiver Beheizung) ausschließlich die Eisenschmelze beheizen, was nicht prototypisch ist, da der Großteil der Nachzerfallswärme bei Reaktorsituationen typischerweise in der oxidischen Schmelze entbunden wird. Es gibt keine Temperaturmessungen in den beiden Teilschmelzen, aber es liegen Infrarotkamerabilder beim Einlass der Schmelze in den Tiegel sowie in der Langzeitbeobachtung der Kruste an der freien Oberfläche im Versuch vor. In diesen Versuchen wurden Erosionsraten in der Größenordnung ~

6 mm/min beobachtet. Mit einer angenommenen Überhitzung von ca. 50 K gegenüber der Erstarrungstemperatur von Eisen werden axiale Wärmeübergangszahlen in der Größenordnung von ca. 1000-2000 W/(m² K) ermittelt (Abb. 3-16). Zu Beginn, in einer transienten Phase, in der die Eisenschmelze ihre Überhitzung gegenüber ihrem Erstarrungspunkt verliert, zeigt sich in den COMET-Experimenten eine gleichmäßig starke Erosion sowohl in die Tiegelseitenwand wie auch in den Boden. In der daran anknüpfenden stationären Phase übertrifft die Erosionsgeschwindigkeit am Boden (axial) diejenige in die Seite (radial) um ca. Faktor 2.

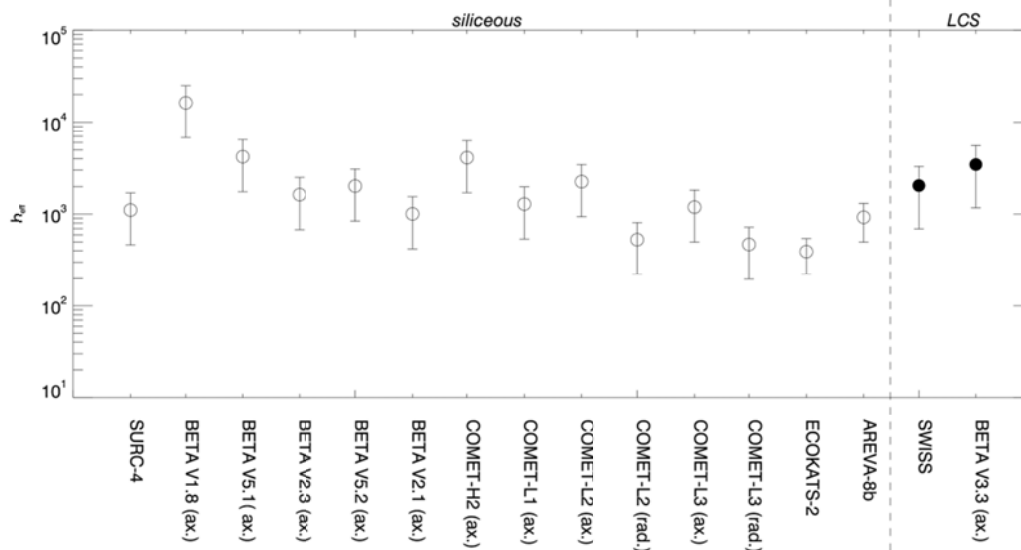


Abb. 3-16 Auswertung der effektiven Wärmeübergänge zwischen metallischer Schmelze und Beton – Vergleich COMET-Experimente mit anderen Experimenten

Aus den Versuchen mit Mischschmelzen aus prototypischem oxidischen Corium und Eisen bei AREVA und bei VULCANO hingegen wurde geschlossen, dass das Phänomen der Schichtungsbildung während des MCCI-Vorganges komplexer ist, als bei COMET beobachtet.

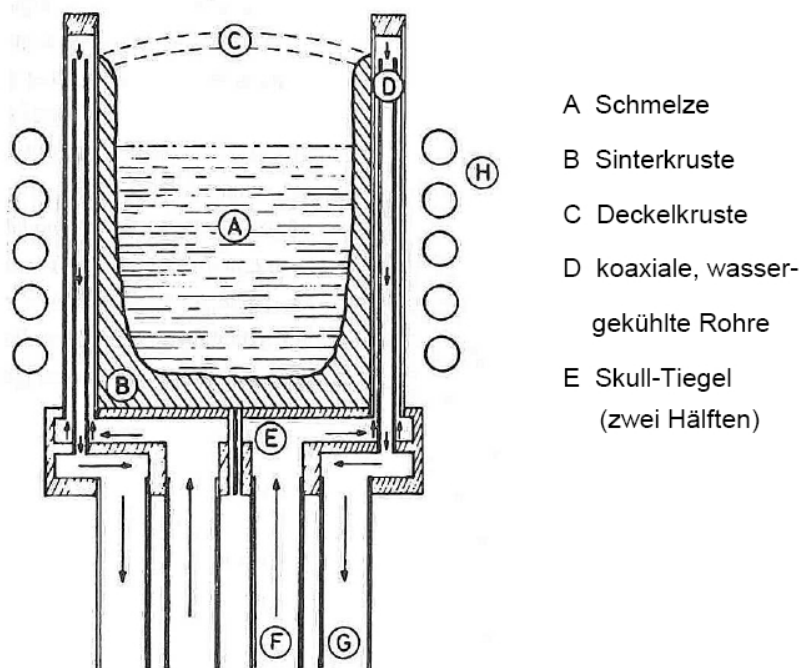


Abb. 3-17 Schnittbild durch den AREVA-Tiegel /HEL 11/

Die Ausbildung von Schichten konnte bei den AREVA-Experimenten nicht direkt beobachtet werden, sondern wurde aus den Erosionsprofilen nach Ende des Versuches rückgeschlossen. Dabei wurde im Falle hoher Erosionsgeschwindigkeiten eine Durchmischung (Eisen in Oxidschmelze dispergiert, Abb. 3-18 links) vermutet und bei niedrigen Erosionsgeschwindigkeiten eine Separation (Eisen am Boden des Tiegels, Abb. 3-18 rechts). Vermutlich spielen die geringeren Dichteunterschiede zwischen Eisenschmelze und Oxidschmelze hierbei eine wichtige Rolle. Der 1D-Versuch 8b der AREVA-Versuchsserie (Abb. 3-17, /HEL 11/), für den eine Temperaturmessung der Eisenschmelze vorlag, wurde in das Auswerteschema zur Ermittlung effektiver Wärmeübergänge übernommen. Die Auswertung zeigt einen konsistenten Wert im Vergleich zu den anderen Experimenten (Abb. 3-16).

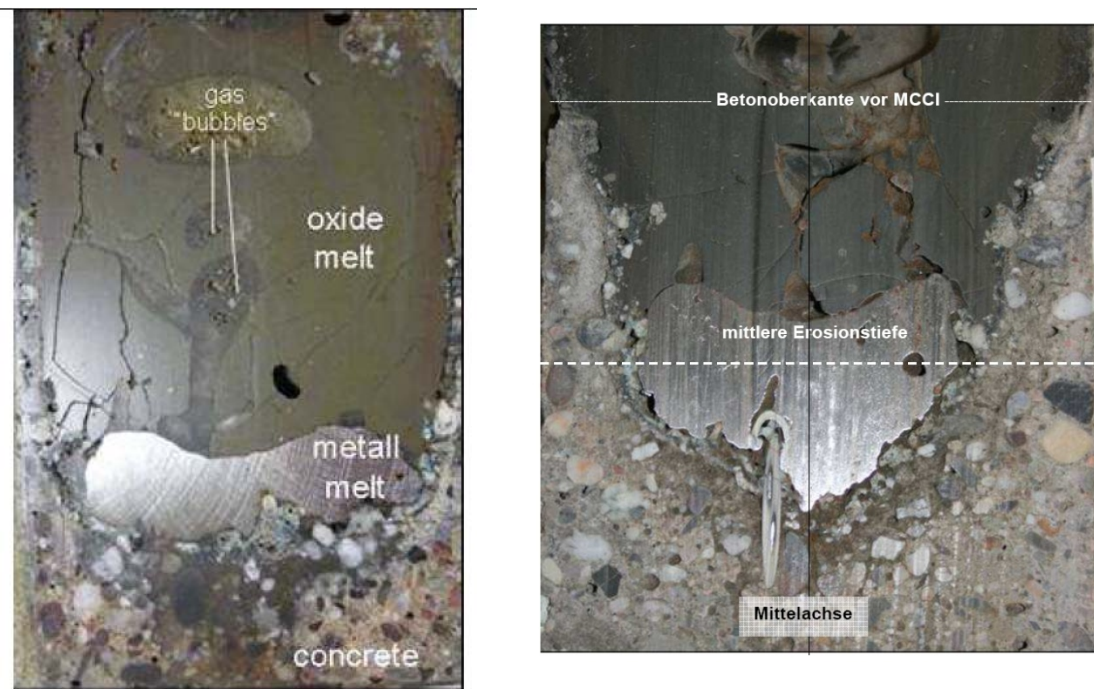


Abb. 3-18 Tiegelquerschnitte durch die AREVA-Versuche 5 (links, mit hoher Erosionsgeschwindigkeit und gleichmäßigem Erosionsprofil) und 8 (rechts, mit niedriger Erosionsgeschwindigkeit und lokaler Erosion), aus /HEL 11/

In den VULCANO-Experimenten /JOU 12b/ mit Oxid- und Metallschmelze mit silikatischem Beton konnte keine eindeutige Stratifikation in zwei Schichten detektiert werden. Metallische Tropfen wurden in der Oxidschmelze gefunden, und es wurde beobachtet, dass sich an der Betonwand akkumulierte Metallschmelze entlang der vertikalen Kavernenkontur hochzieht und eine Art „Tiegel“ für die Oxidschmelze bildet. Es wurde ferner festgestellt, dass die Vermischung von Bereichen unterschiedlicher Zusammensetzungen bzw. Dichten in der Schmelze sehr langsam erfolgt. Die Phänomene sind noch nicht erklärbar.

Fazit

Aufgrund der besseren Wärmetransporteigenschaften von flüssigem Eisen ist der Wärmeübergang zwischen Eisenschmelze und Beton viel effizienter als zwischen Oxidschmelze und Beton. Effektive Wärmeübergangszahlen für die Erosion am Boden einer Kaverne aus silikatischem Beton liegen im Bereich $1000 \dots 2000 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ im Vergleich zu etwa $80 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ für die Oxidschmelze. Die COMET- bzw. BETA-Experimente bei KIT zeigen, dass bei Metallschmelzen im Unterschied zu reinen oxidischen Schmelzen die Erosion zur Seite weniger effektiv ist als nach unten. Eindeutige

Ursachen hierfür sind noch nicht geklärt, da die Phänomene sehr komplex sind und in den Versuchen nicht getrennt beobachtet werden können. Es spricht vieles dafür, dass der an den Seiten aufgelöste Beton und das frei gesetzte Gas entlang der vertikalen Kavernenkontur nach oben transportiert wird, wo die Oxidschlacke sich in der spezifisch leichteren Oxidschmelze einmischen kann. Dieser Film aus Betonschlacke und/oder Gas bildet vermutlich einen thermischen Widerstand für den Wärmeübergang zur Seitenwand, wohingegen am Boden der Kaverne keine Ausbildung eines solchen Filmes möglich ist. Die Auswertung des im Rahmen von SARNET2 bei KIT durchgeführten großskaligen MOCKA-Experimentes, in der die Schmelze von innen mit chemischer Reaktionswärme in der Oxidphase beheizt wurde, steht noch aus.

3.2.2 Ergänzung eines vereinfachten Modells für die Simulation der Wasserüberdeckung eines Schmelzepools

Im Verlauf der Schmelze-Beton-Wechselwirkung kann es zu einer Flutung der Reaktorkaverne mit Wasser kommen, entweder als Accident-Management-Maßnahme in Anlagen, wo dies möglich ist, oder als Folge des Erosionsfortschrittes, wenn z. B. die Trennwand zu einem Raum mit einer Wasservorlage durchgeschmolzen wird. Zur Beurteilung der Effizienz des Wassereinflusses auf die Kühlbarkeit der Schmelze – von vielen Fachleuten wird für bestimmte Bedingungen gar ein stabilisierender Einfluss der Flutung auf den Fortgang der Schmelze-Beton-Wechselwirkung vermutet – wird in MEDICIS ein Modell für den Wärmeübergang an der freien Oberfläche der Schmelze unter Wasser verwendet. MEDICIS konnte ursprünglich in der aus ASTEC übernommenen Version die Wasserüberdeckung einer Schmelze ausschließlich mit der sogenannten „detaillierten“ Modelloption für die Kruste an der Oberseite des Schmelzepools in Verbindung mit einem Dryout-Heat-Flux-Modell für den Kontakt zwischen Wasser und Kruste berechnen („Water-Ingression“-Modell). Die Annahme ist hierbei, dass die Wasserfront in Spalte oder poröse Bereiche der Kruste bis zu einer bestimmten Tiefe eindringt und daher ein effektiv erhöhter Wärmestrom nach oben abgeführt wird im Vergleich zur Wärmeleitung durch den Festkörper Kruste ohne Eindringen einer Wasserfront. Dieses Modell ist aber mit großen Unsicherheiten behaftet und für den Anwender mit erhöhtem Aufwand verbunden (Eingabedaten, Behandlung einer zusätzlichen Schicht im Pool (Kruste)). In Alternative hierzu wurde MEDICIS in COCOSYS von der GRS um eine Modelloption erweitert, bei denen die Flutung der Schmelze mit Wasser auch ohne Verwendung des detaillierten Krustenmodells berücksichtigt werden kann (Abb. 3-19).

Im „Water-Ingression“-Modell wird eine von Darcy vorgeschlagene Beziehung zur Ermittlung des Wärmestromes bei Austrocknung einer permeablen Struktur verwendet:

$$q_{\text{dryout}} = \frac{h_{1v} \kappa (\rho_l - \rho_v) g}{2 \nu_v} \quad (3-9)$$

Hierbei hängt der Dryout-Wärmestrom von der Permeabilität κ (im Input vorzugeben) sowie von den Eigenschaften von Wasser bzw. Wasserdampf ab (Verdampfungsenthalpie h_{1v} , Dichten ρ_v , ρ_l , kinematische Viskosität ν_v). Die Idee hierbei ist, dass es einen maximalen Wärmestrom q_{dryout} gibt, bei dem im Gegenstrom zugeführtes Wasser und abgeführter Dampf sich die Waagschale halten. Ist die Permeabilität im Input einmal konstant vorgegeben, so ist der berechnete Wärmeübergang im Verlauf einer Rechnung weitgehend konstant, was nicht gut zu den Messdaten von Experimenten mit Flutung der Schmelze von oben passt. Zwar existiert ein Modellvorschlag zur Berechnung der Permeabilität κ in Abhängigkeit der veränderlichen Krusteneigenschaften, aufbauend auf dem Mechanismus der Ausbreitung von Rissen in der Kruste durch thermische Spannungen (Epstein-Lister-Modell). Dieses Modell wird aber aufgrund der Komplexität der zugrunde liegenden Theorie, der Schwierigkeiten bei der Ermittlung von benötigten Eingabedaten sowie der damit verbundenen Unsicherheiten in Relation zu den insgesamt verbleibenden Unsicherheiten zu MCCI von der GRS derzeit nicht empfohlen.

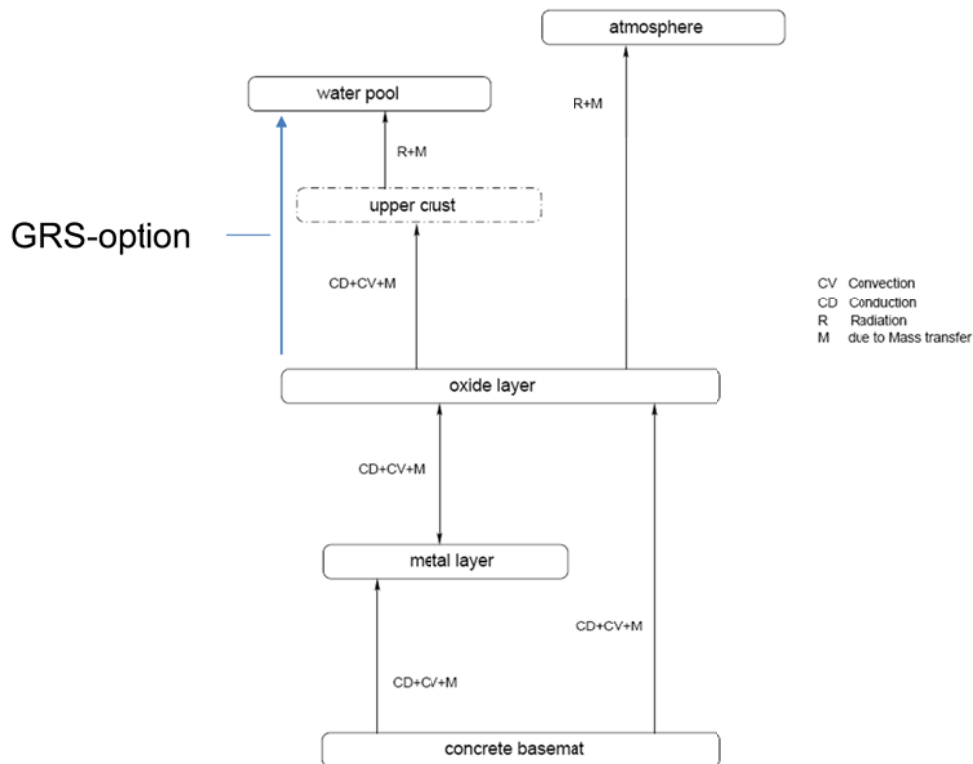


Abb. 3-19 Erweiterung von MEDICIS durch die GRS für den Wärmeübergang zwischen Schmelze und Wasser unter Umgehung des detaillierten Krustenmodells („upper crust“).

Im alternativen Modell der GRS ist in Analogie zum U.S. Rechenprogramm CORCON ein Verdampfungsmodell basierend auf der Siedekurve von Wasser in COCOSYS-MEDICIS eingebaut und getestet worden /SPE 12/. Das Modell berücksichtigt einen effektiven Wärmeübergangskoeffizienten (im Input vorzugeben) zwischen Schmelze und Kruste, das Anwachsen einer Kruste zwischen Schmelze und Wasser und die Siedebedingungen an der Kontaktstelle zwischen Kruste und Wasser (Abb. 3-20) ohne Eindringen von Wasser in die Kruste.

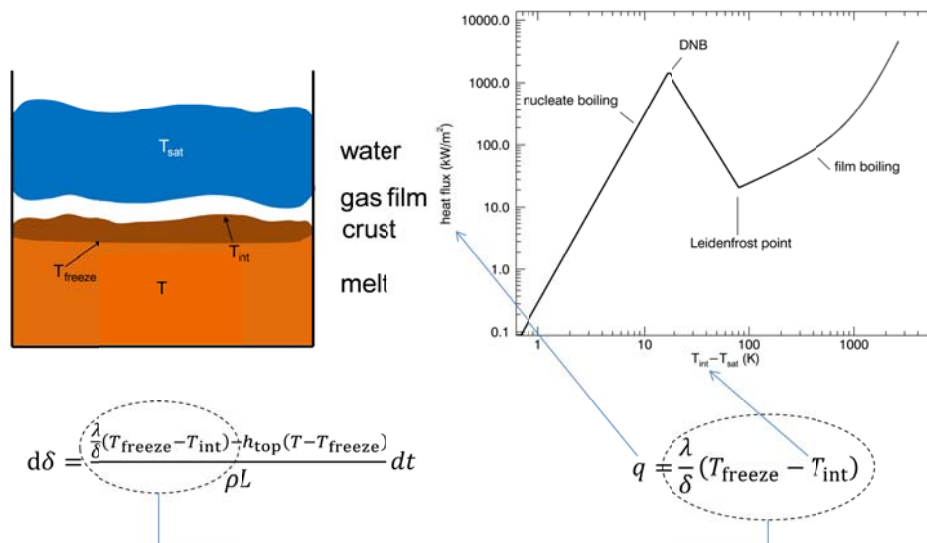


Abb. 3-20 Annahmen für das Modell zum Wärmeübergang Schmelze/Wasser inklusive Krustenbildung und Sieden

In diesem Modell entwickelt sich zeitlich eine Krustendicke δ unter der Bedingung, dass der Wärmestrom durch die Kruste bis zur Verdampfung auf der Außenseite kontinuierlich ist. Der effektive Wärmeübergang zwischen der Schmelztemperatur T und der Schnittstellentemperatur T_{int} zwischen Kruste und Wasser ist dann:

$$h_{\text{eff}} = \frac{1}{h_{\text{top}} + \frac{1}{\lambda/\delta}} \quad (3-10)$$

Die Schnittstellentemperatur T_{int} wird numerisch so gelöst, dass der durch die Kruste hindurchgeführte Wärmestrom entsprechend des Nukiyama-Diagramms in eine Verdampfungsleistung konvertiert wird. Dabei wird eine Lösung im Blasensiede-Bereich bevorzugt, was eine gute Übereinstimmung mit Beobachtungen von Experimenten ermöglicht. Diese Modell führt zwei unbekannte Parameter ein: Den effektiven Wärmeübergangskoeffizienten h_{top} und die Schnittstellentemperatur T_{freeze} zwischen Schmelze und Kruste. Unter der Annahme der Solidus-Temperatur der Schmelze als Krustenbildungstemperatur, d. h. der maximalen Temperatur, bei der im thermodynamischen Gleichgewicht einer entsprechenden Mischung aus Corium und Beton keine flüssigen Anteile mehr vorliegen,

$$T_{\text{freeze}} = T_{\text{sol}}, \quad (3-11)$$

können Experimente zum Effekt der Flutung von Kernschmelzen wie MACE-M3b und MACE-M4 in guter Näherung auch im Zeitverhalten des Wärmeübergangs nach oben angenähert werden /SPE 12/, Abb. 3-21. Hierfür wurde in parametrischen Rechnungen ermittelt, dass gute Übereinstimmungen erzielt werden, wenn ein ähnlich großer Wärmeübergangskoeffizient nach oben wie für die Erosion am Boden der Schmelze verwendet wird: $h_{\text{top}} = h_{\text{bot}} = 200 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$. Unsicherheiten in der Bestimmung von h_{top} liegen darin begründet, dass in den verfügbaren prototypischen Experimenten wie MACE mit Flutung der Schmelze die Kruste seitlich an der Versuchsanlage verankert war und zwischenzeitlich die Schmelze keinen direkten Kontakt mit der oberen Kruste hatte. Für Reaktorsituationen ist daher auch mit größeren Werten für h_{top} zu rechnen, wie auch bereits eigene Untersuchungen mit dem hier vorgestellten Modell zu den in den OECD-MCCI Vorhaben durchgeführten SSWICS-Experimenten gezeigt haben.

Mit der so durchgeführten Abschätzung des nach oben gerichteten Wärmeübergangs aus der Schmelze kann der empirische Ansatz der GRS, sogenannte effektive Wärmeübergangskoeffizienten zu verwenden, in der Weise der Abb. 3-22 zusammen gefasst werden.

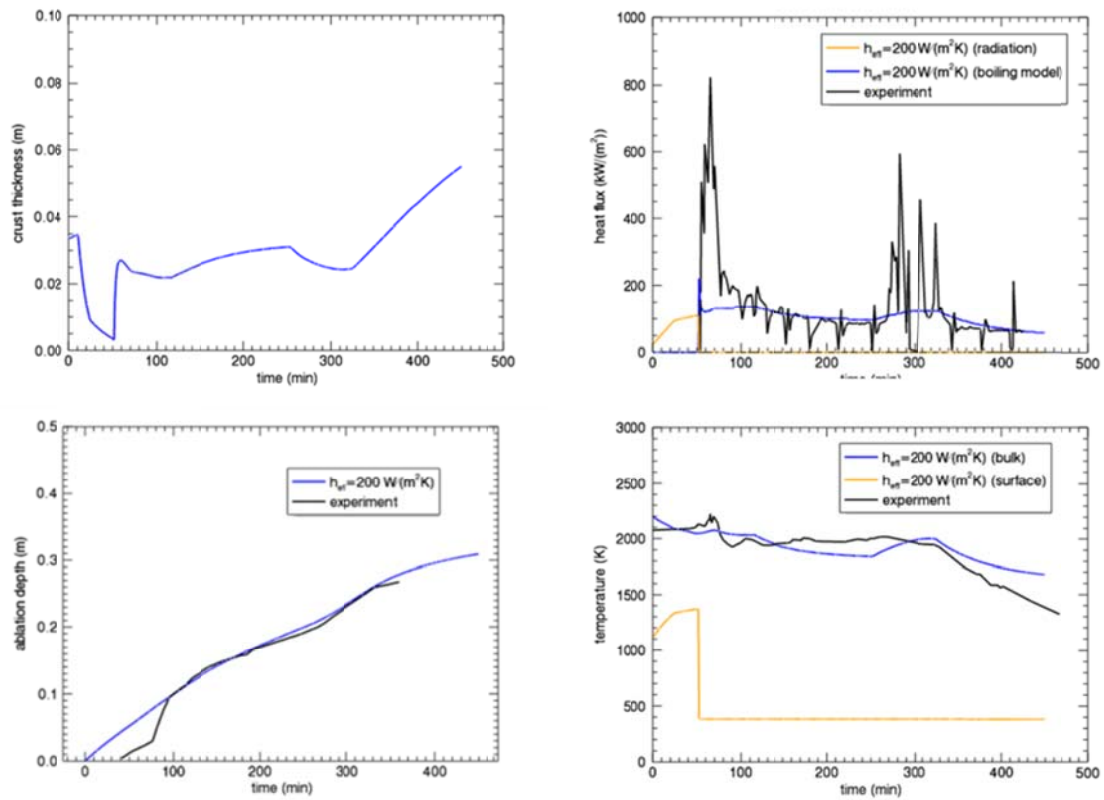


Abb. 3-21 Ergebnisse für die Nachrechnung von MACE-M3b unter Verwendung des vereinfachten Modells und einem Wärmeübergangskoeffizienten nach oben von $h_{top} = 200 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$

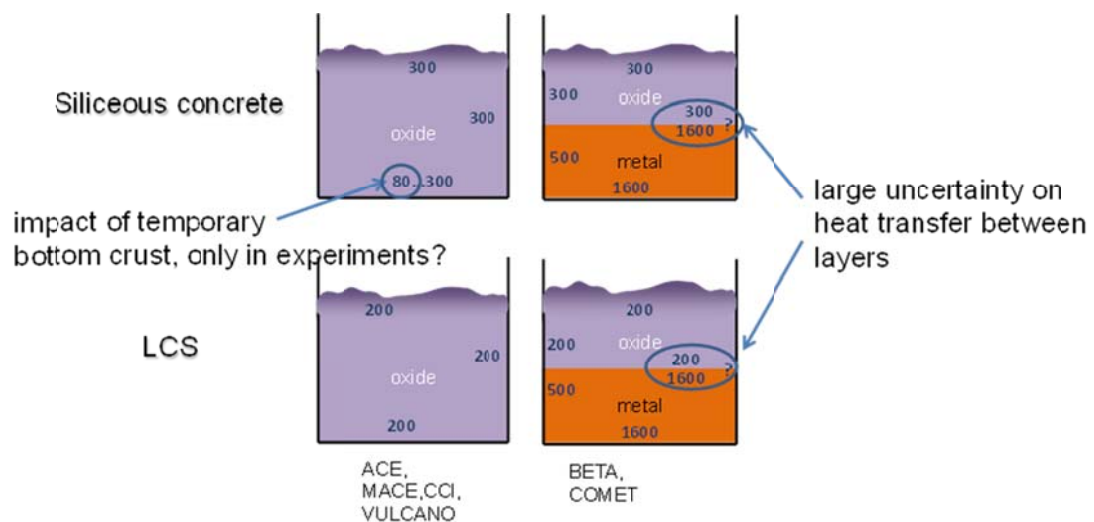


Abb. 3-22 Vorschlag für die Verwendung von effektiven Wärmeübergangskoeffizienten für die Beschreibung von 2D-MCCI-Phänomenen in Versuchen mit der Modelloption der GRS in MEDICIS

3.2.3 Spaltproduktfreisetzung aus MEDICIS

Gemäß Arbeitsprogramm wurde unter diesem Punkt ein Modell zur adäquaten Berücksichtigung der Freisetzung von Spaltprodukten und Aerosolen aus der Schmelze in einer Reaktorgrube an COCOSYS-MEDICIS angebunden und getestet. MEDICIS war in COCOSYS im Rahmen des Vorhabens RS 1159 anstelle des ursprünglichen Rechen-codes WECHSL zur Simulation von MCCI eingebaut worden. Zwischenzeitlich ist von VEIKI, Ungarn, ein Modell für die Freisetzung von Spaltprodukten in ASTEC V1.3 Rev 2 entwickelt worden /KOS 07/.

Im Rahmen des hier zu berichtenden Vorhabens RS1185 wurde die Modellgrundlage des VEIKI Modells eingehend studiert und überprüft /SPE 11/ und entschieden, das Modell in COCOSYS-MEDICIS zu übernehmen. Es wurde anhand eines Versuches zur Ex-Vessel Freisetzung von Spaltprodukten (ACE-L6) überprüft. Für die Anbindung waren einige technische Arbeiten im Bereich der Schnittstellen zwischen MEDICIS und COCOSYS für die Übergabe der in einem Zeitschritt berechneten, freigesetzten Spaltproduktmassen erforderlich.

3.2.3.1 Modellannahmen zur Spaltproduktfreisetzung aus der Schmelze

Separat von den Brennstoff- und Strukturmaterialien, aus denen die Kernschmelze hauptsächlich besteht, kann nun im MEDICIS-Input das Spaltproduktinventar der Kernschmelze vorgegeben werden. Dies erfolgt in Form einer Tabelle mit Elementen oder chemischen Verbindungen, deren Massen (kg) das Inventar zu Beginn der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (i. A. = Versagenszeitpunkt RDB) darstellen.

Die Eingabedatei für die Zusammensetzung der oxidischen Schmelze inkl. Spaltprodukte sieht für das Beispiel des Versuches ACE-L6 folgenderweise aus:

```
SRG MASS                !
O2U      219.0
O2Zr     18.5
Zr        21.1
Fe         9.1
CaO        7.3
O2Si     16.9
TERM
SRG FP
BaO       0.79
LaO1.5    0.6
OSr        0.5
CeO2      1.3
Ru         0.38
```

Ag	1.19
In	0.22
MoO2	0.94
Te	0.15

TERM

SR1 PRESID	
-3.7500000	74583.333
70.5000000	78333.333
151.5000000	75000.000
354.0000000	92500.000
387.7500000	89583.333
455.2500000	100000.000
516.0000000	100000.000
529.5000000	90416.667
590.2500000	88750.000
718.5000000	104583.333
833.2500000	102916.667
873.7500000	96250.000
981.7500000	104166.667
1083.0000000	102083.333
1170.7500000	72916.667
1258.5000000	60416.667
1272.0000000	28333.333
1366.5000000	28333.333
1380.0000000	98750.000
1407.0000000	101250.000
1488.0000000	90833.333
1650.0000000	90833.333
1704.0000000	107916.667
1758.0000000	102083.333
1845.7500000	106666.667
1920.0000000	102083.333
1947.0000000	118333.333
1987.5000000	102500.000
2190.0000000	104166.667
2264.2500000	108750.000
2331.7500000	105416.667
2392.5000000	107916.667
2824.5000000	102916.667

TERM

Der erste Abschnitt (SRG MASS) repräsentiert die Massen von Kern- und Strukturmaterialien. Der zweite Abschnitt (SRG FP) beziffert die Massen von Spaltprodukten. Der dritte Abschnitt definiert die Nachzerfallswärmeleistung als Funktion der Zeit (s, W). Für die Definition der Zusammensetzung der Schmelze stellt das VEIKI-Modell eine erweiterte Datenbasis zur Verfügung /KOS 07/, die die Elemente Ag, Al, B, Ba, C, Ca, Cd, Ce, Cr, Cs, Eu, Fe, H, Hf, In, K, La, Mg, Mo, Na, Nd, Ni, Np, O, Pr, Pu, Rb, Re, Ru, Sb, Si, Sn, Sr, Te, Ti, U, W, Zr und Y umfasst sowie die Verbindungen (in ASTEC-Notation) Al₂O₃, BaO, BaMoO₄, CaO, CeO₂, Ce₂O₃, CrO_{1.5}, CsHO, CsO₂, Cs₂MoO₄, EuO, Eu₂O₃, FeO, FeO_{1.5}, HfO₂, InO_{1.5}, K₂O, LaO_{1.5}, MgO, MoO₂, MoO₃, Na₂O, NaTe₃, Nd₂O₃, NiO, O₂Pu, O₂Rb, O₂Si, OSr, O₂Te, O₂U, O₃W, O₂Zr, O₃Y₂, Re₂Y, SnTe (in der

MDB-Datei „Poolcav.mdb“). In MEDICIS selbst werden keine weiteren Zerfallsprozesse in der Schmelze berücksichtigt.

Für die Freisetzung von Spaltprodukten wird angenommen, dass der durch die oberste Schmelzeschicht bzw. durch die Kruste hindurchtretende Gasvolumenstrom aus der Betonzersetzung (s. Abb. 3-23, kann die Gase H₂, H₂O, CO oder CO₂ enthalten) im vollständigen Gleichgewicht mit der flüssigen Schmelze steht.

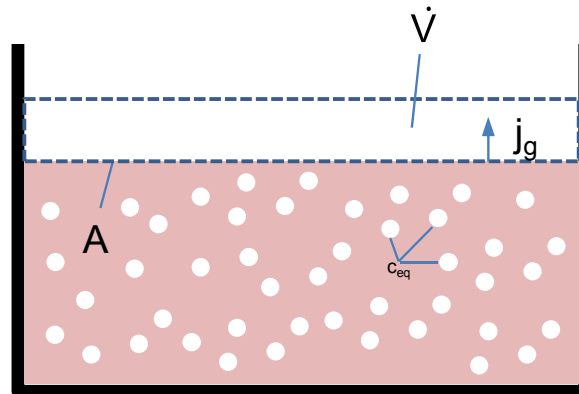


Abb. 3-23 Modellskizze für die Ex-Vessel-Freisetzung von Spaltprodukten

$$\dot{m}_i = \dot{V}_g M_i c_{i,eq} \quad (3-12)$$

Die Gleichgewichtskonzentration $c_{i,eq}$ einer Komponente i wird auf den Gleichgewichtsdampfdruck P_i der flüssigen Substanz i zurückgeführt:

$$c_{i,eq} = \frac{N_i}{V} = \frac{P_i}{RT} \quad (3-13)$$

Kern des Modells ist die Berechnung der Gleichgewichtsdampfdrücke für die Substanzen der Flüssigkeit. Dazu wird zunächst eine thermodynamische Gleichgewichtsrechnung für die Flüssigkeit auf der Basis ihrer elementaren Zusammensetzung durchgeführt, um zu ermitteln, aus welchen Substanzen die Flüssigkeit besteht. Für jede dieser Substanzen wird unter Zugrundelegung weiterer Annahmen der Gleichgewichtsdampfdruck mit der Gleichung

$$P_i = f_{m,i,l} P_0 e^{-\frac{\mu_{i,g}^0 - \mu_{i,l}^0}{RT}} \quad (3-14)$$

ermittelt. Hierin stehen $f_{m,i,l}$ für das molare Stoffmengenverhältnis der Substanz bezogen auf die gesamte Flüssigkeit und $\mu_{i,g}^0$ bzw. $\mu_{i,l}^0$ für die chemischen Potentiale der Substanz i in Flüssigkeit bzw. Gasphase unter Standardbedingungen. Die chemischen Potentiale werden der Materialdatenbank MDB entnommen.

Rechnerische Ergebnisse für die Spaltproduktfreisetzung bei dem Versuch ACE-L6 zeigt die Abb. 3-24 und Abb. 3-25. Die Abweichungen zu den Messwerten in Abb. 3-25 entsprechen in etwa dem State-of-the-Art bezüglich der allgemein bekannten Unsicherheiten auf diesem Gebiet. Allein die deutliche Unterschätzung der Elemente La und Mo, evtl. auch Ru, bedarf einer weiteren Untersuchung. Bei der Ruhr-Universität Bochum sind weitere Validierungsarbeiten mit ASTEC-MEDICIS zur Spaltproduktfreisetzung aus der Ex-Vessel-Kernschmelze geplant, aus denen Rückflüsse auch für COCOSYS erwartet werden. Diese werden im anschließenden Vorhaben zur Entwicklung von COCOSYS und ASTEC ausgewertet.

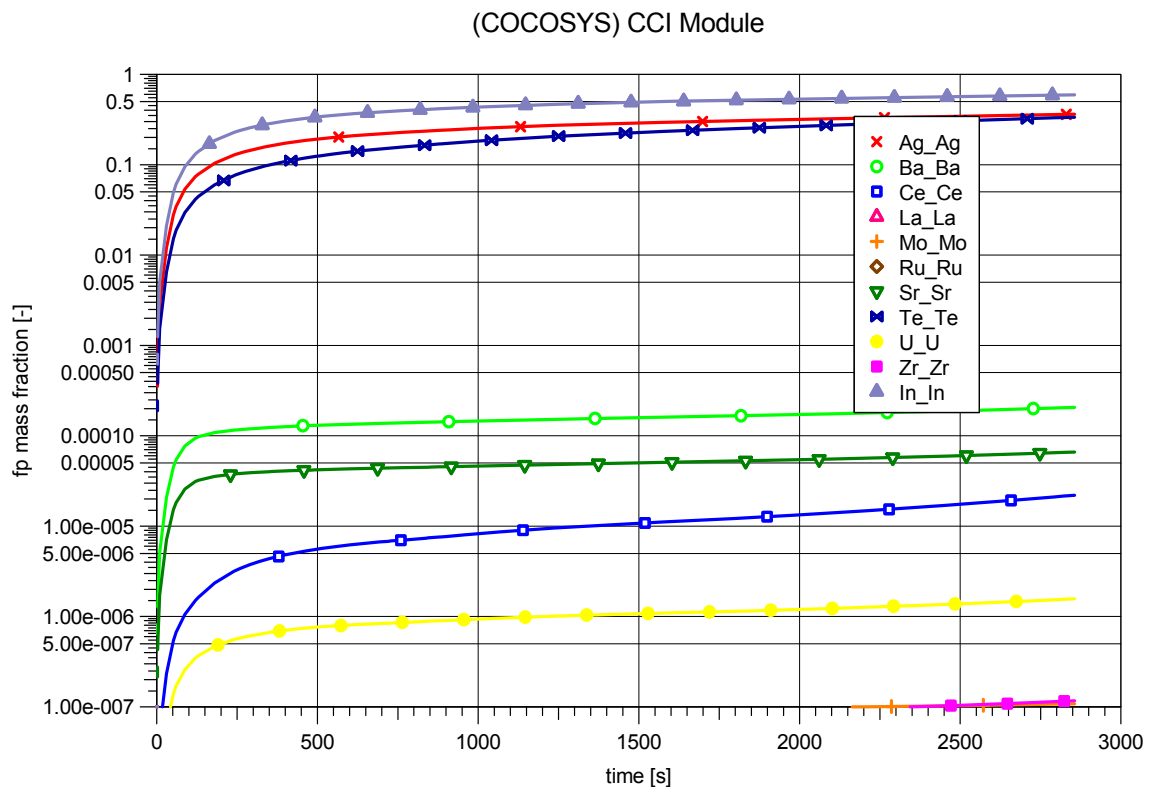


Abb. 3-24 Berechnung der frei gesetzten Massenanteile (bezogen auf das Anfangsinventar) für den Versuch ACE-L6.

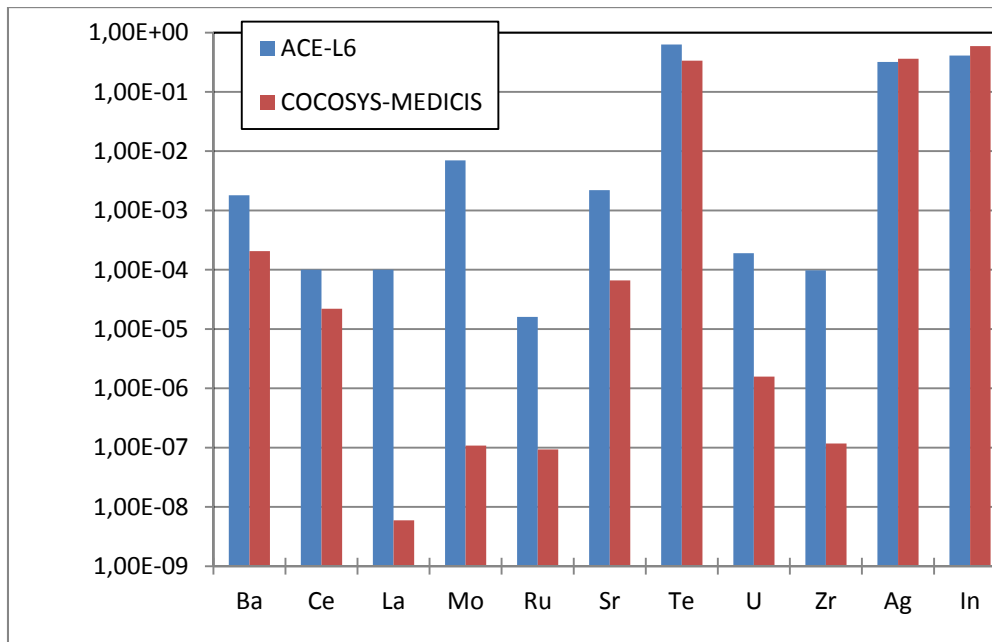


Abb. 3-25 MEDICIS-Ergebnisse für die integralen frei gesetzten Massenanteile von Spaltprodukten, bezogen auf das Anfangsinventar, für den Versuch ACE-L6

3.2.3.2 Behandlung der freigesetzten Spaltprodukte in COCOSYS

An COCOSYS werden zwei Informationen weitergegeben:

1. Alle aus der Schmelze freigesetzten Spaltproduktmassen werden für jeden von COCOSYS vorgegebenen Zeitschritt von MEDICIS für die Bilanzierung getrennt nach Elementen an COCOSYS übergeben.
2. Da angenommen wird, dass die Spaltprodukte in der Atmosphäre der Reaktorgrube kondensieren, werden die Spaltprodukte in der Summe (d. h. mit einem integralen Massenstrom) auf ein Aerosol übertragen. Dieser integrale Aerosolmassenstrom aus der Schmelze wird einem in der COCOSYS-Eingabedatei zu benennenden Aerosol zugeordnet. Diese Aerosole sind i.d.R. nicht identisch mit Quellen aus dem Reaktorkreislauf, die mit ATHLET-CD berechnet werden, und werden daher gesondert behandelt.

Für das benannte Aerosol gibt es dann also in der Reaktorgrube eine Quelle (kg/s), die in COCOSYS-AFP berücksichtigt wird. Zu dieser Aerosolquelle werden die entsprechenden Spaltproduktmassen zugeordnet. In diesem so berechneten Massenstrom geht ausschließlich die wie in der Modellbeschreibung oben dargelegte Verdampfung

von flüssigen Spaltprodukten unter Annahme eines Gleichgewichtes mit dem Gasstrom aus der Betonzersetzung ein. Zum realen Prozess trägt aber noch ein weiteres Phänomen bei, das durch dieses Modell bislang nicht abgedeckt ist: Die mechanische Suspension von Aerosolen aus der Schmelze durch Mitriß von Tröpfchen in der Folge des Zerplatzens von Gasblasen beim Austritt des Gasstroms aus der Schmelze. Hierfür ist bislang kein Modell verfügbar. Um dennoch einen wie z. B. durch diesen Mechanismus erhöhten Aerosolmassenstrom zu berücksichtigen, kann der Aerosolmassenstrom von der Kernschmelze an die Atmosphäre der Reaktorgrube – nicht aber der darin enthaltene Spaltproduktanteil – durch eine verfügbare Aerosolfreisetzungskorrelation in MEDICIS erhöht werden. In dieser wird über die Gleichung

$$c_{eq} = c_0 e^{\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right)} (\alpha j_g + \beta) \quad (3-15)$$

eine Gleichgewichtskonzentration c_{eq} (kg/m³) der Aerosole in dem aus der Kernschmelze austretenden Gasvolumenstrom $\dot{m}_{gas} = j_g A$ angesetzt. Der Aerosolmassenstrom (kg/s) erhöht sich dann um den Beitrag:

$$\dot{m}_{aero} = c_{eq} j_g A. \quad (3-16)$$

Die Parameter c_0 , ΔE , α , β werden im Input vorgegeben. $c_0 e^{\left(\frac{-\Delta E}{RT}\right)}$ stellt einen Arrhenius-Ansatz dar, wie er üblicherweise für thermisch aktivierte Vorgänge verwendet wird. Dieser wurde mit einem Faktor $(\alpha j_g + \beta)$ versehen, um den Einfluss der Gasgeschwindigkeit zu berücksichtigen. Die Eignung dieser Korrelation für den realen Vorgang des Blasenzerplatzens muss noch untersucht werden. Hier werden Rückwirkungen aus Arbeiten an der Ruhr-Universität Bochum erwartet.

3.3 Kopplung MCCI in Unfallabläufen

In diesem Arbeitspunkt wurden technische Arbeiten zur Aktualisierung der Anbindung des Ex-Vessel-Moduls an COCOSYS durchgeführt. Die Arbeiten orientierten sich an den durchgeführten Modelländerungen. Dabei standen die Erweiterung von MEDICIS für Flutungsbedingungen (vgl. Abschnitt 3.2.2) und zur Freisetzung von Spaltprodukten (vgl. Abschnitt 3.2.3) im Mittelpunkt.

Die Modelländerungen an MEDICIS machten Änderungen am Datenaustausch zwischen MEDICIS und COCOSYS bzw. dem Thermohydraulikteil THY und dem Spalt-

produkt- und Aerosolteil AFP nötig. Der Datenaustausch zu folgenden physikalischen Größen wurde entsprechend des Modellfortschrittes aktualisiert:

- Oberfläche und Temperatur der Schmelze in der Reaktorgrube unter trockenen wie nassen Bedingungen
- in THY berechnete Wärmeübergangszahlen für Konvektion und Strahlung zwischen Schmelzeoberfläche und Reaktorgrube (Atmosphäre, Strukturen) für den kontinuierlichen Wärmeübergang bei trockenen Bedingungen
- in MEDICIS berechnete Verdampfungsleistung aus dem Siedemodell für den Wärmeübergang von der Schmelzeoberfläche an das Wasser darüber bei gefluteten Bedingungen
- aus der Betonzerstörung (durch die Schmelze) freigesetzte Gasmassenströme und integraler Enthalpiestrom der Gase. Unter gefluteten Bedingungen wird angenommen, dass der aus der Betonzerstörung freigesetzte Wasserdampf in der Wasservorlage kondensiert.
- aus der Schmelze frei gesetzte Masse an Spaltprodukten (nach Elementen) und integrale Aerosolmasse
- Größen, die für die Restart-Fähigkeit von MEDICIS benötigt werden

Ferner waren einige Anpassungen an MEDICIS in COCOSYS nötig, um die Restart-Funktionalität, die prinzipiell über die Einbettung von MEDICIS in ASTEC-Strukturen gegeben ist, an die speziellen Bedürfnisse von COCOSYS anzupassen.

Die ursprünglich im Arbeitsprogramm vorgesehenen weitergehenden Untersuchungen zur Tauglichkeit im Rahmen bestimmter Anlagenszenarien, speziell für SWR-69, sind zurück gestellt worden. Die Überprüfung und ggf. Modellertüchtigung für deutsche SWR der Baulinie 69 – wie im Angebot ursprünglich vorgesehen – ist vor dem Hintergrund der Abschaltung der SWR-69 entsprechend der Novellierung des Atomgesetzes in 2011 nicht mehr erforderlich. Andererseits werden im Nachgang zu Fukushima zurzeit international konzertierte Aktivitäten zur Klärung von Phänomenen bei schweren Störfällen für SWR angestoßen, an denen sich die GRS zukünftig z. B. über die Mitarbeit in SARNET beteiligen wird. Im Arbeitspaket WP 6 MCCI von SARNET2 sind hierzu beispielsweise unter Beteiligung der japanischen Behörde JNES gezielte Anwendungen von MCCI-Codes zum Fukushima-Szenario in Planung.

Technische Unterstützungen von kleinerem Umfang zur Durchführung von Anlagenrechnungen unter Beteiligung des neuen Ex-Vessel-Moduls MEDICIS in COCOSYS sind für Anlagen vom Typ WWER durchgeführt worden. Im Rahmen des BMU-Vorhabens I0801512 (INT Ost) gab es hierzu eine erste Kooperation zwischen der GRS und der armenischen Organisation NRSC mit der Zielsetzung, Unfallszenarien für Block 2 des KKW Armenien vom Typ WWER-440/V-270 zu untersuchen. Weiterhin ist im Vorhaben 3611I01512 in Kooperation mit ENPRO (Bulgarien) damit begonnen worden, die in den COCOSYS-Code implementierte Version des Modules MEDICIS für das KKW Kozloduy 5 (WWER-1000/W-320) anzuwenden. Im Feedback aus diesen Anlagenrechnungen wurden bereits kleinere Fehler in der Ankopplung von MEDICIS an COCOSYS behoben sowie die Ausgabe-Erzeugung verbessert. Da die BMU-Arbeiten zurzeit noch weitergeführt werden, ist weiteres Feedback zur Anwendung von COCOSYS-MEDICIS in Anlagenrechnungen zu erwarten, sodass weitere Korrekturen/Verbesserungen am Rechencode MEDICIS auch im nachfolgenden Entwicklungsvorhaben eingeplant werden.

4 Modellentwicklung für ASTEC

Gemeinsam mit IRSN entwickelt die GRS den Integral Code ASTEC (**A**ccident **S**ource **T**erm **E**valuation **C**ode) /REI 11, DOR 06, DOR 09/ mit den Zielen:

- Berechnung des integralen Anlagenverhaltens und Ermittlung radiologischer Freisetzungen aus dem Sicherheitsbehälter in die Umgebung,
- Deterministische Analysen als Basis für PSA der Stufe 2,
- Untersuchungen zu präventiven und mitigativen Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes,
- Begleitung und Analyse von Experimenten.

ASTEC liegt aktuell zum Ende des Vorhabens in der Version ASTEC V2.0 Revision 2 vor und besteht im Wesentlichen aus den in Abb. 4-1 dargestellten Modulen.

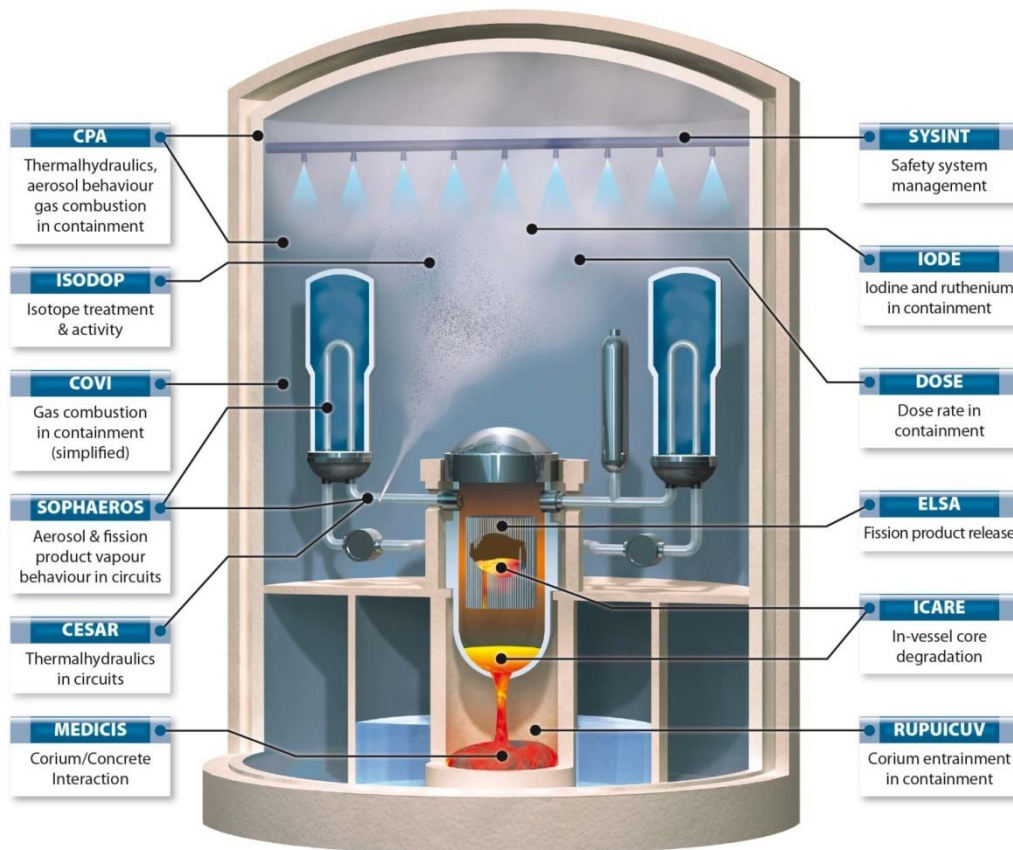


Abb. 4-1 Struktur von ASTEC V2

Für die im Weiteren beschriebenen Arbeiten im Vorhaben sind die beiden Module CESAR und CPA bedeutend:

- **CESAR:** Modul zur Beschreibung der zweiphasigen Thermohydraulik im gesamten Reaktorkühlkreislauf einschließlich Druckhalter (DWR) in der Front-End-Phase. Die zwei Phasen sind Wasser und Dampf mit weiteren nichtkondensierbaren Gasen (z. B. Wasserstoff). Mit Beginn des Kernschmelzens wird auf das Modul ICARE umgeschaltet und die Thermohydraulik im Reaktordruckbehälter von ICARE berechnet. CESAR berechnet dann nur noch die Thermohydraulik im Reaktorkühlkreislauf. ICARE wird z. Zt. für die Anwendung auf SWR bei IRSN ertüchtigt.
- **CPA:** Modul zur Beschreibung wesentlicher Vorgänge im Sicherheitsbehälter (Synthese mit wesentlichen COCOSYS Teilen) für DWR und SWR mit den folgenden zwei Untermodulen:
 - **THY** für Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter
Dieses Modul beschreibt Prozesse und Phänomene wie Gasverteilung, Druckaufbau, Wasserstoffverbrennung, Wassertransport, Wasserstoffrekombination

mit katalytischen und thermischen Rekombinatoren, Verhalten von Sicherheitssystemen und Pumpensystemen usw..

- AFP für Aerosol- und Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter

Die Modelle für Aerosol- und Spaltproduktverhalten (Transport und Ablagevorgänge) basieren auf den entsprechenden Modellen in FIPLOC. Das neu entwickelte Spaltprodukttransportmodell FIPHOST ist integriert. Der Aerosoltransport durch Wasservorlagen (Kondensationskammer eines SWR) wird mit dem Pool-Scrubbing-Modell SPARC-B simuliert.

Nachfolgend werden die einzelnen Arbeiten im Vorhaben beschrieben.

4.1 Modelle für SWR

Die Thermohydraulik des Reaktorkühlkreislaufs wird in ASTEC mit Hilfe des Moduls CESAR simuliert. CESAR ist bisher primär für die Modellierung eines DWR-Reaktorkühlkreislaufs entwickelt, validiert und angewendet worden. Im Vorläufervorhaben waren erstmalig Schritte durchgeführt worden, um CESAR für die Anwendung auf SWR zu testen. Hier waren z. B. Fragen zum Wasser-Dampf-Separator im RDB zu beantworten. Spezielle Fragestellungen z. B. hinsichtlich der Modellierbarkeit von Jetpumpen, wie sie z. B. auch noch bei den SWR in Fukushima im Einsatz waren, wurden außer acht gelassen, da in deutschen Anlagen der Umwälzbetrieb durch interne Zwangsumwälzpumpen sichergestellt wird. Als Vorlage für den Datensatz wurde ein SWR deutscher Bauart des Typs 69 ausgewählt. Für die Nodalisierung wurde als Basis eine Eingabe für den Integralcode MELCOR verwendet, die ihrerseits auf einer ATHLET-CD-Eingabe basiert. Die mit diesem Modell erreichten Ergebnisse zeigen die grundsätzliche Fähigkeit von CESAR, einen SWR-Reaktorkreislauf unter thermohydraulischen Gesichtspunkten abzubilden.

Ziele des aktuellen Vorhabens waren zum einen die weitere Qualifizierung des SWR-CESAR-Datensatzes und die Durchführung einer Vergleichsrechnung mit ATHLET-CD sowie zum anderen die Kopplung des CESAR-Datensatzes mit einem bereits verfügbaren CPA-Datensatz für ein Containment eines SWR deutscher Bauart der Baulinie 69. Die erfolgreiche Kopplung ermöglicht dann eine erste Anwendung von ASTEC auf Auslegungsstörfälle bei SWR ohne eine detaillierte Modellierung des Reaktorkerns. Dazu ist die Ertüchtigung von ICARE erforderlich. Die Arbeiten sind teilweise in SARNET2 eingeflossen und dort dokumentiert. Nachfolgend wird eine erweiterte Zu-

sammenfassung gegeben. Für weitere, umfangreiche Informationen sei auf die entsprechenden Arbeitsberichte für SARNET2 verwiesen /CHA 10b, CHA 11c, CHA11e/.

4.1.1 Ertüchtigung des CESAR-Datensatzes

Der im Vorläufervorhaben erstellte Basis-Datensatz für einen SWR-Reaktorkreislauf wurde weiterentwickelt. Dies betraf zunächst die Anpassung des Datensatzes beim Übergang von der ASTEC-Version V1 auf die Version V2. Hier waren z. B. bestimmte Systeme im Datensatz anders abzubilden. Des Weiteren wurde die zunächst bewusst recht einfach gehaltene thermodynamische Nodalisierung des Reaktordruckbehälters bzw. der Kernregion sukzessive verfeinert. So wurde die Kernregion axial in 15 statt der vormals nur 4 Zellen unterteilt, um eine realistischere Simulation des zwei-Phasen Gebietes zu ermöglichen. Der Übersichtlichkeit halber sind von den 15 Kernzonen nur die unteren drei und die oberen zwei in Abb. 4-2 dargestellt.

Weiterhin wurde der Wasser-Dampf-Separator mit einem zusätzlichen Volumen nodalisiert, um eine bessere Phasentrennung zu erzielen. Schließlich musste dann auch die Simulation der stationären Phase überarbeitet werden um die realen Anlagenparameter besser abzubilden. Dazu wurden alle thermodynamischen Anfangszustände (Druck, Temperatur) im Bereich von Kern und Bypass überarbeitet und mit Werten aus den Eingaben von ATHLET-CD bzw. MELCOR belegt. Eine weitere Änderung erfolgte bei der Festlegung der Werte für die Berechnung des Druckverlustes in verschiedenen Verbindungen. Die Werte wurden so überarbeitet, dass die erwarteten Massenströme entsprechend der ATHLET-CD-Rechnung besser erreicht werden konnten.

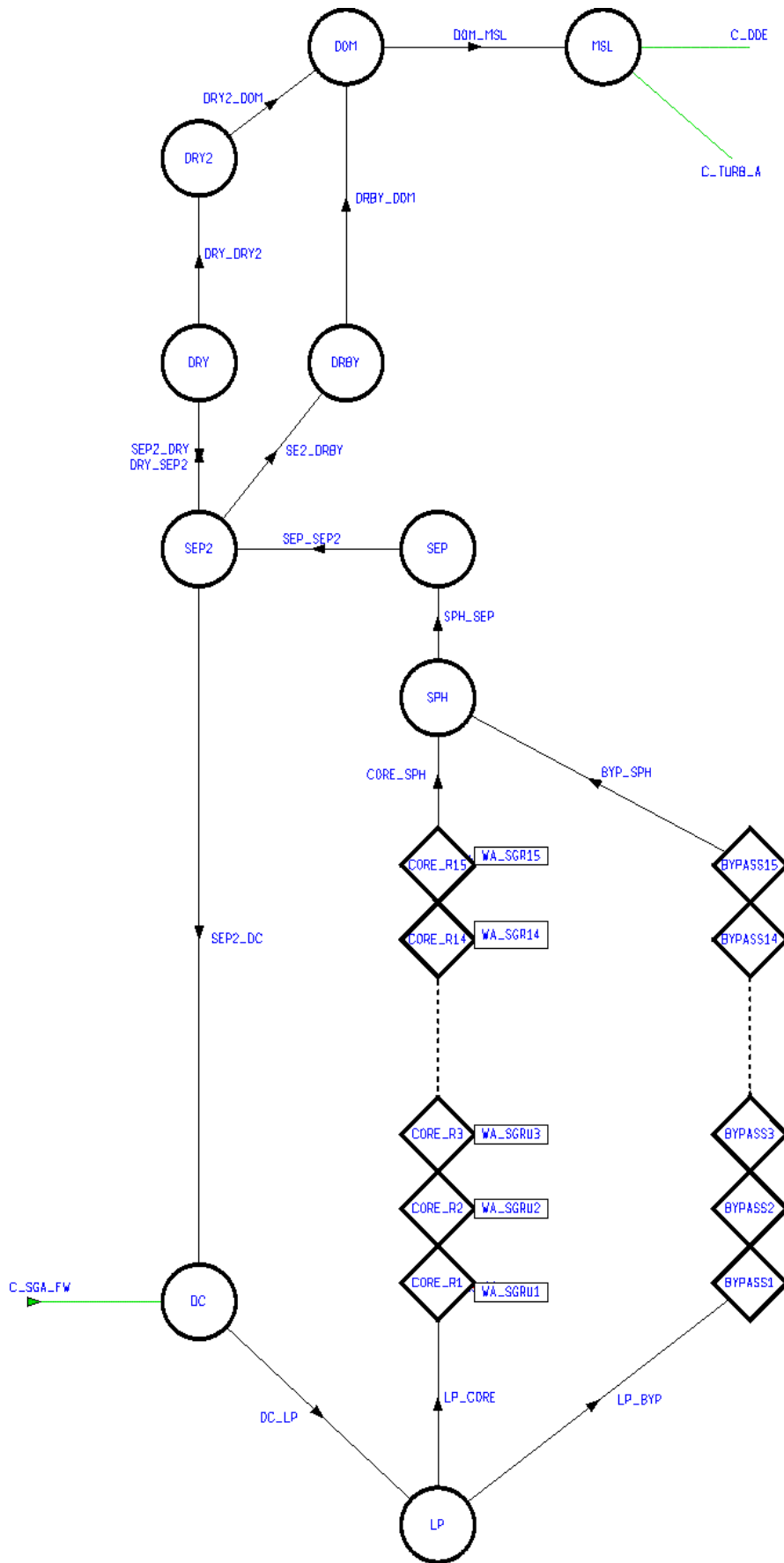


Abb. 4-2 CESAR-Nodalisationsschema für einen SWR-Reaktorkreislauf

Charakteristische thermohydraulische Parameter aus ASTEC für den stationären Anlagenzustand sind in Tab. 4.1 den ATHLET-Daten gegenübergestellt. In Anbetracht der relativ einfachen Nodalisierung bei ASTEC ist die Übereinstimmung zufriedenstellend.

Tab. 4-1 Thermohydraulische Parameter im stationären Anlagenzustand

	Name	ATHLET-CD	ASTEC
Druck im RDB-Dom	DOM	7,04 MPa	7,02 MPa
Massenstrom im Downcomer	DC_LP	10330 kg/s	10448 kg/s
Massenstrom in der Frischdampfleitung	DOM_MSL	1378 kg/s	1263 kg/s
Massenstrom am Kerneintritt	LP_CORE	9411 kg/s	9434 kg/s
Massenstrom durch Kernbypass	LP_BYB	924 kg/s	1017 kg/s

Zum Vergleich mit Ergebnissen einer ATHLET-CD-Rechnung wurde eine einfache Transiente mit „Totalausfall der Stromversorgung“ gewählt. Die Simulation der Transiente wurde für beide Programme für die ersten 9000 s des Ereignisablaufes durchgeführt. Bereits ab ca. 6000 s prägen dann zunehmend die Kernaufheiz- und Kernzerstörungsvorgänge den weiteren Verlauf, die in ASTEC die Aktivierung des Moduls ICARE bedingen, das für SWR noch nicht verfügbar war. Das aktivierte CESAR Modul kann nur rein thermohydraulische Phänomene (Druck, Temperatur, Dampfanteil etc.) simulieren, so dass der Vergleich der Ergebnisse untergeordnete Bedeutung hat.

Beispielhaft ist in Abb. 4-3 der Druckverlauf im Dom des RDB sowie in der Frischdampfleitung für die Rechnung beider Programme gegenübergestellt. Mit Beginn des unterstellten kompletten Ausfalls der Stromversorgung fallen die Zwangsumwälzpumpen und die Speisewasserversorgung aus. Die Sicherheits- und Entlastungsventile (S/E-Ventile) wurden ebenfalls als nicht verfügbar angenommen. Die Druckbegrenzung erfolgt dann über die diversitären Druckbegrenzungsventile und der Dampf wird in die Kondensationskammer abgegeben. Da das Öffnungsverhalten dieser Ventile in den Programmen nicht identisch modelliert wird, sind hier geringe Abweichungen zu erkennen. Zudem erfolgt das Abblasen noch nicht in die Kondensationskammer sondern in einen fiktiven Raum, der einen konstanten Gegendruck von 10^5 Pa bildet. Der Containmentteil CPA von ASTEC wurde erst in einem 2. Schritt aktiviert (siehe Kap. 4.1.2).

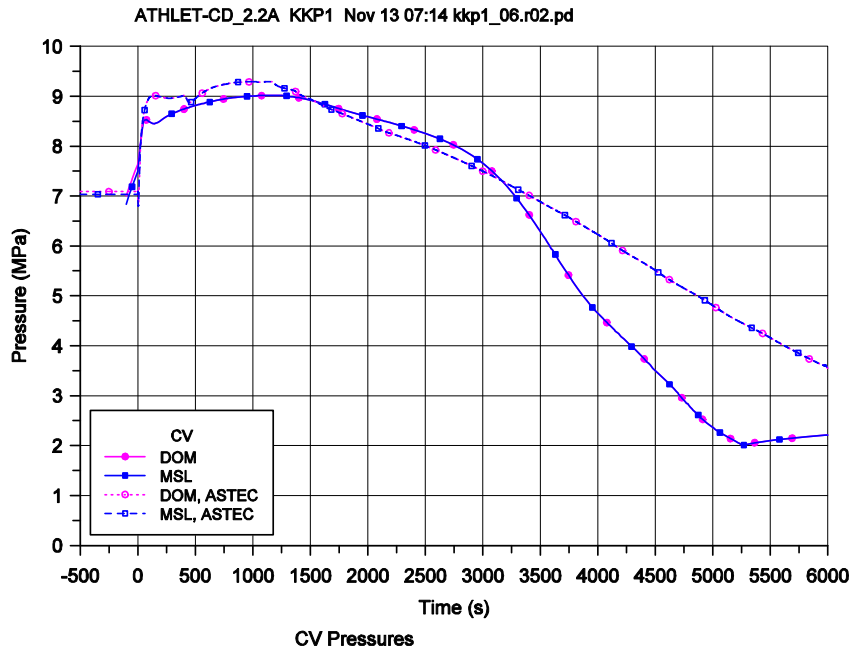


Abb. 4-3 Druckverlauf in RDB (DOM) und Frischdampfleitung (MSL), Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD

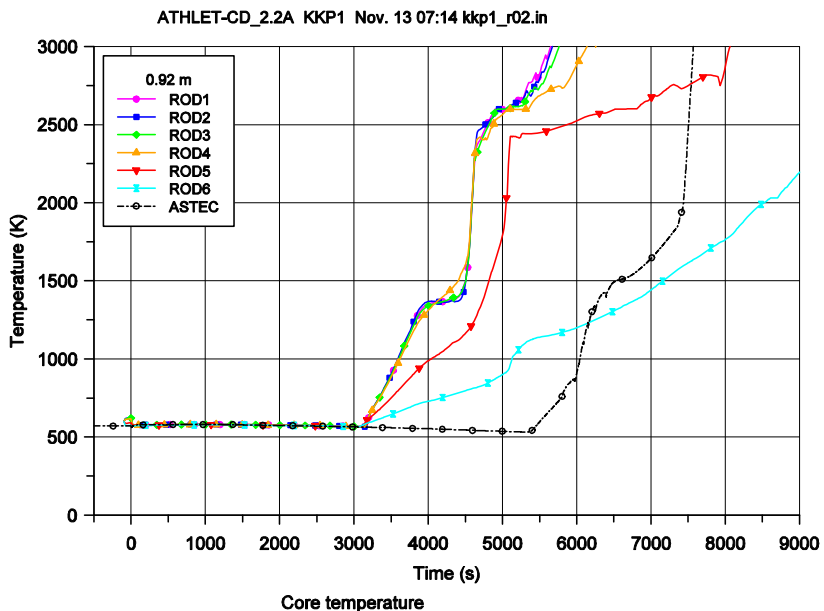
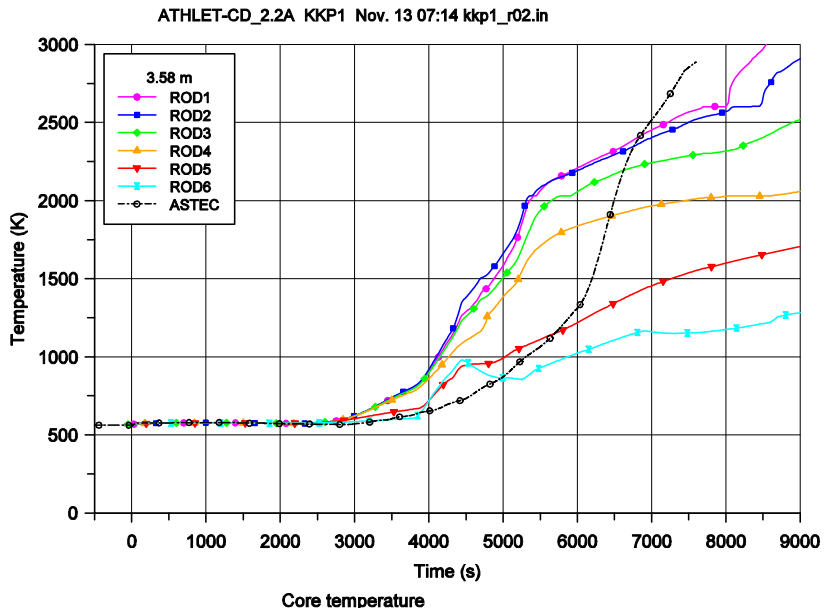
Der prinzipielle Verlauf des Druckes im Störfall in der ersten Stunde wird von ASTEC in guter Übereinstimmung mit ATHLET-CD wiedergegeben. Ab diesem Zeitpunkt zeigen sich dann zunehmend größere Abweichungen, die unter anderem auf die gröbere axiale Unterteilung der Kernregion in ASTEC und die einsetzende Kernaufheizung und –zerstörung (siehe Abb. 4-4) zurückzuführen sind.

Während ATHLET-CD sechs parallele Kernringe definiert, wurde bei ASTEC in CESAR der Kern nur mit einer mittleren, axial mehrfach unterteilten Kernzone definiert. Eine radiale Verteilung der Leistung kann somit nicht wie in ATHLET-CD simuliert werden. Für prinzipielle Tests der Anwendbarkeit von ASTEC auf SWR ist das ausreichend, da für die zukünftig durchzuführenden Anlagenrechnungen mit Kernzerstörung auch das Modul ICARE erweitert und aktiviert werden muss, welches eine eigene Nodalisierung für die Kernregion erfordert.

In diesem Sinne sind auch die unterschiedlichen Ergebnisse der Zustände in der Kernregion zu interpretieren. Diese werden mit zunehmendem Ausdampfen des Kerns offensichtlich. Die Abb. 4-4 zeigt beispielhaft die Temperaturen der Hüllrohroberfläche 0,92 m oberhalb der Kernunterkante und 3,95 m oberhalb der Kernunterkante. Entsprechend der Nodalisierung sind für ATHLET-CD sechs Temperaturverläufe und für ASTEC ein Temperaturverlauf gezeigt. Bei qualitativ recht ähnlichen Verläufen zeigen

sich jedoch auch deutliche Unterschiede, die insbesondere den zeitlichen Beginn der Aufheizung betreffen. In den ATHLET-CD-Rechnungen zeigt sich bedingt durch die radiale Leistungsverteilung, dass die Aufheizung am stärksten im Kernzentrum ist während äußere Kernbereiche deutlich langsamer aufgeheizt werden.

Nach ca. 4000 s errechnet ATHLET-CD die erste Wasserstoffproduktion. Zu diesem Zeitpunkt führen Temperaturen von 1300 K zu verstärkter Oxidation des Zirkoniums (Zr) der Hüllrohre und der Brennelementkästen. Aufgrund des exothermen Charakters der Zr-Dampf-Reaktion wird zusätzliche Energie ins System eingetragen und die Aufheizung nachfolgend noch verstärkt (sog. Temperatureskalation). In der ATHLET-CD-Rechnung kann dies deutlich an der verstärkten Aufheizung ab 4500 s festgestellt werden. Das Fehlen solcher Modellierungsmöglichkeiten in CESAR verhindert eine entsprechende Aufheizung.



2010/03/22 7:48 Y:\KKP1 athlet\kkr1\kkr1_06_r02.cd nod tc. swr34 Page 03

Abb. 4-4 Hüllrohroberflächentemperaturen im oberen und unteren Kernbereich, Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD

In der Abb. 4-5 ist für höher und tiefer gelegene Kernbereiche der Dampfgehalt (void) dargestellt. In der Stationärphase der Rechnungen (negative Zeiten) nimmt der Dampfanteil im Kernbereich nach oben stetig zu. Mit Initiierung der Transiente (Reaktorabschaltung, Pumpenauslauf, etc.) bricht dann der Umlauf im Reaktor zusammen und zunächst auch aufgrund des dann reduzierten Wärmeeintrags auch der Dampfgehalt. Der Druck steigt nachfolgend an.

Nach Öffnen der diversitären Druckentlastungsventile verliert der Kühlkreislauf stetig Kühlmedium und der Wasserstand im RDB sinkt. Damit steigt der Dampfgehalt in den einzelnen Kernzonen sukzessive an. Insgesamt zeigt sich ein qualitativ ähnlicher Verlauf in beiden Analysen, jedoch ein deutlich unterschiedlicher zeitlicher Ablauf. Dieser ist mit den Vereinfachungen in der Kernmodellierung, wie oben erwähnt, zu begründen.

Weitere Gründe für den früheren Beginn des Ausdampfens bei ASTEC im oberen Kernbereich könnten in der unterschiedlichen Nodalisierung des oberen Plenums einschließlich des Wasserabscheiders und Dampftrockners liegen. ATHLET-CD verwendet dafür ein eigens entwickeltes Modell. Dieses Separator-Trocknermodell übernimmt die Separation des Wasser-Dampf-Gemisches und die Verteilung des Wasser- und Dampfmassenstroms ober- und unterhalb des Wasserspiegels in Dampfdom und Downcomer. Eine entsprechende Modellierung ist in ASTEC nicht vorhanden, wengleich eine Separation auch in ASTEC vorgegeben werden kann. Eingehende Untersuchungen, wie der Separationsprozess im Verlauf der Transiente abläuft, stehen noch aus.

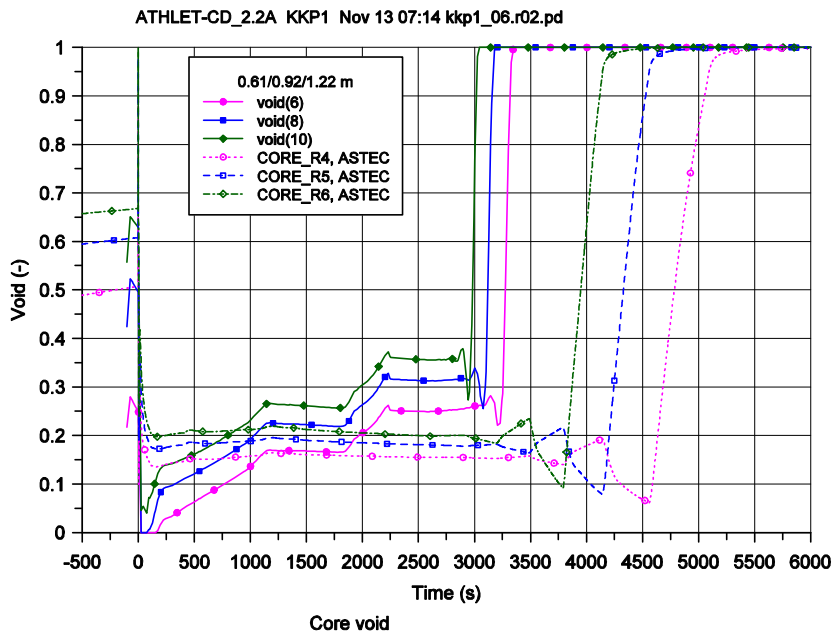
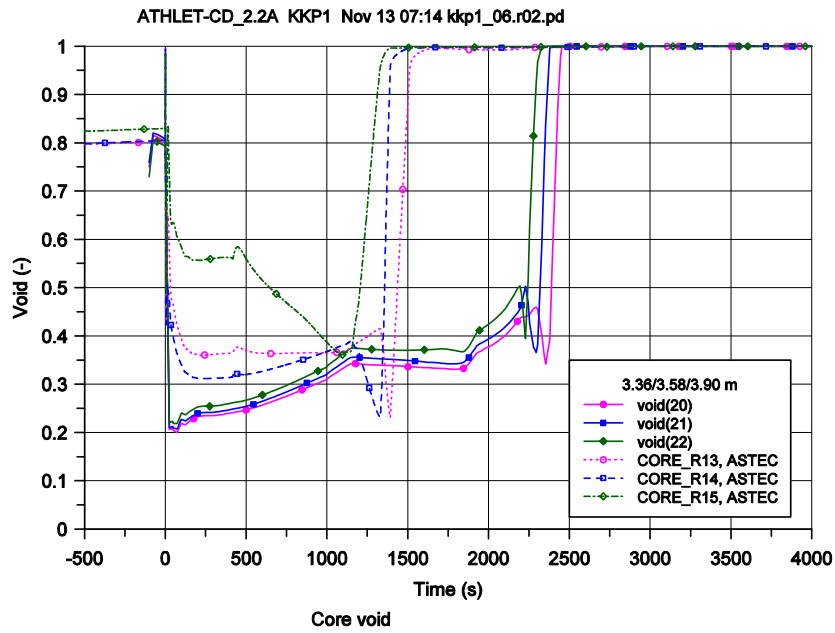


Abb. 4-5 Dampfanteil in den oberen und unteren Kernbereichen, Vergleich ASTEC-CESAR und ATHLET-CD

4.1.2 ASTEC-Testrechnungen mit gekoppelten CESAR-CPA-Modulen

Der in Kap. 4.1.1 verwendete CESAR-Datensatz wurde im nachfolgenden Schritt mit einem bereits verfügbaren CPA-Datensatz gekoppelt, der den Sicherheitsbehälter eines deutschen SWR-69 abgebildet. Basis hierfür war ein Datensatz für COCOSYS, der für ASTEC-CPA umgesetzt wurde. Eine vereinfachte Containmentnodalisierung entsprechend Abb. 4-6 wurde verwendet. Farblich unterlegt sind dabei die verschiedenen

Zonen des Containments. Für die im Weiteren diskutierte ASTEC-Rechnung sind insbesondere die Zone „Druckkammer“ und „Kondensationskammer (KoKa)“ gekennzeichnet, da hier die Verbindung zwischen Kühlkreislaufmodul CESAR und Containmentmodul CPA realisiert wird. Die KoKa wird dabei über die Zone „PSS_TOP“ mit der Frischdampfleitung verbunden und stellt die Rohrleitung des Druckentlastungssystems dar. Der Dampf wird dabei über den in Abb. 4-7 dargestellten Strömungspfad (PSS_TOP) in die Wasservorlage der Kondensationskammer geleitet. Der Beginn des Strömungspfades schließt an die Frischdampfleitung an und stellt somit die Schnittstelle zwischen dem CESAR Modul und dem CPA Modul dar.

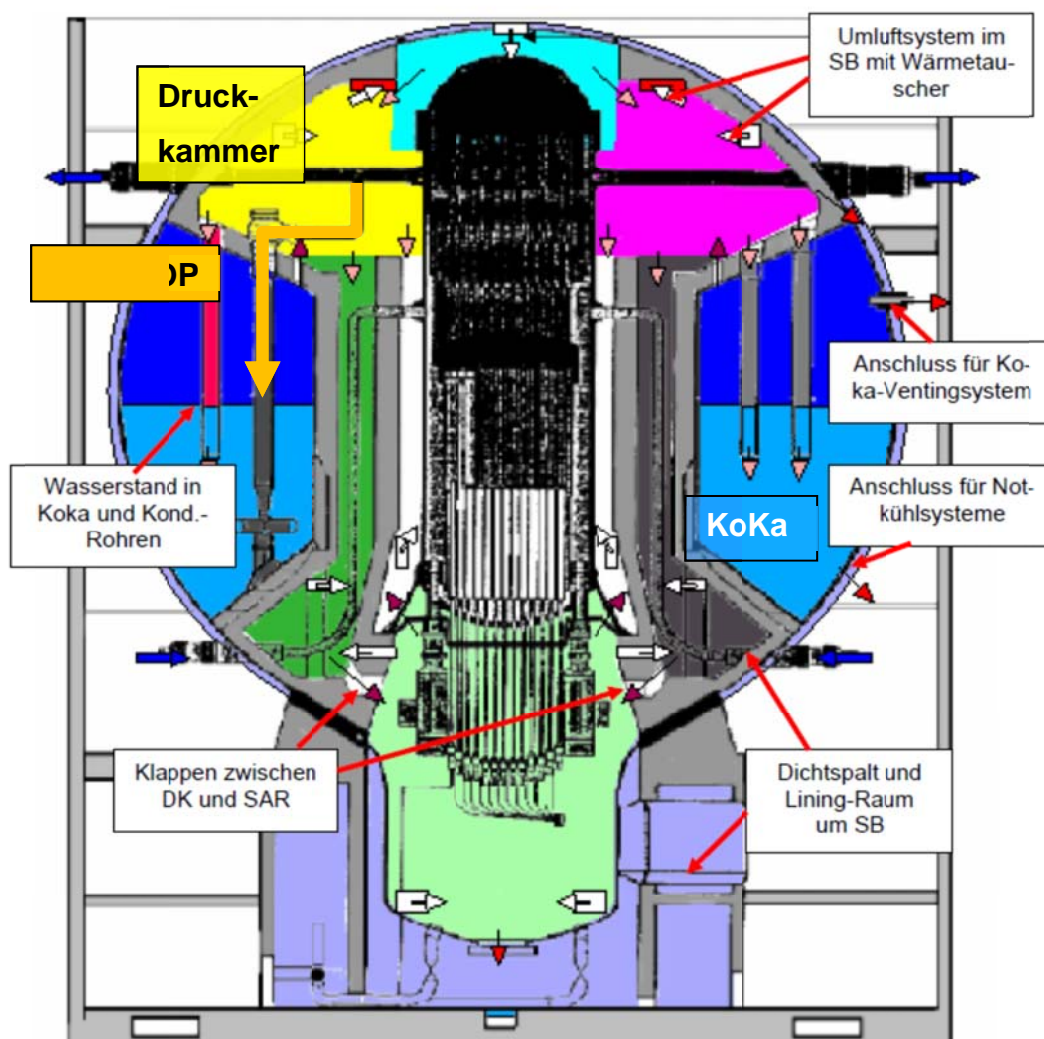


Abb. 4-6 Nodalisationsschema eines deutschen SWR 69

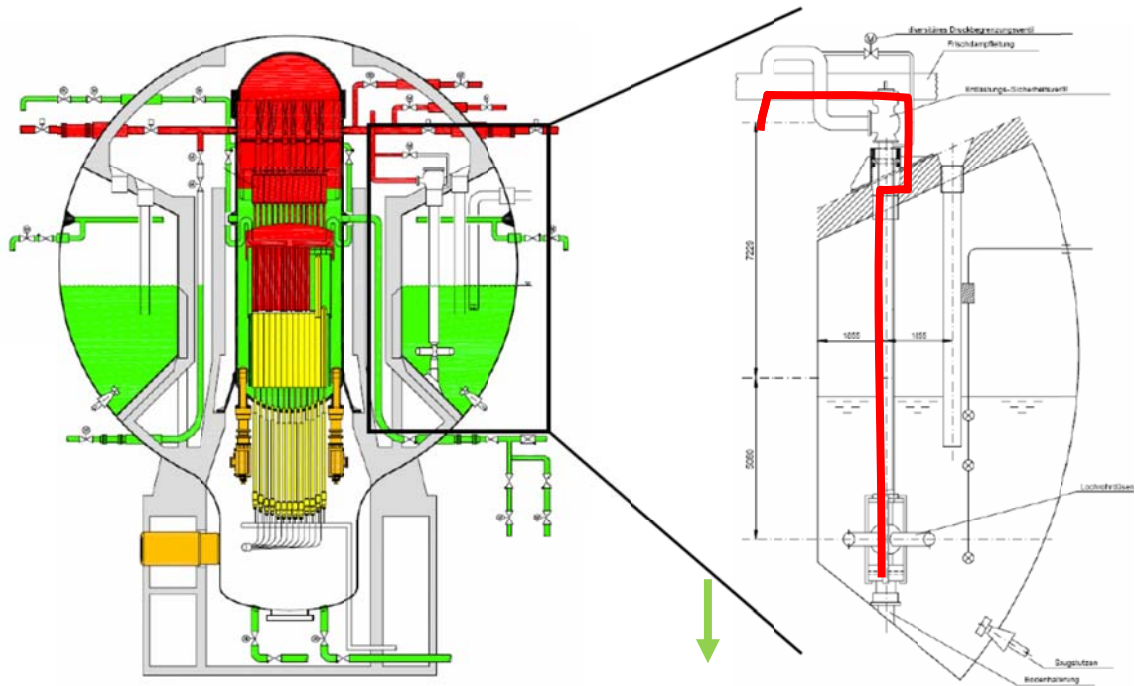


Abb. 4-7 Strömungspfad der diversitären Druckentlastungsventile zur Kondensationskammer

Die Kopplung zwischen CESAR und CPA erfolgt prinzipiell immer über die in ASTEC verfügbaren Verbindungen zwischen den Modulen, spezifiziert durch eine Eingabestruktur STRU CONNECTI /CHA 11c/. Dabei muss dem Umstand Rechnung getragen werden, dass eine solche Verbindung aufgrund der programmtechnischen Umsetzung nicht direkt in die Wasservorlage der Kondensationskammer einspeisen kann.

Zur Umgehung dieses Problems wurde das im Wesentlichen aus Rohrstücken bestehende Druckabbausystem in zwei Einzelzonen aufgeteilt. Davon beschreibt die erste Zone (PSS_TOP in Abb. 4-6) den Anteil der Rohrleitung der oberhalb der Wasseroberfläche liegt und die zweite Zone denjenigen Teil, der in die Wasservorlage eintaucht. Das CESAR-Volumen ist über die bereits erwähnte STRU CONNECTI direkt mit der CPA Zone PSS_TOP verbunden. Damit wird sichergestellt, dass die Verbindung zwischen einem CESAR-Volumen des Kühlkreislaufs und einer CPA-Zone des Containers immer im Gasraum endet. Die Modellierung des unterhalb der Wasseroberfläche liegenden Rohrteils des Druckentlastungssystems wird dann mittels eines speziellen Modells („INSERTION Option“) realisiert. Dieses reduziert die Modellierung auf das langfristige, nahezu stetige Einbringen von Dampf in die Wasservorlage unter Vernachlässigung der hochdynamischen Anfangsphänomene. Für eine detaillierte Beschrei-

bung sei auf /ARN 07/ verwiesen. Für die Zielsetzung eines Integralcodes ist die Vernachlässigung der Phänomene der kurzfristigen Anfangsphase durchaus gerechtfertigt.

Für die Tests wird die gleiche Transiente „Totalausfall der Stromversorgung“ genutzt. Mit Ereigniseintritt steigt zunächst der Druck im RDB an, bis bei 8,15 MPa die diversitären Druckentlastungsventile (DDE-Ventile) öffnen (Begrenzung des RDB-Druckes bei unterstelltem Versagen aller S/E-Ventile) und der Dampf aus dem Reaktor über die Frischdampfleitung und die DDE-Ventile abgeblasen wird (Abb. 4-8).

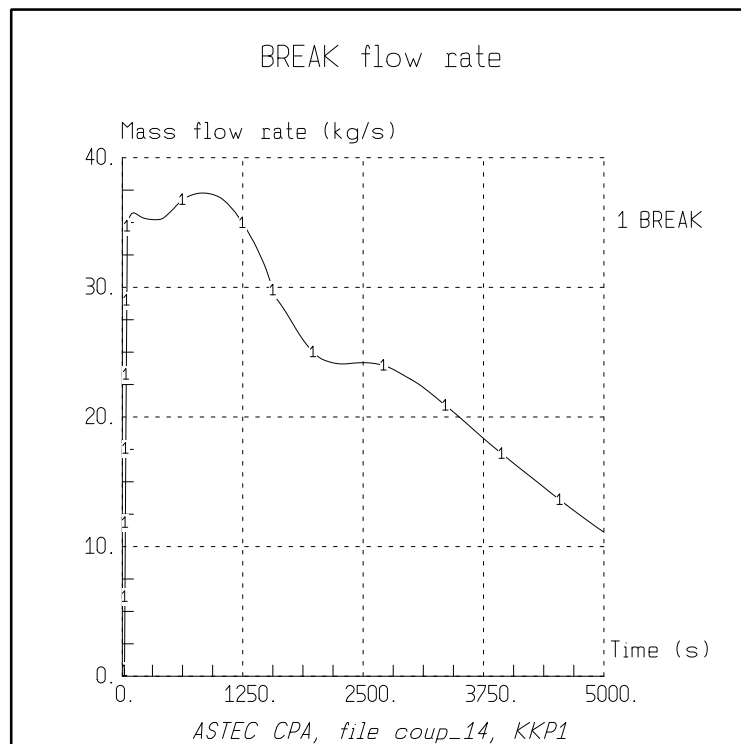


Abb. 4-8 Massenstrom über Druckentlastungsventile in die KoKa, ASTEC Rechnung mit CPA

Der Druck in der KoKa und der Druckkammer des Containments steigt nur sehr langsam an (Abb. 4-9), da der Dampfmassenstrom gering ist und dieser vollständig in der Wasservorlage der Kondensationskammer kondensiert wird. Somit sind die anderen Zonen im Containment davon nahezu unbeeinflusst, d. h. dort ändert sich der Druck nur durch Wärmeverluste vom RDB und bleibt somit quasi auf den Anfangsbedingungen. Die Modellierung des Druckabbausystems stellt somit eine wesentliche Komponente der realistischen Abbildung eines SWR-Containments dar. Dank der in CPA verfügbaren „INSERTION Option“ ist die Modellierung unkompliziert und ausreichend, um die langfristig ablaufenden Phänomene zu berücksichtigen.

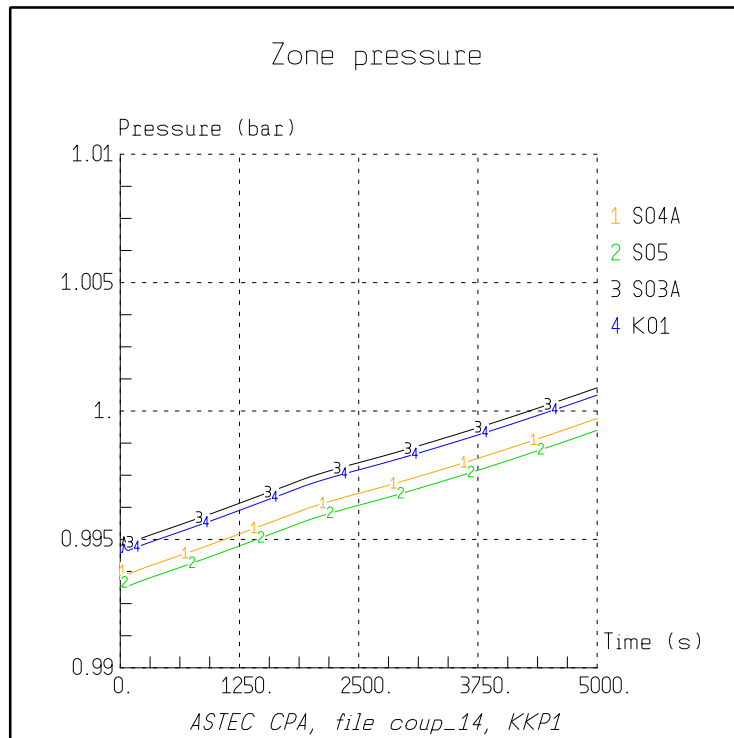


Abb. 4-9 Druck in ausgewählten Zonen des Containments (KoKa – K01 und Druckkammer), ASTEC Rechnung mit CPA

Die Temperatur in der Leitung PSS_TOP des Druckentlastungssystems wird geprägt von der Dampftemperatur in der Frischdampfleitung des Reaktorkreislaufs. Entsprechend der auch in ASTEC einsetzenden Aufheizung steigt sie ab ca. 3000 s deutlich an und erreicht Temperaturen von 1800 °C. Wiederum muss darauf hingewiesen werden, dass zu diesem Zeitpunkt schon längst Oxidations- und Kernzerstörungsprozesse den weiteren Verlauf dominieren würden, CESAR diese aber nicht berechnet. Die Rechnung hat somit nur orientierenden Charakter und soll die Machbarkeit der Kopplung zeigen. Gleichwohl sei an dieser Stelle erwähnt, dass mit dieser Kopplung ein Basisdatensatz zur Verfügung steht, der auch bei späteren Rechnungen unter Einbeziehung von ICARE keine wesentlichen Änderungen an der Kopplung von CESAR und CPA mehr erfordert.

Der eingetragene Dampf erhöht zum einen die Temperatur des Wasserpools in der Koka (Kurve K01-P in Abb. 4-11). Gleichzeitig wird auch die Atmosphäre in der Koka selbst infolge Wärmabgabe von der Wasseroberfläche sowie in den angrenzenden Containmentzonen geringfügig aufgeheizt. Der Siedezustand in der KoKa wird nicht erreicht.

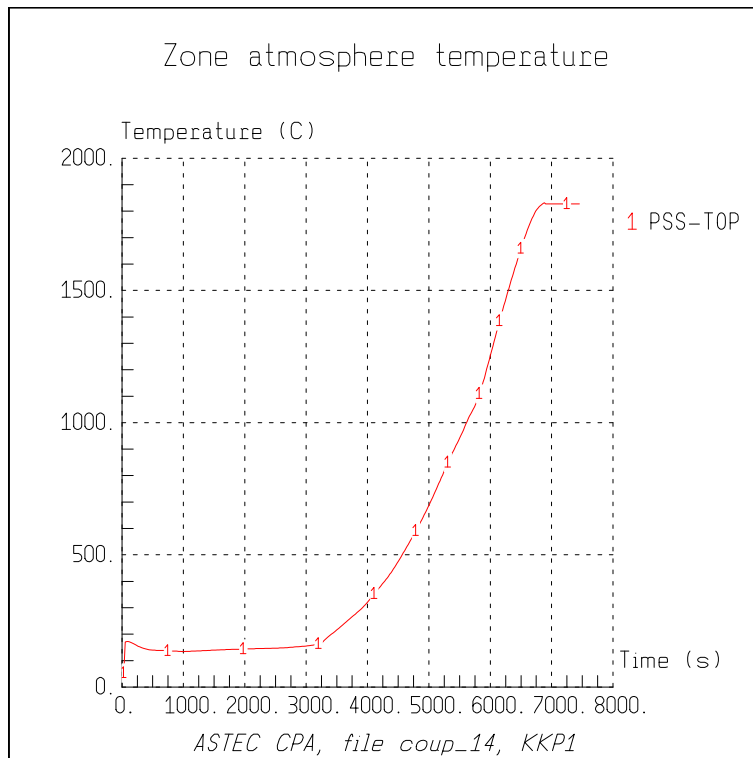


Abb. 4-10 Temperatur in der Zone PSS_TOP des Druckbegrenzungs-systems, ASTEC Rechnung mit CPA

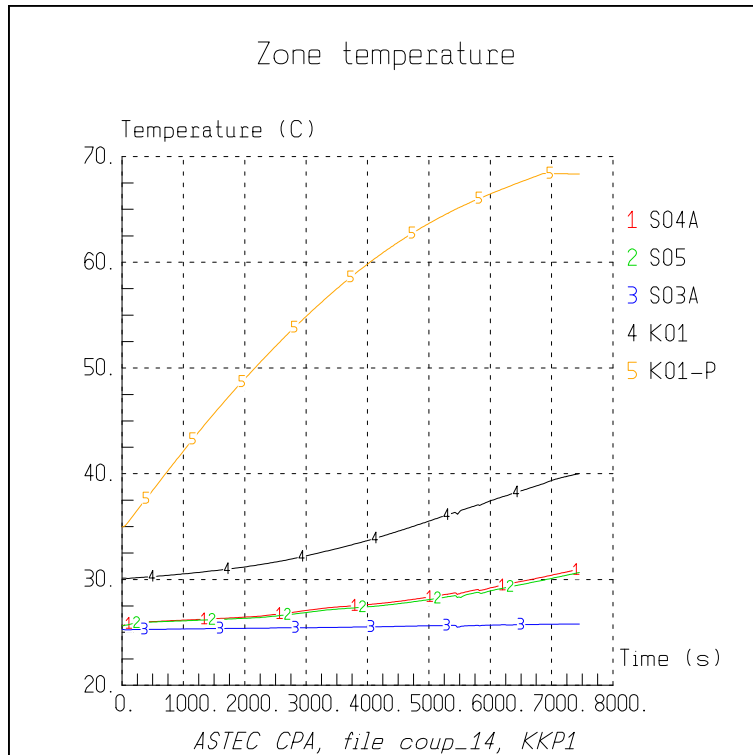


Abb. 4-11 Temperaturen in verschiedenen Zonen des Containments, ASTEC Rechnung mit CPA

Fazit

Mit den durchgeführten Arbeiten wurden die Qualifizierung und die Tests der Anwendbarkeit von ASTEC auf SWR weitergeführt. Die Kopplung von CESAR und CPA lässt nun prinzipiell die Analyse von Auslegungsfällen für SWR zu, wobei dazu der Datensatz weiter ausgebaut und insbesondere die Sicherheitssysteme implementiert werden müssten. Die konsequente Weiterentwicklung wird zukünftig mit hoher Priorität die Erweiterung und Anbindung von ICARE für SWR beinhalten, sobald die neue ICARE Version einschließlich der neuen Kopplung von CESAR mit ICARE verfügbar ist. Diese Arbeiten werden maßgeblich von IRSN durchgeführt. Das nachfolgend beschriebene SAPRC-Modell zur Berechnung der Rückhaltung von Spaltprodukten beim Durchströmen durch eine Wasservorlage (KoKa des SWR) muss später ebenfalls in den Datensatz integriert werden.

4.1.3 Harmonisierung der Pool Scrubbing Modelle in ASTEC und COCOSYS

SPARC ist in verschiedenen Versionen in ASTEC-CPA, ASTEC- SOPHAEROS und in COCOSYS integriert. Die Versionen in ASTEC-CPA und COCOSYS beruhen beide auf der von Becker Technologies bearbeiteten Version SPARC-B/98. In SOPHAEROS war eine frühere Version von SPARC implementiert. Diese sollte z.B. bei Abläufen mit Lecks in DE-Heizrohren eingesetzt werden. Hinfällig geworden ist ein Vergleich zwischen den verschiedenen SPARC-Versionen in ASTEC-CPA und SOPHAEROS, da für den speziellen Fall eines DE-Heizrohrlecks von IRSN mittlerweile ein vereinfachtes Modell für SOPHAEROS entwickelt wurde.

Die testweise Anwendung der beiden SPARC Versionen von ASTEC-CPA und COCOSYS zeigte, dass unerwartet große Unterschiede in den Ergebnissen auftreten. Insbesondere war bekannt, dass CPA sehr niedrige Rückhaltefaktoren mit SPARC berechnet. Daher ist ein Abgleich zwischen den SPARC Versionen in COCOSYS und ASTEC-CPA durchgeführt worden. Dazu ist eine vertiefte Einarbeitung in das alte SPARC Modell erfolgt. Der Ursprung der Unterschiede in COCOSYS und ASTEC-CPA ist untersucht worden. Dabei sind einige Fehler in der CPA Version von SPARC entdeckt worden und ein Modellunterschied zwischen CPA und COCOSYS ist identifiziert worden, der einen großen Einfluss auf die Ergebnisse hatte. Der Hauptunterschied bei der Berechnung des Dekontaminationsfaktors trat im Unterprogramm „rise1“ auf, die

die Dekontamination während des Blasenanstiegs für einen einzelnen Zeitschritt berechnet. Insbesondere wurde der Einfluss des Großblasenzerfalls auf den Dekontaminationsfaktor der Kleinblasen unterschiedlich behandelt. Die geänderte Gleichung bezieht sich auf Gl. (6-104) in /FIS 98/.

Die Fehlerkorrekturen und eine Modellanpassung sind so in CPA eingepflegt worden, dass SPARC in COCOSYS und CPA (ASTEC V2.0r2) jetzt wesentlich besser vergleichbare Ergebnisse liefert. Abb. 4-12 zeigt die Dekontaminationsfaktoren für das Experiment Poseidon PA-20 und die Berechnungen mit COCOSYS, ASTEC V2.0r1 und ASTEC V2.0r2. Zu erkennen ist, dass mit der alten Version V2.0r1 der Dekontaminationsfaktor bei 1 lag. Das bedeutet, dass keine Rückhaltung von Spaltprodukten in der Wasservorlage erfolgte. In der Version ASTEC V2.0r2 liegt der Wert bei 5 und ist verglichen mit 4,25 von COCOSYS näher am Experiment, das einen Wert von 5.2 aufweist. Die bleibenden Unterschiede beruhen zum einen auf immer noch nicht vollständig identischen SPARC-Modellen in CPA und COCOSYS. Zum anderen sind die durchgeführten Rechnungen nicht genau gleich. Die COCOSYS-Rechnung ist mit vorgegebenen Tabellenwerten über die CFX Schnittstelle durchgeführt worden. Das ist mit ASTEC nicht möglich, weshalb dort ein konstantes Strömungsverhalten über eine längere stationäre Phase eingestellt worden ist. Damit sind die Randbedingungen für das SPARC-Modell nicht identisch.

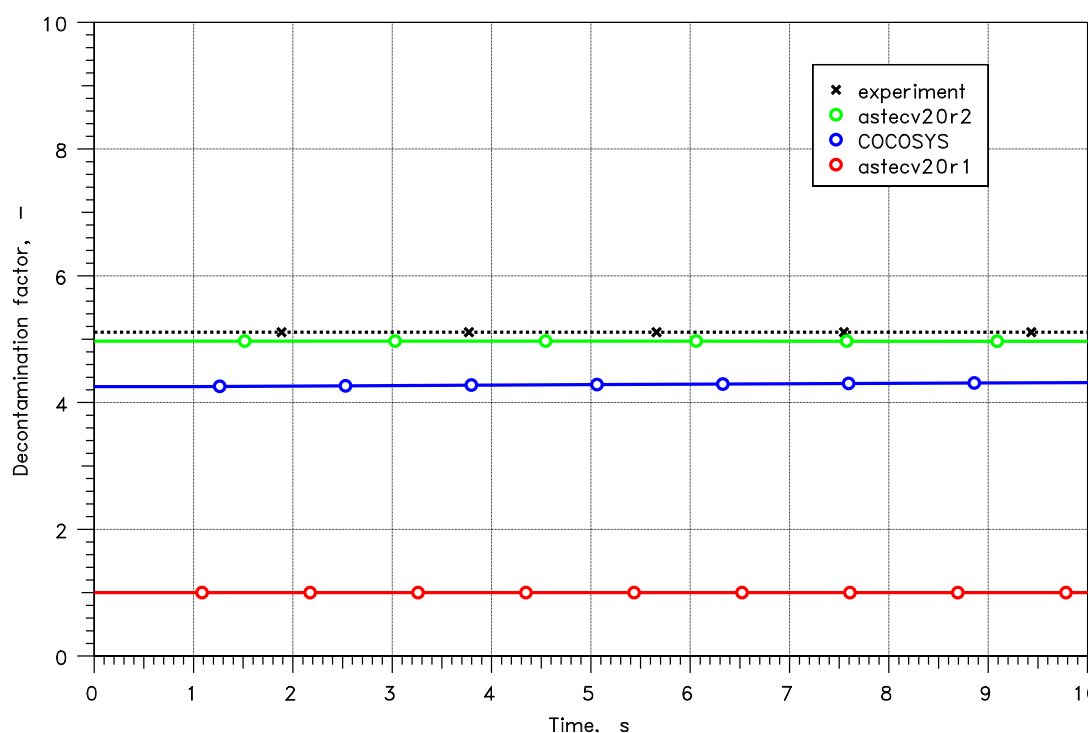


Abb. 4-12 Vergleich des Dekontaminationsfaktors für den Versuch PA-20 zwischen COCOSYS, ASTECv20r1 und ASTECv20r2

Fazit

SPARC ist ein komplexes Modul mit Unterteilung in eine Reihe von physikalischen Abscheidemechanismen. Seit der Einbindung von SPARC-B/98, das von Becker Technologies durchgeführte Änderungen /FIS 98/ beinhaltet, sind keine grundlegenden Modellweiterungen mehr durchgeführt worden. Um die einzelnen Prozesse innerhalb von SPARC nachvollziehen und bewerten zu können, ist eine detaillierte Einarbeitung eines Mitarbeiters in die Modellbasis nötig. Dieses ist begonnen worden. Aufbauend auf dieser Grundlage sind wesentliche Modellfehler- und Unterschiede in CPA und COCOSYS behoben worden. SPARC liefert nun vergleichbare Ergebnisse in COCOSYS und CPA. Aufgrund einer nicht vollständig identischen Code-Basis und Unterschieden in den Schnittstellen zu COCOSYS bzw. CPA liefern beide SPARC Versionen keine völlig identischen Ergebnisse.

Die durchgeführten Arbeiten haben eine Relevanz für die Arbeiten zu Fukushima im COCOSYS/ASTEC-Validierungsprojekt RS1190. In diesem Projekt erfolgt eine vertiefte Untersuchung der Anwendbarkeit von SPARC für Anwendungsrechnungen. Dort wird insbesondere das Verhalten von SPARC nahe von Siedetemperaturen in der Ko-

Ka untersucht werden, bei denen SPARC noch oft abstürzt. Zum jetzigen Zeitpunkt scheint eine systematische Verbesserung des SPARC-Modells schwer durchzuführen, da auch die experimentelle Datenbasis seit vielen Jahren unverändert ist und immer noch große Unsicherheiten aufweist. Eine substantielle Verbesserung wäre nur mit neuen stark verbesserten Experimenten möglich. Solche Experimente müssten auch eine genaue Aufschlüsselung der Dekontaminationsfaktoren nach der Größe der Aerosolpartikel ermöglichen. Dann könnte auch geprüft werden, ob die detaillierte Modellierung in SPARC durch die Anwendung einfacherer Korrelationen ersetzt werden kann.

4.2 Kopplung von ASTEC an ATLAS zur Visualisierung von Ergebnissen

4.2.1 Kopplungstechnik

Die von der GRS erarbeitete ASTEC-ATLAS Kopplungsstruktur, die bereits für die Module CESAR, CPA und DIVA (jetzt ersetzt durch ICARE) verfügbar war, wurde erweitert und verbessert. Bisher hatte sie den Nachteil, dass die dynamische Datenverwaltung von ASTEC, die im Laufe einer Rechnung die ASTEC-Datenbasis modifiziert, eine besondere Anforderung an die Kopplungsprozedur stellt, da ATLAS von einem statisch zusammengesetzten Ausgabevektor der berechneten Daten ausgeht. Dies zeigte sich insbesondere bei den Modulen DIVA und SOPHAERORS. Beide Module werden erst im Laufe der Rechnung aktiviert. Das Modul SOPHAEROS z. B. erst dann, wenn Spaltprodukte aus dem Kern freigesetzt und durch den Kühlkreislauf ins Containment transportiert werden. Dies führt dazu, dass zu Beginn in der ASTEC-Datenbasis keine entsprechenden Daten verfügbar sind und ein sich daran orientierender Ausgabevektor für ATLAS demzufolge keine Daten vorsieht. Die Lösung bestand zunächst darin, gleich zu Beginn z.B. für SOPHAEROS eine fixe dem Datensatz entsprechende Struktur mit entsprechenden Variablen vorzudefinieren, die dann erst später mit realen Rechnungswerten belegt werden. Bei der Bearbeitung wurden dann später andere Vorgehensweisen bevorzugt. So wurde von IRSN vorgeschlagen, in der ASTEC-Datenbasis eine neue Struktur (STRU GRAPHICA) zu erzeugen, in der gesondert entsprechende Datenfelder bereitgestellt werden, die dann für die ATLAS-Dateien ausgelesen werden können. Dieses Vorgehen hatte den Vorteil, dass die benötigten Datenfelder zwar ebenfalls zu Beginn zunächst als „Platzhalter“ fungieren und erst später mit aktuellen Rechnungsdaten belegt werden. Diese direkte, explizite Erstellung und Einbindung in die Datenbasis hat Vorteile, so dass GRS diesem Vorschlag zustimmte.

4.2.2 Einbindung weiterer ASTEC-Module in ATLAS

Derzeit sind die Module CESAR, ICARE, SOPHAEROS, CPA, MEDICIS eingebunden. Die in ATLAS eingebundenen Module bzw. die Rechnungsdaten dieser Module sind automatisch in der Struktur GRAPHICA verfügbar, eine Berücksichtigung zusätzlicher Parameter oder zukünftiger Module kann nur sehr eingeschränkt (für den Fall zusätzlicher Parameter) oder gar nicht (für den Fall weiterer Module) vom Anwender realisiert werden. Prinzipiell besteht die Möglichkeit eine dafür verwendete Datei zu editieren und weitere Datenpfade zu definieren. Dieses Vorgehen sollte aber nur erfahrenen Anwendern überlassen werden. Die Modifikation des Quellcodes ist prinzipiell nur noch durch die entwickelnden Organisationen IRSN und GRS möglich. Eine Modifikation zwecks Einbindung weitere Module kann daher auch nur von IRSN und GRS durchgeführt werden.

4.2.3 Online-Kopplung ASTEC - ATLAS

Eine Online-Kopplung zwischen ASTEC und ATLAS kann unter zwei Gesichtspunkten interessant sein. Im einfachen Fall kann ATLAS während der ASTEC-Rechnung online, also zeitgleich, auf die Ausgabedaten von ASTEC zugreifen und dynamisch die Grafiken und Diagramme dem Rechnungsfortschritt anpassen. Dies ist prinzipiell schon möglich, da ATLAS die Verfolgung und Anpassung der Ausgabe ermöglicht. Im erweiterten Fall besteht die Möglichkeit, analog z. B. zu ATHLET interaktiv in die Rechnung einzugreifen, indem z. B. Ventile geöffnet (oder geschlossen) oder Sicherheitssysteme verfügbar oder nicht-verfügbar geschaltet werden können. Dies kann der Anwender dann jederzeit durchführen.

Voraussetzung für diese Kopplung ist einerseits die Verfügbarkeit von entsprechenden ATLAS-Grafiken für die Datensätze, die als Schnittstelle zum laufenden Programm auch eine Rückwirkung auf die Rechnung ermöglichen. Andererseits ist das entsprechende Simulationsprogramm dahingehend anzupassen, dass diese Informationen Eingang in die Datenstruktur des Programms erhalten. Für ASTEC ist dies prinzipiell schon jetzt möglich, da die Datenbank (ASTEC data base) über eine grafische Benutzeroberfläche (engl. Graphical User Interface, Abk. GUI) angesprochen werden kann. Dazu muss der Rechenlauf pausiert werden und manuell vom Anwender die Datenbank verändert werden. Dieses Vorgehen ist allerdings derzeit wenig gebräuchlich, weil die Datenbank alle Rechnungsdaten abspeichert. Sie ist somit recht umfangreich

und nicht alle Parameter können vom Anwender während der Rechnung modifiziert werden. Eine direkte, enge Kopplung an ATLAS ist denkbar, wurde aber zunächst nicht weiter verfolgt. Mit Blick auf die Erweiterung der Anwendbarkeit von ASTEC auch auf Simulatoren oder als Online-Diagnosewerkzeug könnte diese Idee aber wieder aufgenommen werden.

4.2.4 Erstellen von ATLAS-Bildern für den Kühlkreislauf

Die Durchführung der geplanten Arbeiten zur Erstellung bzw. Anpassung von Bildern musste insbesondere der Tatsache Rechnung tragen, dass die Ausgabestruktur für ATLAS zwischenzeitlich vollkommen überarbeitet wurde (siehe Kap. 4.2.1). Die Problemstellung hierbei ist, dafür zu sorgen, dass für die Erstellung der ATLAS-Grafiken die korrekten Daten aus der zugehörigen Datei (mit geänderter Struktur) fehlerfrei herausgelesen werden können. Problematisch ist auch, dass einige Daten gar nicht mehr verfügbar sind. Mit IRSN wurde diese Problematik diskutiert. Vor dem Hintergrund, dass mit der Herausgabe der ASTEC Version V2.1 größere Änderungen insbesondere bei den Modulen ICARE und CESAR vorgenommen werden und sich laut Aussage von IRSN auch die interne Struktur der Rechnungsdaten ändern wird, würde auch eine erneute Anpassung und Überarbeitung der Kopplungsprozedur notwendig. Da die derzeitige Kopplung prinzipiell nutzbar ist und weitere Arbeiten zur Verbesserung der Kopplung maßgeblich auch davon abhängigen, ob ATLAS als externes Werkzeug vom Anwender akzeptiert wird, wurden weitere Arbeiten zur Anpassung der Bilder erst einmal zurückgestellt. Es sei hier nochmal vermerkt, dass ASTEC unabhängig davon noch andere Visualisierungsmöglichkeiten liefert, wenn auch teilweise nicht mit den Möglichkeiten von ATLAS.

4.2.5 ATLAS-Dokumentation

Für ATLAS wird von Seiten der GRS ein Benutzer-Handbuch sowie ein Dokument zur Erstellung von ATLAS-Grafiken zur Verfügung gestellt. Dies beinhaltet derzeit keine Informationen zur Kopplung zwischen ASTEC und ATLAS. Für die Herausgabe von zukünftigen ASTEC-Versionen mit ATLAS ist deshalb ein Dokument erstellt worden, das einerseits eine kurze Einführung in die Anwendung von ATLAS beinhaltet und andererseits die notwendigen Informationen bereitstellt, um die ASTEC-Eingabedatensätze für die Erzeugung der ATLAS-Dateien anzupassen. Es sei angemerkt, dass ATLAS nicht automatisch mit einer ASTEC-Version an Anwender verteilt wird. Aus Lizenz-

rechtlichen Gründen muss jeder Interessent eine offizielle Lizenz bei der GRS anfordern, die im Allgemeinen zu Forschungszwecken kostenfrei zur Verfügung gestellt wird. Das erstellte Dokument soll somit auch den interessierten Anwendern allgemeine Informationen zu ATLAS liefern.

4.2.6 ATLAS-Training

Da die verfügbare Kopplung mit Beginn des Projekts durch eine komplette Neuentwicklung ersetzt worden war, die durch Tests und Weiterentwicklungen stetig modifiziert wurde, konnte kein umfangreiches Training angeboten werden. Die bislang letzte Demonstration der Kopplung wurde auf dem ASTEC Users' Club Ende 2010 in Köln gegeben, wobei zu diesem Zeitpunkt noch kein Zustand erreicht war, der eine vertiefte Nutzung von ATLAS bei ASTEC gestattet hätte. Trotzdem zeigten sich die Teilnehmer interessiert. Dies ist unter anderem auch dadurch bedingt, dass einige ASTEC-Anwender auch als Anwender von ATHLET oder COCOSYS schon positive Erfahrungen mit ATLAS gemacht haben. Es ist geplant, im Nachfolgevorhaben die Anwendung weiter zu verfolgen und explizit auf diese Art des Post-Processings einzugehen. Weiterhin ist denkbar, insbesondere deutsche Partner, die bereits über Erfahrungen mit ATLAS verfügen, für eine Nutzung von ATLAS auch bei ASTEC zu sensibilisieren und z. B. im Rahmen einer Kurzschulung mit der Kopplung vertraut zu machen und bei der Anwendung zu unterstützen.

4.3 Erweiterung der H₂-Verbrennungsmodelle

Die Anwendung des bereits existierenden CPA-Moduls COMB aus ASTEC V2.0 /SER 05/ erlaubt die Berechnung von Wasserstoffverbrennung innerhalb einer Containment-Zone unter Berücksichtigung der zugrundeliegenden Massen- und Energiebilanzen. Das neue Flammenfrontmodul FRONT berechnet zusätzlich die Flammenfrontpropagation zwischen angrenzenden Zonen des Sicherheitsbehälters.

Im Folgenden werden eine kurze Modelldarstellung, sowie Testrechnungen zur Überprüfung der Korrektheit des implementierten Modells gegeben. Als Beispiel für eine gelungene Anwendung des FRONT-Moduls wird die Nachrechnung eines Experiments aus der THAI-Serie gezeigt; in diesem Zusammenhang werden auch die Grenzen der vorliegenden Modellierung diskutiert. Weiterführende Details finden sich in /ECK 11a/.

4.3.1 Modellbeschreibung

Die Hauptidee des FRONT-Moduls besteht in der Berechnung der Flammenfrontgeschwindigkeit V_{FI} , die eine Verfolgung der Flammenausbreitung zwischen den Zonen eines Systems z. B. eines Sicherheitsbehälters erlaubt. Die Flammenausbreitung findet in den Verbindungen des System (atmosphärische Verbindungen zwischen den Zonen) statt, die Verbrennung selber findet in den Zonen des Systems statt und wird mit dem COMB-Modul berechnet. Das neue FRONT-Modell erlaubt nun in Ergänzung zum bisherigen COMB-Modul die Überprüfung der Brennbarkeit der Gasmischung innerhalb einer Zone. Diese Überprüfung findet anhand des entsprechenden Dreistoffdiagramms für jede Zone statt. Innerhalb einer Zone ist weder die Lage der Zündquelle entscheidend, noch wird zwischen den Ausbreitungsrichtungen innerhalb der Zone unterschieden. Die Randbedingungen für die Richtungsabhängigkeit einer möglichen Flammenausbreitung werden basierend auf den Dreistoffdiagrammen des DECOR-Modells aus COCOSYS berechnet, für Details s. a. /HEI 95/. Die Flammenfront wandert auf Basis der berechneten Randbedingungen in die entsprechenden Verbindungen der jeweiligen Zone und propagiert durch diese mit der dann berechneten Flammenfrontgeschwindigkeit. Diese setzt sich aus einem laminaren und einem turbulenten Anteil zusammen, für Details der Berechnung der einzelnen Anteile s.a. /ECK11a/. Wenn die Flammenfront die entsprechende Verbindung durchquert hat, wird die Gasmischung in der angrenzenden neuen Zone wieder anhand des Dreistoffdiagramms auf Brennbarkeit hin überprüft. Liegt diese vor, kommt es zur Zündung und die Flammenfront kann durch weitere angrenzende Verbindungen propagieren. Liegt keine Brennbarkeit in der neuen Zone vor, so stoppt die Verbrennung und die Flammenfront endet in der entsprechenden Zone. Die Wiederentzündbarkeit einer Zone durch zuströmenden Wasserstoff ist möglich und wird in jedem Zeitschritt der Simulation ebenfalls anhand des Dreistoffdiagramms überprüft.

4.3.2 Korrektheit der Implementierung

Um die Korrektheit der Implementierung zu überprüfen und die Funktionsweise des FRONT Moduls zu illustrieren, sind Rechnungen mit dem FRONT-Modul für ein einfaches Modellsystem durchgeführt worden. Das System besteht aus fünf gleich dimensionierten Zonen (Grundfläche 100 m^2 , Höhe 10 m) verbunden durch einfache atmosphärische Verbindungen (Länge 10 m , Querschnittfläche 0.2 m^2), s. a. Abb. 4-13. Die Anfangstemperatur beträgt $T = 373 \text{ K}$ und der Druck $P = 2 \text{ bar}$. Um ausschließlich die

Funktionsweise von FRONT bewerten zu können, enthält das Modellsystem keinerlei Strukturen.

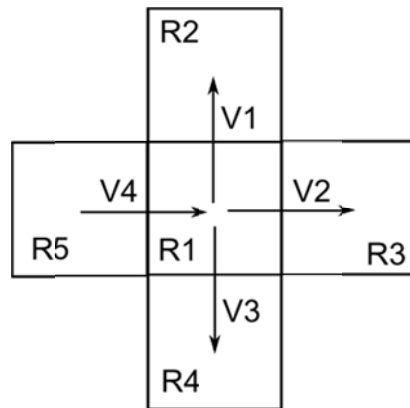


Abb. 4-13 Skizze des Modellsystems

Im hier gezeigten Fall startet die Verbrennung zu einer vom Nutzer vorgegebenen Zeit $t_i = 1.0$ s in der Zone R5. Alle Zonen des Systems sind anfänglich mit einer zündfähigen Gasmischung befüllt, der Volumenanteil von Wasserstoff in den Zonen R2, R3 und R4 beträgt $C_{H_2} = 6,0$ Vol.-% und $C_{H_2} = 10,0$ Vol.-% in R1 und R5. Die Temperatur der Zündzone steigt aufgrund der langsamen initialen Verbrennung langsam an, s. a. Abb. 4-14. Die Flammenfront propagiert nach der Zündung in R5 durch die Verbindung V4, s. a. Abb. 4-15 und wird hierbei beschleunigt, was zu einem starken Temperaturanstieg in der angrenzenden Zone R1 führt. Von dort propagiert die Flammenfront weiter durch die Verbindungen V1, V2 und V3 und zündet in den angrenzenden Zonen. Der Temperaturanstieg in diesen Zonen ist kleiner, als in der ersten Zone, da die Energie zwischen den drei Zonen gleich verteilt wird. Weitere illustrierende Beispiele sind in /ECK 11a/ zu finden.

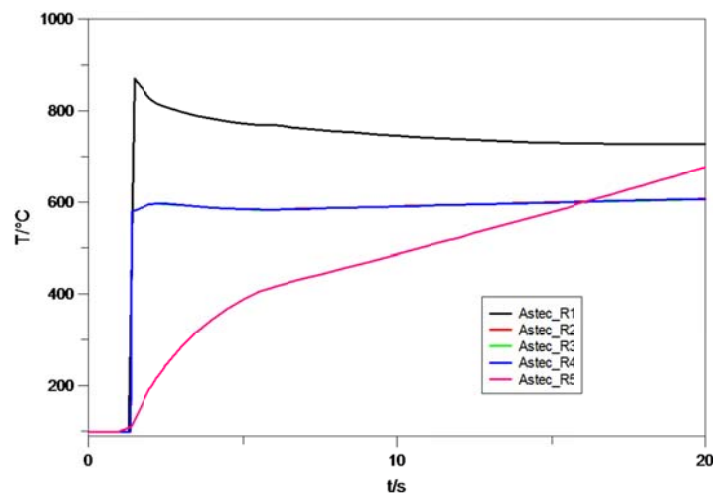


Abb. 4-14 Temperaturcharakteristik des Modellsystems

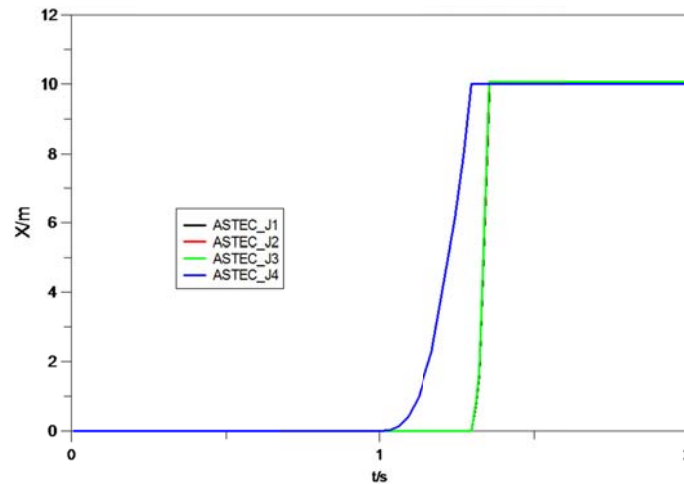


Abb. 4-15 Flammenfrontposition in den Verbindungen des Modellsystems

4.3.3 Nachrechnungen zu Experimenten

Um die freien Parameter des Flammenfrontmodells näher zu bestimmen sind Nachrechnungen zu verschiedenen Experimenten durchgeführt worden [ECK 11a]. Exemplarisch sind hier die Nachrechnungen zu Experimenten der THAI-Anlage gezeigt. Das HD-22 Experiment zur Wasserstoffverbrennung innerhalb der THAI-Anlage findet innerhalb eines Kessels ohne Strukturen statt, s. a. Abb. 4-16 für eine Skizze der Anlage und die in den ASTEC-Rechnungen genutzte Nodalisierung. Die freien Parameter des Modells wurden gegenüber der vorherigen Version des FRONT-Moduls [LUT 09] angepasst und zeigen im Druck- und Temperaturprofil, Abb. 4-17, eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Die Weiterentwicklung des FRONT-Moduls erlaubt gegenüber den vorherigen Berechnungen zu ISP49 eine verbesserte Übereinstimmung zu den experimentellen Daten. Diese Rechnungen zeigen, dass das FRONT-Modul eine verlässliche Methode zur Berechnung von Temperatur- und Druckprofilen in Folge einer Flammenausbreitung als Resultat einer Wasserstoffdeflagration darstellt.

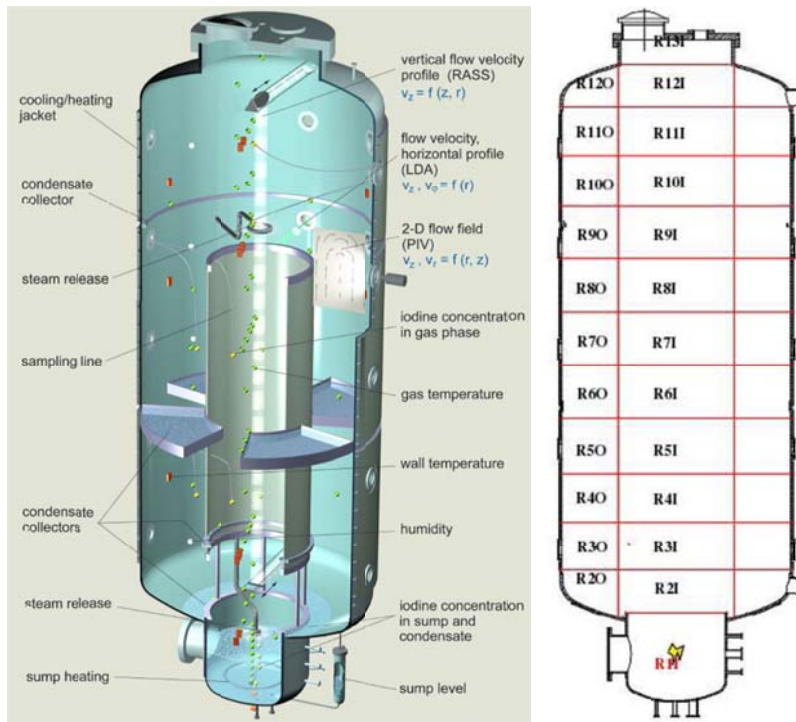


Abb. 4-16 THAI Anlage und genutzte Nodalisierung für ASTEC /LUT 09/

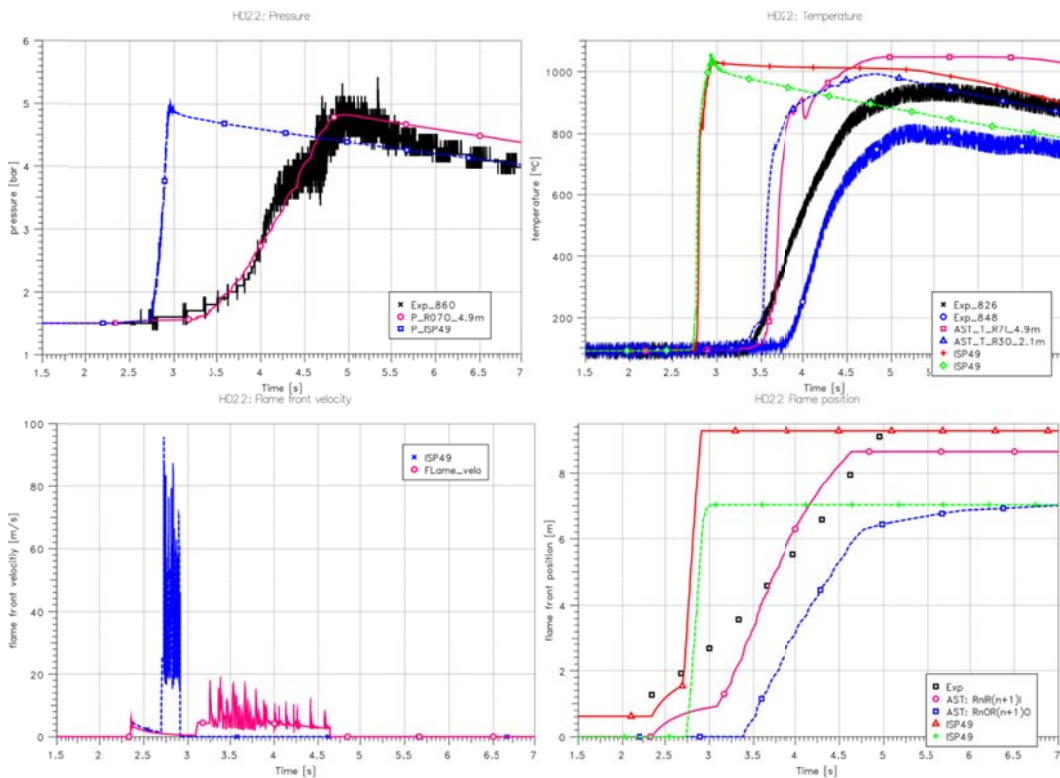


Abb. 4-17 Vergleich mit dem THAI-HD-22 Experiment

4.3.4 Bekannte Grenzen der Modellierung

Das FRONT-Modul beinhaltet modellinhärente Grenzen, die bei Anwendung des Modells auf die Geometrie eines Sicherheitsbehälters nicht vernachlässigt werden dürfen und in die kritische Bewertung der Ergebnisse mit einfließen müssen. Die im Modell verwendete Flammenfrontgeschwindigkeit setzt sich aus einem laminaren und einem turbulenten Anteil zusammen. Der laminare Anteil beruht auf der Liu-McFarlane-Korrelation und ist gültig für ein Gemisch aus Wasserstoff, Luft und Dampf bis zu einer Dampfkonzentration von ca. 25 Vol.-% /ECK 11a/. Dies ist die generische Situation für Unfallabläufe im Sicherheitsbehälter, höhere Dampfkonzentrationen können zu quantitativen Abweichungen führen und müssen in Berechnungen berücksichtigt werden. Hierzu sind weitere Entwicklungsarbeiten, die auch die Modellierung anderer Gasgemische beinhalten, wünschenswert. Das Modell ist jedoch als robust in dem Sinne zu verstehen, dass keine qualitativen Änderungen für den laminaren Anteil der Flammenfrontgeschwindigkeit außerhalb des verlässlichen Bereiches der Liu-McFarlane-Korrelation zu erwarten sind.

Als maßgebliche Modellannahme gehen in den turbulenten Anteil die maximale Wirbelgröße, sowie die Turbulenzintensität ein. Diese beinhalten zwei freie Parameter und werden aus Übereinstimmung zu Experimenten gewonnen, für Details s. a. /ECK 11a/. Vor diesem Hintergrund sind Ergebnisse für Reaktorgeometrien mit einem Sicherheitsband versehen und kritisch zu bewerten und auf Ihre Plausibilität hin zu überprüfen. Eine noch ausstehende systematische Unsicherheitsanalyse des Modells soll hier dem Anwender weitere Bewertungskriterien für Ergebnisse zur Verfügung stellen.

4.4 Ex-Vessel-Schmelzeverhalten

4.4.1 Direct Containment Heating – DCH

Die Arbeiten zum DCH-Modell in ASTEC sind gegen Ende des Vorhabens begonnen worden, so dass in diesem Bericht ein Überblick über den Stand der Entwicklungsarbeit gegeben wird. Ein detailliertes Dokument zur Modellentwicklung und entsprechenden Testrechnungen ist in Vorbereitung. Der Abschluss dieser Arbeiten ist im Folgevorhaben vorgesehen. Grundsätze der DCH-Modellierung wurden bereits in Kap. 3.1 mit Bezug zu COCOSYS gegeben.

4.4.1.1 Modell und Test der Implementierung

Ziel der Weiterentwicklung des DCH-Modells in ASTEC ist es, den Schmelzetransport innerhalb des Systems mit im Programmcode existierenden Datenstrukturen für Massen- und Energiebilanz zu beschreiben, im Unterschied zur Implementierung in COCOSYS /SPE 06/. Der Reaktordruckbehälter (RDB) wird zunächst als Zone innerhalb des CPA-Moduls beschrieben, in der Zukunft ist eine Übernahme dieser Funktion durch andere Programmteile von ASTEC zu überlegen. Im Modell wird angenommen, dass die im RDB befindliche Schmelze nach Versagen des Behälters zuerst in die darunter befindliche Grube strömt und sich dort in dem Teil einer CPA-Zone ablagert, der auch die Wasserphase simuliert. Die Schmelze selber ist in der sog. Phase ‚SOLID‘ repräsentiert. Weiterhin wird davon ausgegangen, dass erst nachdem die Schmelze aus dem RDB ausgetreten ist, das unter hohem Druck befindliche Gas/Dampf-Gemisch aus dem RDB in die Grube ausströmt und dabei Teile/Partikel von der in der Grube abgelagerten Schmelze in angrenzende Raumbereiche mitreißt („Entrainment“). Die dazu notwendigen Entrainment-Korrelationen sind in COCOSYS implementiert, vgl. /SPE 10/, und nach ASTEC übertragen worden. Die mitgerissenen Schmelzepartikel sind nun luftgetragen und werden im anderen Zonenteil in COCOSYS (Zonenteil zur Simulation der Atmosphäre) repräsentiert und zusammen mit dem Gasstrom von der Grube in weitere Zonen transportiert und dort ggf. abgelagert. Die Energiebilanz der Schmelze ist in einem neuen Feld angelegt, so dass es zu einem Energieübertrag an die Stoffe des flüssigen bzw. gasförmigen Teils der COCOSYS-Zonen kommt, was dann zu einer Aufheizung des Systems führt (DCH).

Das von IRSN in ASTEC zur Verfügung gestellte Modell (Methoden und Datenstrukturen) zu DCH ist auf seine Implementierung hin überprüft worden. Da die Testbeispiele von IRSN auch nach eingehender Überprüfung nicht lauffähig waren, ist ein eigenes akademisches Testbeispiel entwickelt worden, welches die Funktionalität des Modells überprüft und einen Vergleich der prinzipiellen Mechanismen zu COCOSYS erlaubt. Details hierzu werden in einem separaten Dokument dargestellt.

Das Beispiel besteht aus zwei Zonen, Cavity und Comp1, die über eine atmosphärische Verbindung in Kontakt sind. Beide Zonen haben eine Anfangstemperatur von $T = 310 \text{ K}$ und sind mit 80 Vol.-% Stickstoff und 20 Vol.-% Sauerstoff befüllt. Zwischen beiden Zonen herrscht zu Beginn eine Druckdifferenz von $\Delta p = 1,2 \text{ bar}$. Durch den treibenden Druck kommt es zwischen beiden Zonen zu einer Druckannäherung, s. a. Abb. 4-18, der Temperaturverlauf ist analog. In der Zone Cavity befinden sich als Anfangs-

bedingung 1,2 kg luftgetragene Schmelze (hier Zirconium), die sich mit einer vorgegebenen Rate in dem „flüssigen Zonenteil“ bis zur Zeit $t_e = 10$ s abgelagert, s. a. Abb. 4-19, und in Teilen mit dem getriebenen Gas in die angrenzende Zone transportiert wird.

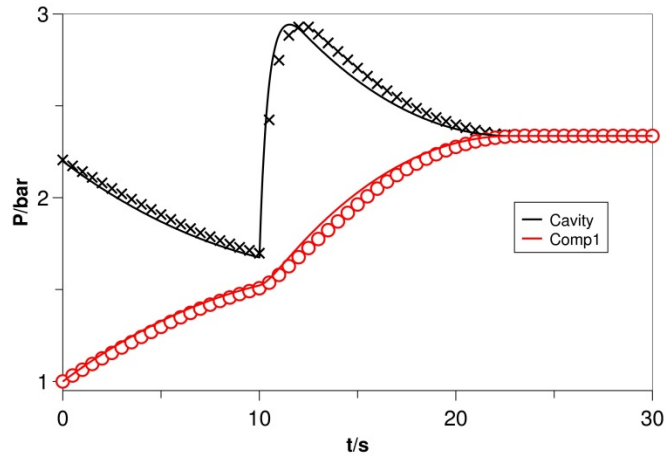


Abb. 4-18 Druckverlauf im Testbeispiel. Symbole: ASTEC; Linien: COCOSYS

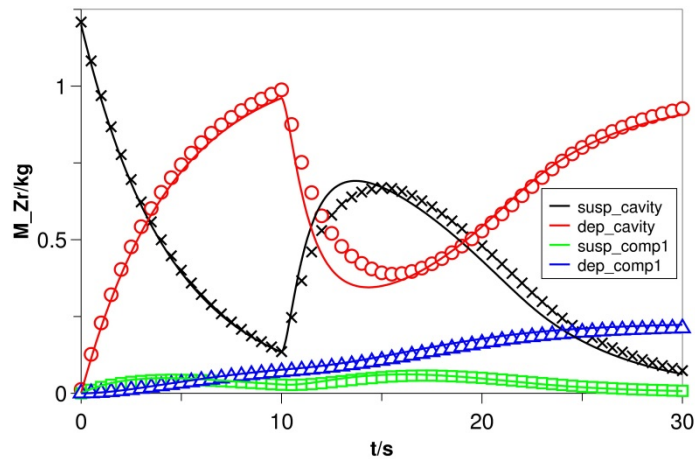


Abb. 4-19 Verlauf der Schmelzemasse (susp: luftgetragen; dep: abgelagert) in beiden Zonen

Zum Zeitpunkt $t_e = 10$ s wird eine dritte Zone, die unter einem signifikant höheren Druck steht, mit der Zone Cavity verbunden, was das Ausströmen des unter hohem Druck befindlichen Gases nach Schmelzeaustritt aus dem RDB darstellt. Es setzt das Mitreißen von Schmelze in der Zone Cavity ein, d. h. es kommt rasch zu einem Übergang von abgelagerter Schmelze zu luftgetragener Schmelze, s. a. Abb. 4-19. Durch die Druckerhöhung kommt es zu einer erhöhten Transportrate luftgetragener Schmelze in die Nachbarzone Comp1.

Die sehr gute Übereinstimmung zwischen der neu implementierten Version in ASTEC und der existierenden Version in COCOSYS zeigt, dass die prinzipiellen physikalischen Mechanismen in ASTEC korrekt implementiert wurden, obwohl die informatische Beschreibung in beiden Programmen grundverschieden ist. Darauf aufbauend kann nun eine Modellweiterentwicklung und Validierung in ASTEC erfolgen.

4.4.1.2 Überprüfung anhand von DISCO-Experimenten

Zur Weiterentwicklung und Validierung des zugrundeliegenden Modells wurden zunächst die kalten Experimente der DISCO-Anlage nachgerechnet, für experimentelle Details, s. /MEY 06/. Das Ausströmen der Schmelze aus dem RDB wird in ASTEC als Einphasenströmung modelliert, d. h. es tritt zunächst die Schmelze getrieben durch den Druck des RDB aus und nach vollständigem Austritt der Schmelze tritt dann das treibende Gas aus dem RDB in die Grube aus und kann die dort abgelagerte Schmelze mitreißen. Dies ist eine vereinfachte Annahme und der Vergleich des Druckverlaufs im RDB in der ASTEC-Rechnung mit dem Experiment D06, Abb. 4-20, zeigt eine gute Übereinstimmung und rechtfertigt diese vereinfachende Annahme zunächst. In der weiteren Entwicklung ist zu überprüfen, ob die Zweiphasenströmung analog zur Modellierung in COCOSYS wie in /SPE 06/ ausgeführt übernommen wird.

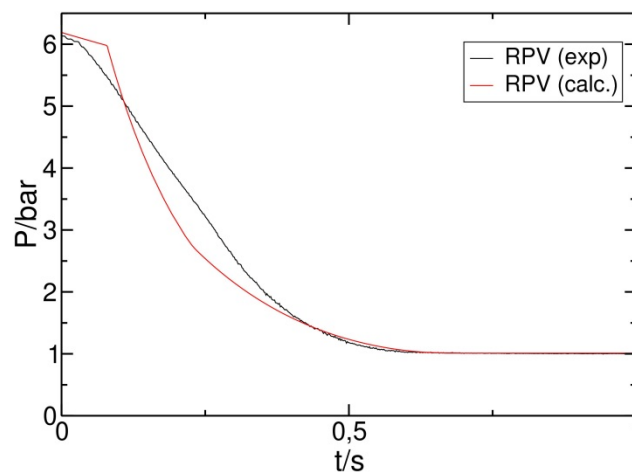


Abb. 4-20 Druckverlauf im RDB für das Experiment D06

Als weiterer wichtiger Schritt zur Validierung wurde überprüft, wieviel Schmelzmaterial außerhalb der Grube aufgefangen wird. Der berechnete Verlauf der Schmelzmasse außerhalb der Reaktorgrube zu D06 ist in Abb. 4-21 gezeigt. Dies stellt eine gute Überprüfung der verwendeten Entrainment-Korrelation dar. Der Vergleich zwischen der Simulation in ASTEC und dem Experiment D06 zeigt eine gute Übereinstimmung. Der

Anteil der aus der Grube transportierten Schmelze im Experiment beträgt $f_{d,exp} = 66 \%$ und in der Simulation $f_{d,calc} = 62 \%$. Hierbei wurde der empirische Parameter K_c so angepasst, dass gute Übereinstimmung zu den experimentellen Ergebnissen erzielt wurde, s. a. /SPE 10/. Im weiteren soll das Modell so weiterentwickelt werden, dass mit dem empirischen Parameter K_c mehrere Experimente nachgerechnet werden können, analog zum Vorgehen in /SPE 10/.

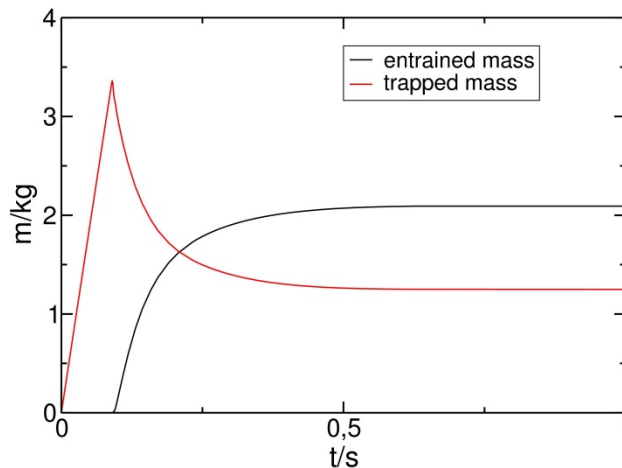


Abb. 4-21 Verlauf der Schmelzemasse außerhalb der Reaktorgrube für die Nachrechnung zu D06. Zum Vergleich: Im Experiment wurde ein Anteil von $f_{d,exp} = 66 \% \approx 2,2 \text{ kg}$ am Ende in abgelagerter Form ("trapped") vorgefunden.

4.4.2 Verbesserung des schnell laufenden Ansatzes für die Bewertung einer Schmelzeausbreitung nach RDB-Versagen

Für die Berechnung der Schmelzeausbreitung nach RDB-Versagen in einem Ausbreitungsraum, wie für den EPR vorgesehen, steht prinzipiell das Modell LAVA zur Verfügung. LAVA beruht auf einer Vereinfachung der Transportgleichungen für ein Kräftegleichgewicht zwischen Schwerkraft und Reibung. So ist LAVA speziell geeignet, Grenzfälle von Ausbreitungsszenarien, z. B. bei von Beginn an stark abgekühlter (und daher hochviskoser) Schmelze, sicher zu analysieren, wie die Validierung von LAVA anhand eines blinden Benchmarks (ECOKATS-1 bei Forschungszentrum Karlsruhe) eindrucksvoll gezeigt hat /SPE 04/.

Die Anlage, in der die Ausbreitung von Corium von großer Bedeutung ist, ist der EPR. Für den EPR wird in ASTEC eine spezielle Strategie zur Entwicklung von Modellen für

die Schmelzeausbreitung (Spreading) verfolgt. Entsprechend dieser Strategie entscheidet zunächst ein schnell laufendes analytisches Kriterium („schnell laufend“ im Hinblick auf die benötigte Rechenzeit), ob ein „problematisches Spreading-Szenario“ vorliegt oder nicht. Als „problematisch“ gilt eine Ausbreitung, wenn hierbei die Kernschmelze aus der Reaktorgrube nicht in den auslegungsgemäßen Zustand im Kernfänger überführt wird, z. B. wenn der Kernfänger nicht gleichmäßig gefüllt wird oder eine unvollständige Ausbreitung noch andauert, wenn schon Wasser über die Schmelze strömt. Ein detailliertes Simulationsmodell für die Ausbreitung der Schmelze wie z. B. LAVA wird also nur in bestimmten Fällen benötigt bzw. aktiviert. Mit dieser Strategie ist zunächst der Einbau eines solchen analytischen Kriteriums in ASTEC in den Vordergrund getreten. Das entsprechende Modell hatte die GRS bereits im Vorgängervorhaben RS1159 zur Verfügung gestellt.

Wie in /SPE 09, SPE 10c/ dargelegt, beruht das GRS-Kriterium zur Beurteilung von Schmelzeausbreitungsvorgängen auf einem „Wettbewerb“ zwischen Ausbreitung und Erstarrung. Die Ausbreitung wird hierbei unter idealen Symmetrieanahmen (Kanal oder axialsymmetrische Ausbreitung in zwei Dimensionen) sowie unter der Annahme isothermer Bedingungen angenähert. Für die zugehörigen Weg-Zeit-Funktionen existieren analytische Näherungslösungen (Potenzfunktionen) in der Literatur. Diese werden entsprechend der vorliegenden Randbedingung (trägheitsdominierte oder reibungsdominierte Ausbreitung bei konstantem Volumenstrom oder bei konstantem Volumen) stückweise kombiniert um die tatsächliche Ausdehnung der Ausbreitung (Länge oder Radius) als Funktion der Zeit abzuschätzen. Die Erstarrung wird in Form einer auf der sich ausbreitenden Schmelze anwachsenden Oberflächenkruste verfolgt. Die Kühlung erfolgt durch Abstrahlung von der freien Oberfläche der Schmelze. Das von der GRS betrachtete Kriterium setzt die mittlere Dicke der ausgebreiteten Schmelze (ein Maß für die Kräfte, die die Ausbreitung vorantreibt) mit der Dicke der anwachsenden Kruste (ein Maß für die Kräfte, die die Ausbreitung behindert) in Relation. Fällt dieses Verhältnis unter einen kritischen Wert wird ein Anhalten der Ausbreitung angenommen. In der Anwendung über einen vergrößerten Parameterbereich, z. B. innerhalb von Unsicherheitsanalysen, zeigten sich aber einige Modelldefizite. Z. B. wurden für Ausbreitungsszenarien mit höherer Einströmtemperatur der Schmelze kürzere Ausbreitungen ermittelt. Anstelle der geplanten Erprobung von LAVA in ASTEC anhand eines Unfallszenarios in einer realen Anlage wurde daher hier die dringend nötige Verbesserung des analytischen Kriteriums für die Beurteilung von Schmelzeausbreitungsszenarien durchgeführt.

Das Kriterium ist bezüglich der folgenden zwei Punkte verbessert worden:

- Die Übergänge der stückweisen Abschnitte
 - trägheitsdominierte Ausbreitung bei konstantem Volumen → reibungsdominierte Ausbreitung bei konstantem Volumen sowie
 - Ausbreitung bei konstantem Volumenstrom → Ausbreitung bei konstantem Volumen

werden bei identischer Geschwindigkeit (ursprünglich bei identischer Ausbreitungslänge) vorgenommen. Dies war nötig, da in einigen Fällen eine unphysikalische Beschleunigung der Schmelzeausbreitung beim Übergang konstanter Volumenstrom → konstantes Volumen erzielt worden war. Eine solche Beschleunigung wird nun nicht mehr berechnet.

- Das Anwachsen der Kruste aufgrund von Wärmestrahlung wird jetzt bei einer neu eingeführten Oberflächentemperatur T_{surf} (anstelle bei Einströmtemperatur T_0) berechnet. Dies führt zu einem wie bei einer Wurzelfunktion über der Zeitachse gekrümmten Anwachsen der Kruste an der freien Oberfläche und einem transienten Abfall von Oberflächentemperatur und Strahlungsleistung mit der Zeit. Diese Modellverbesserung vermeidet nun die unphysikalische Reduktion von Ausbreitungslängen bei Erhöhung der Einströmtemperatur. Ein solches Verhalten war mit dem ursprünglichen Ansatz in einigen Fällen beobachtet worden, da die Wärmeverluste mit T^4 anwachsen und in den beobachteten Fällen die bei erhöhter Einströmtemperatur höheren Wärmeverluste die reduzierte Viskosität im Hinblick auf die erzielte Ausbreitungslänge mehr als kompensieren. Das Anwachsen der Krustendicke s wird jetzt durch die Gleichung

$$\Delta s = \frac{\frac{\lambda}{S}(T_0 - T_{\text{surf}}) - \delta Q_v}{\rho \left((1 - f_s)H_1 + \max[c_p(T_0 - T_{\text{liq}}), 0] \right)} \Delta t \quad (4-1)$$

berechnet, d. h. die Geschwindigkeit des Krustenwachstums ds/dt wird durch den Wärmestrom durch die Kruste, abzüglich der volumetrischen Wärmeleistung Q_v im Schmelzefilm der Dicke δ und dividiert durch die Summe aus latenter und fühlbare Wärme bestimmt. Fühlbare Wärme wird nur für $T_0 > T_{\text{liq}}$ berücksichtigt. In diesem Fall ist der Feststoffanteil $f_s = 0$ und die volle Latentwärme H_1 muss abgeführt werden. Im Falle von $T_0 < T_{\text{liq}}$ muss nur ein Bruchteil der Latentwärme

$(1 - f_s)H_1$ und keine fühlbare Wärme abgeführt werden, um das Krustenwachstum fortzuführen.

Abb. 4-22 zeigt die Methode am Beispiel des Experimentes ECOKATS-V1 /ALS 04/. Die eindimensionale Bewegung der Schmelzefront im Experiment wird durch die Dreiecke angezeigt. Die gestrichelte und gepunktet-gestrichelte Kurve zeigen die isotherme Ausbreitung für die beiden Regimes, für die die Lösung gültig ist (konstanter Volumenstrom bis zum Ende der Einströmzeit $t' = 55$ s und dann konstantes Volumen). Die dünne schwarze Linie zeigt die kombinierte Näherung aus beiden Teilen mit dem Anknüpfungspunkt derselben Geschwindigkeit bei t' . Wenn die Ausbreitung bei $t = 40$ s gestoppt wird, ergibt sich eine gute Übereinstimmung zum Experiment. Das Verhältnis von Krustendicke zu Schmelzedicke s/δ beträgt zu diesem Zeitpunkt $f_{crit} = 28$ % (Abb. 4-23).

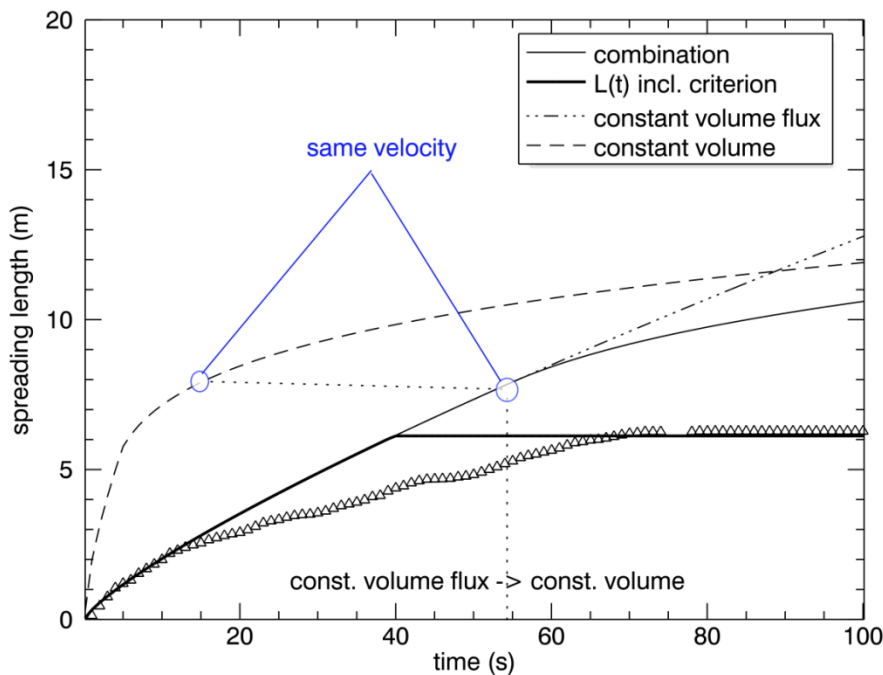


Abb. 4-22 Analytische Weg-Zeit-Funktionen und Bestimmung von Anknüpfungspunkten für die stückweise Kombination der Näherungslösung am Beispiel des Experimentes ECOKATS-V1 (Dreiecke: experimentelle Daten)

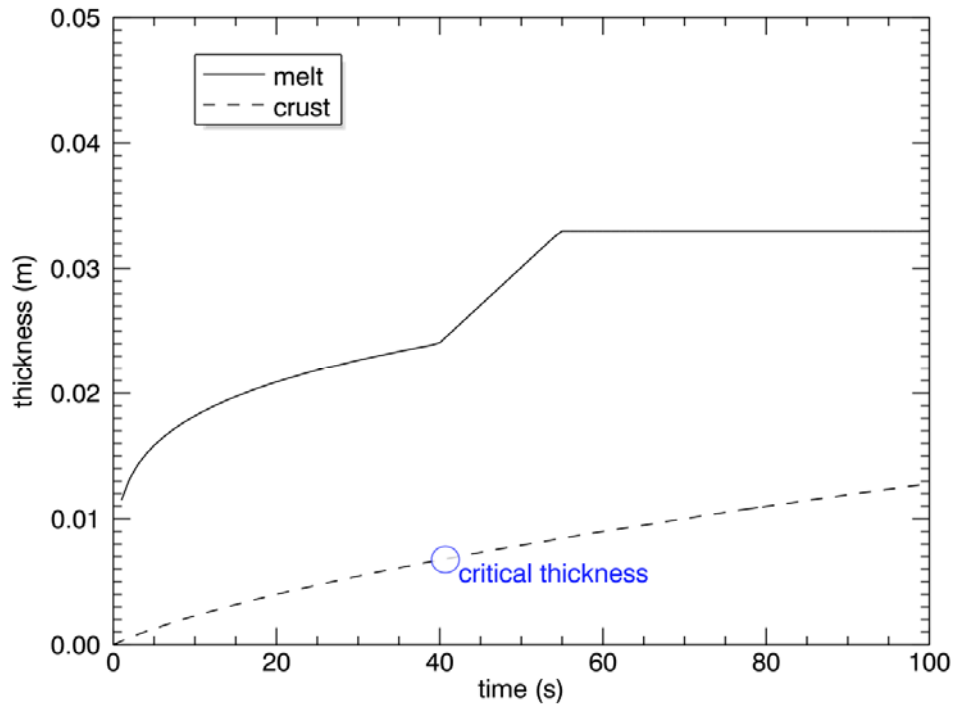


Abb. 4-23 Berechnung der Krustendicke im Vergleich zum Experiment ECOKATS-V1

Tab. 4-1 zeigt Rechenergebnisse des Modells für verschiedene Ausbreitungsexperimente (im Kanal und auf einer 2D-Fläche) bei Verwendung der genannten Werte für den jeweils an dieses Experiment angepassten f_{crit} -Parameter. Die so gefundenen Best-Estimate-Werte für f_{crit} hängen von der Experimentreihe ab (Tab. 4-2).

Tab. 4-1 Überprüfung des Modells an Ausbreitungsexperimenten und Best-Estimate Parameter-Werte für f_{crit}

Experiment	f_{crit}	Ergebnis Rechnung	rel. Abweichung	Ergebnis Experiment
ECOKATS-V1	0,28	L = 6,19 m	+1,8 %	L = 6,3 m
COMAS-EU2b	0,12	L = 4,59 m	+0,9 %	L = 4,63 m
VULCANO-VEU7	0,20	L = 0,44 m	+6,8 %	L = 0,47 m
KATS-14	0,14	L = 7,46 m	-2,8 %	L = 7,25 m
COMAS-5a	0,09	L = 4,84 m	-3,1 %	L = 4,69 m
KATS-12	0,15	L = 11,67 m	+0,3 %	L = 11,70 m
KATS-5	0,15	L = 7,58 m	0,0 %	L = 7,58 m
KATS-17	0,18	A = 3,18 m ²	-1,6 %	A = 3,13 m ²
KATS-16	0,19	A = 0,96 m ²	+5,2 %	A = 1,01 m ²
KATS-15	0,22	A = 2,39 m ²	+4,2 %	A = 2,49 m ²
ECOKATS-1	0,26	A = 4,84 m ²	+0,8 %	A = 4,88 m ²

VULCANO-VEU7	0,18	A = 0,063 m ²	+4,8 %	A = 0,066 m ²
FARO-L26-S	0,11	A = 0,126 m ²	+7,1 %	A = 0,135 m ²
COMAS-EU4	0,11	A = 10,66 m ²	-1,5 %	A = 10,59 m ²

Tab. 4-2 Mittlere f_{crit} -Werte für die vier behandelten Versuchsserien

Versuchsserie	mittlerer f_{crit}
COMAS (Siempelkamp)	0,11
VULCANO (CEA Cadarache)	0,18
FARO (JRC Ispra)	0,11
KATS (KIT Karlsruhe)	0,20

Mit der in diesem Vorhaben für ASTEC weiterentwickelten, schnell-laufenden Analysemethode zur Bewertung der Ausbreitung von Kernschmelzen wurde in einer Auftragsarbeit für die britische Aufsichts- und Genehmigungsbehörde HSE (Health and Safety Executive) im Jahr 2011 erfolgreich eine detaillierte Überprüfung von Szenarien für die Schmelzeausbreitung im Kernfänger des EPR durchgeführt. In dieser Untersuchung konnten wesentliche Parameter identifiziert werden, die auf die Effizienz der Schmelzeausbreitung im Sinne des Anlagenkonzeptes großen Einfluss haben.

4.5 Methode zur Integritätsbewertung von Rohrleitungen

4.5.1 Einleitung

Bei unterstellten Unfällen mit anstehendem hohem Druck (Kernschmelzszenarien im HD-Pfad) in einem Druckwasserreaktor (DWR) können in der heißseitigen Hauptkühlmittelleitung (HKL) und in der Volumenausgleichsleitung (VAL) Temperaturen von über 800 °C erreicht werden, bevor der Boden des Reaktordruckbehälters einen nennenswerten Temperaturanstieg erfährt und ggf. versagt /GRE 01/, /GRS 90/. Dabei ist insbesondere die Bestimmung von Sicherheitsabständen von HKL und VAL gegenüber Versagen von Interesse, d. h. der jeweiligen Zeitspanne, die zu einem bestimmten Ablaufzeitpunkt eines Unfalls noch vorhanden ist, bis die Tragfähigkeit des Bauteils erschöpft ist und Versagen nicht ausgeschlossen werden kann. Ein Versagen von HKL oder VAL unter hohem Druck vor dem RDB-Versagen im Unfallablauf würde die Auswirkungen auf den Sicherheitsbehälter wesentlich reduzieren.

Derartige Analysen zum Verhalten von Primärkreislaufkomponenten bei Unfällen werden in der Regel mit strukturmechanischen Rechenprogrammen basierend auf der finiten Elemente Methode (FEM) durchgeführt und können abhängig vom Detaillierungsgrad rechenzeitintensiv sein. Sie benötigen thermodynamische Größen aus Integral-/Systemcodes als Randbedingungen. Aus diesem Grund liegt die Durchführung derartiger Analysen i. A. außerhalb der gegebenen Möglichkeiten von thermohydraulischen Berechnungscodes, die komplette Reaktorsysteme beschreiben (Integral-/Systemcodes). Um eine vereinfachte und schnelle Erfassung des Strukturverhaltens in thermohydraulischen Berechnungen mit ausreichender Genauigkeit zu ermöglichen, wurde die Näherungsmethode ASTOR (**A**pproximated **S**tructural **T**ime of **R**upture) zur Abschätzung von Versagenszeiten von Primärkreislaufkomponenten entwickelt /EIS 93/.

Abhängig vom Anlagentyp kann bei einem DWR die Fragestellung, ob eine Hauptkühlmittelleitung oder die Volumenausgleichsleitung versagt, den Ablauf eines Hochdruckszenarios wesentlich verändern /GRE 01/. Daher ist es sinnvoll, dem Anwender eines Systemcodes wie z. B. ASTEC /DOR 09/ Kriterien für das strukturmechanische Versagen von Komponenten zur Verfügung zu stellen. In Fortsetzung der Arbeiten zur Abschätzung von Versagenszeiten von Primärkreislaufkomponenten, die von der GRS bereits in den 90er Jahren begonnen wurden /SCH 90/, wurden weitere Schritte zur Entwicklung von geeigneten Näherungsmethoden im obigen Sinne unternommen.

4.5.2 Analysemethodik ASTOR

Die Methode ASTOR wurde durch ein einfach anwendbares FORTRAN-Programm umgesetzt, das die Abschätzung von Versagenszeiten von Primärkreislaufkomponenten ermöglicht. Die Hauptvorteile der hier prinzipiell dargestellten Methode ASTOR liegen darin, dass sie als ein einfach anzuwendendes Werkzeug für schnelle Abschätzungen von zu erwartenden Versagenszeiten von Strukturen eingesetzt werden kann. Weiterhin kann sie aufgrund ihres geringen Berechnungsaufwandes vorteilhaft in thermohydraulische Rechencodes eingebunden werden und kann im Rahmen dieser Programme schnell und unkompliziert Abschätzungen zum Strukturverhalten liefern, die für gekoppelte Berechnungen des thermohydraulischen und strukturmechanischen Verhaltens von Primärkreislaufkomponenten benötigt werden. Ein weiterer Vorteil der Methode besteht darin, dass sie ein Maß für den aktuellen Schädigungsgrad liefert, der aus der Belastungsgeschichte einer Struktur bis zum betrachteten Zeitpunkt bestimmt

werden kann. Damit wird es möglich, mit der Methode ASTOR Zeiten von Komponenten bis zum Eintreten eines Versagenszustandes abzuschätzen, unter der Annahme, dass die momentanen Belastungszustände zeitlich konstant fort dauern. Die Abb. 4-24 zeigt den externen Datenfluss der Methode ASTOR.

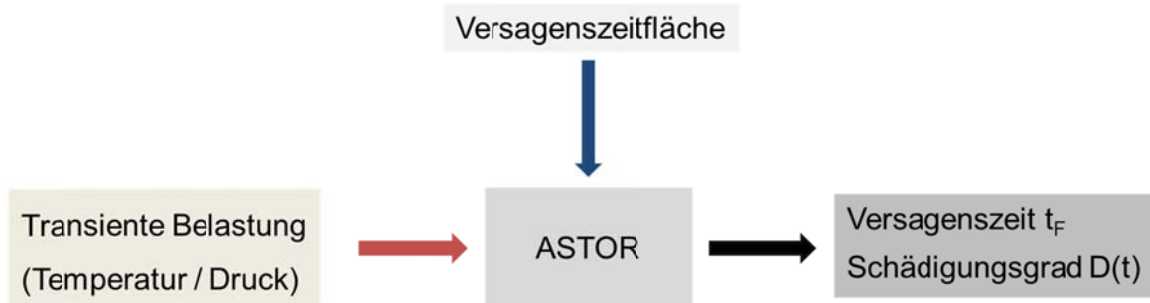


Abb. 4-24 Datenfluss der Methode ASTOR

Als Eingabedaten werden die Druck- und Temperaturtransienten (s. Abb. 4-25) benötigt, welche mit einem Integral-/Systemcode berechnet werden. Das Programm verwendet eine Versagenszeitfläche in Form von Versagenszeiten bei konstanten Druck- und Temperaturlasten, die durch Berechnungen mit einem FE-Code (z. B. ADINA /ADI 10/) ermittelt werden.

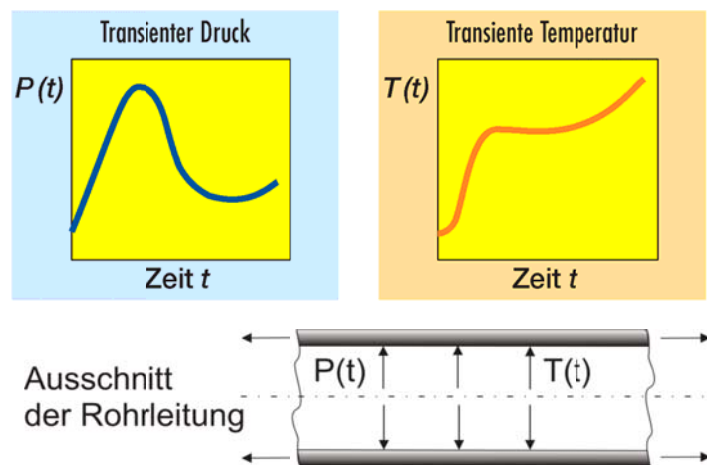
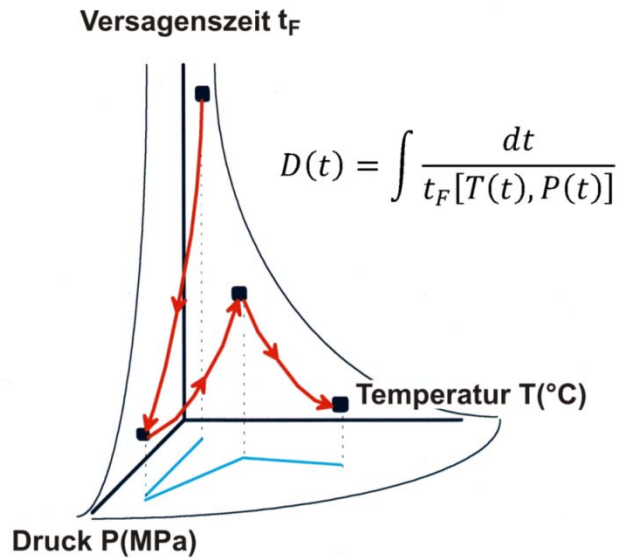


Abb. 4-25 Transiente Lasten auf eine Rohrleitung

Durch eine Vielzahl einzelner FE-Rechnungen, welche den erwarteten Druck- und Temperaturbereich während angenommener Unfallszenarios abdecken, wird eine Versagensfläche festgelegt, die in einem Raum aufgespannt wird, der durch die 3 Koordinatenachsen Druck, Temperatur und Zeit beschrieben wird (Abb. 4-26).



Lineare Schadensakkumulationshypothese in ASTOR

Abb. 4-26 Versagenszeitfläche und lineare Schadensakkumulationshypothese (ASTOR)

Die Methodik ASTOR verwendet die Versagensfläche in Verbindung mit einer linearen Schadensakkumulationshypothese zur Berechnung der Versagenszeit einer Struktur unter veränderlichen Lasten. In diesem Fall variieren die Lastparameter (Temperatur der Innenoberfläche und Innendruck) mit der Zeit. Für jeden Zeitpunkt, der durch eine spezifische Temperatur und einen spezifischen Druck gekennzeichnet wird, kann ein Schadensinkrement berechnet werden. Das Ergebnis der Aufsummierung der Schadeninkremente ist der Schädigungsgrad $D(t)$ (siehe Abb. 4-26). Ein Versagen kann bei einem Schädigungsgrad $D(t) = 1$, oder bei einem geringeren Wert, falls Sicherheitsfaktoren einbezogen werden, angenommen werden.

4.5.3 Berechnete Versagensflächen

Mit Bezug auf die allgemeine Beschreibung der ASTOR-Methodik (siehe Kapitel 4.5.2) wird im Folgenden die Erzeugung einer Versagensfläche einer Hauptkühlmittelleitung (HKL) und einer Volumenausgleichsleitung (VAL) eines DWR beschrieben. Die Abmessungen und verwendeten Reaktorstähle sind in Tabelle Tab. 4-3 zusammengestellt.

Tab. 4-3 Abmessungen und Werkstoff von HKL und VAL

Rohrgeometrie	Werkstoff	Innen-durchmesser	Außen-durchmesser	Wand-stärke
HKL	20 MnMoNi 5 5	750 mm	874 mm	62 mm
VAL	X10 CrNiNb 18 9	360 mm	425 mm	32,5 mm

Die in den Berechnungen verwendeten Werkstoffdaten, in Form von Spannungs-Dehnungskurven und Kriechkurven für den hier relevanten Temperatur- und Spannungsbereich sowie die Annahmen zu den Versagenskriterien sind in /ARN 12/ beschrieben. Das Vorgehen bei der Erzeugung der Versagensfläche war für HKL und VAL gleich. Es wurden jeweils 740 Berechnungen durchgeführt, die sich aus 10 Druckstufen von 0,5 MPa bis 18 MPa und 74 Temperaturstufen von 100 °C bis 1300 °C ergeben. In den Abb. 4-27 und Abb. 4-28 werden ausgewählte Versagenszeiten der HKL und VAL dargestellt. Die Spitzen der Balken kennzeichnen jeweils eine spezifische Versagenszeit, welche auf eine Druck- und Temperaturstufe bezogen ist. Es ist offensichtlich, dass eine Erhöhung des Druck- oder des Temperaturniveaus eine Verringerung der Versagenszeit zur Folge hat. Die Versagensflächen werden in den jeweiligen Diagrammen durch die Spitzen der Balken aufgespannt.

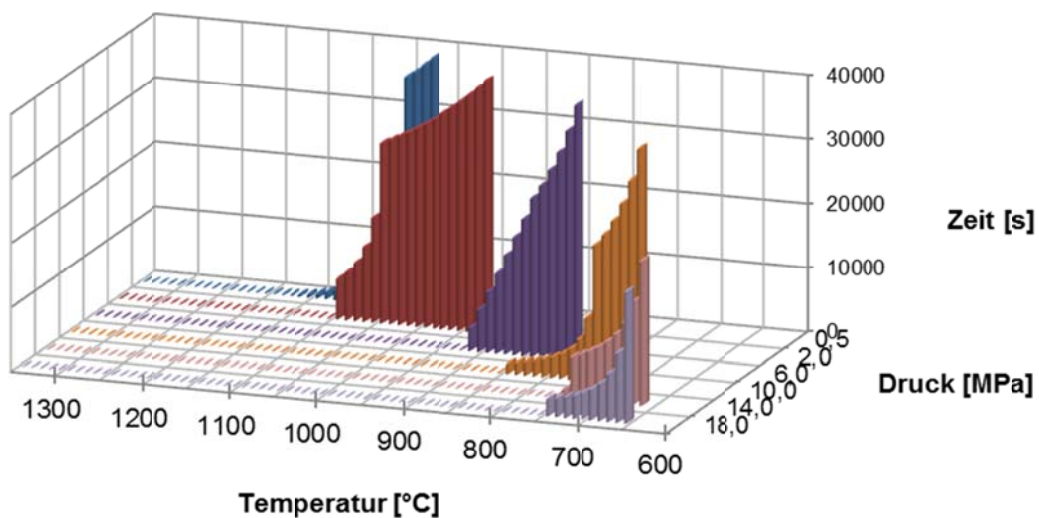


Abb. 4-27 Versagensfläche einer HKL (20 MnMoNi 55)

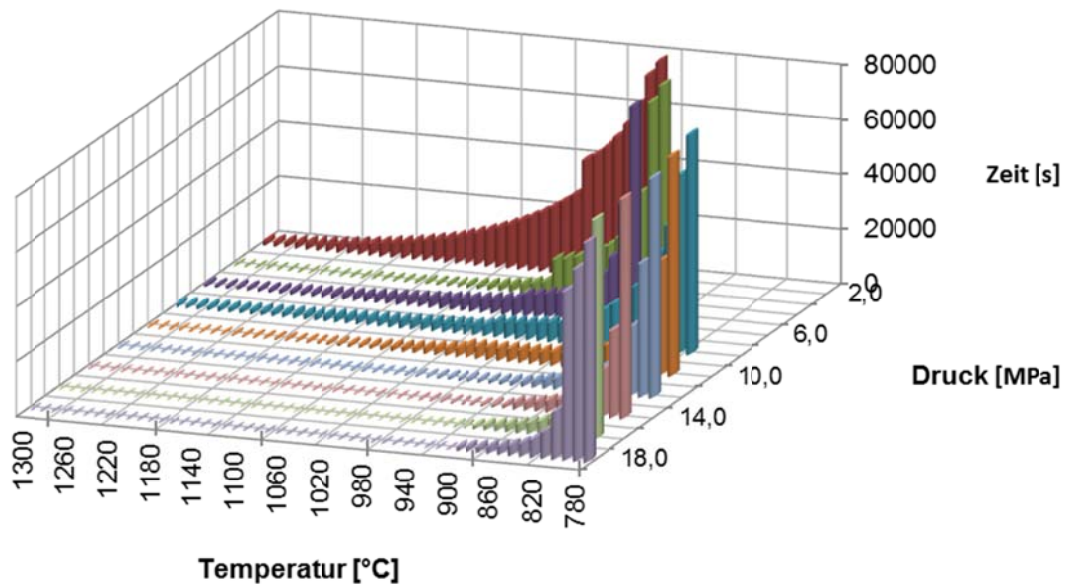


Abb. 4-28 Versagensfläche einer VAL (X10 CrNiNb 18.9)

4.5.4 Simulation eines Großversuchs

Zur Validierung der bei den Berechnungen zur Versagensfläche angewandten FE-Simulationstechnik, insbesondere der Annahmen zu den Versagenskriterien, werden die Ergebnisse eines Großversuchs herangezogen. Im Fokus dieser experimentellen Untersuchungen stand das kurzzeitige Kriechverhalten eines rohrförmigen Behälters bei hoher Temperatur- und Druckbelastung. Der Prüfkörper des Bauteilversuchs war aus dem Werkstoff 20 MnMoNi 55 hergestellt worden und hatte einen Innendurchmesser von 700 mm, eine Wandstärke von 47 mm und eine Länge von 2700 mm. An den eigentlichen Prüfabschnitt wurden beidseitig Verlängerungsrohre von jeweils 2700 mm Länge und 65 mm Wanddicke angeschweißt, um das Prüfvolumen zu erhöhen /MPa 88/. Die Versuchsbedingungen orientierten sich bezüglich Druck- und Temperaturbelastungen wie sie bei Kernschmelz Szenarien mit anstehendem hohem Druck /GRE 01, GRS 90/ auftreten können. Als Druckmedium wurde Luft verwendet. Der Druck wurde während der Aufheiz- und Haltezeit bei etwa 16,6 MPa nahezu konstant gehalten (siehe Abb. 4-29). Das Versagen erfolgte in Form eines großen Bruchs, wobei sich zunächst ein Längsriss ausbildete, der nach Erreichen der Rundnaht des unteren Verlängerungsrohres in Umfangsrichtung umgelenkt wurde und zu dessen Abriss führte.

Der im Versuch gemessene Unterschied zwischen Innen- und Außentemperatur wurde bei den FE-Analysen in Form einer mit ADINA /ADI 10/ berechneten Temperaturverteilung berücksichtigt. Die Analyseergebnisse zeigen, dass ab etwa 11 500 s die Kriechdehnungen und ab etwa 12 200 s die plastischen Dehnungen stark ansteigen (siehe /ARN 12/). Unterstellt man in Anlehnung an Untersuchungen zu anderen Versuchen /EIS 03/ als maximal zulässige Kriechdehnung 60 % der einachsigen Kriechbruchdehnung dividiert durch den Spannungsmehrachsigkeitsfaktor

$$TF = \frac{|\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3|}{\sigma_{\text{effektive}}} \quad (4-2)$$

(nach /JUF 84/) ergibt sich eine Versagenszeit von 12 470 s. Diese stimmt sehr gut mit der Versagenszeit des Experiments (12 469 s) überein.

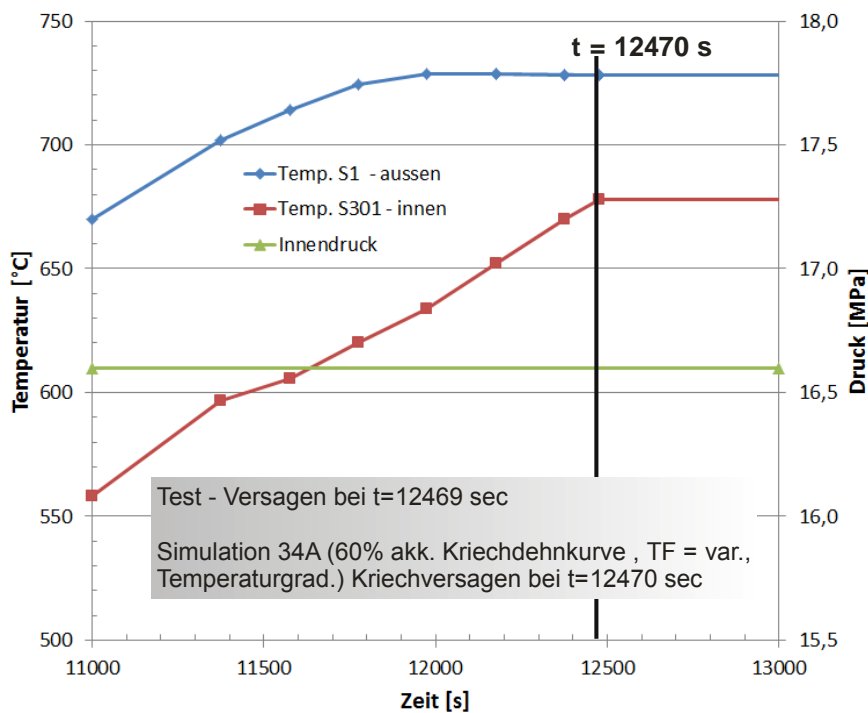


Abb. 4-29 Vergleich der Versagenszeiten (Test vs. Simulation)

4.5.5 Integritätsbewertung bei einem Unfallszenario

Im Folgenden wird ein unterstelltes Szenario mit Ausfall der DE-Speisewasserversorgung in einem DWR-Reaktor vom Typ Konvoi in Hinblick auf die Integrität der HKL und der VAL untersucht. Die zeitlichen Verläufe von Temperatur und

Druck (siehe Abb. 4-30 und Abb. 4-31) wurden mit dem Programm ASTEC ermittelt /REI 10/. Der berechnete Druckverlauf ist für HKL und VAL sehr ähnlich. Nachdem die jeweiligen Drücke auf nahezu 17 MPa steigen, werden bei etwa 9 300 s (ca. 2,6 h) die Druckhalterventile geöffnet und der Druck im Primärkreislauf fällt stark ab und liegt nur wenig über dem Druck im Sicherheitsbehälter. Die berechneten Temperaturverläufe der HKL und VAL unterscheiden sich in Hinblick auf die Maximalwerte. Während die HKL bei etwa 28 300 s durch ein Temperaturmaximum von 936 °C belastet wird, ist die maximale Temperatur der VAL mit 1283 °C bei etwa 26 900 s signifikant höher. Die maximalen Temperaturen liegen etwa 37 % (HKL) bzw. 10 % (VAL) unter den Schmelzpunkten der jeweiligen verwendeten Werkstoffe.

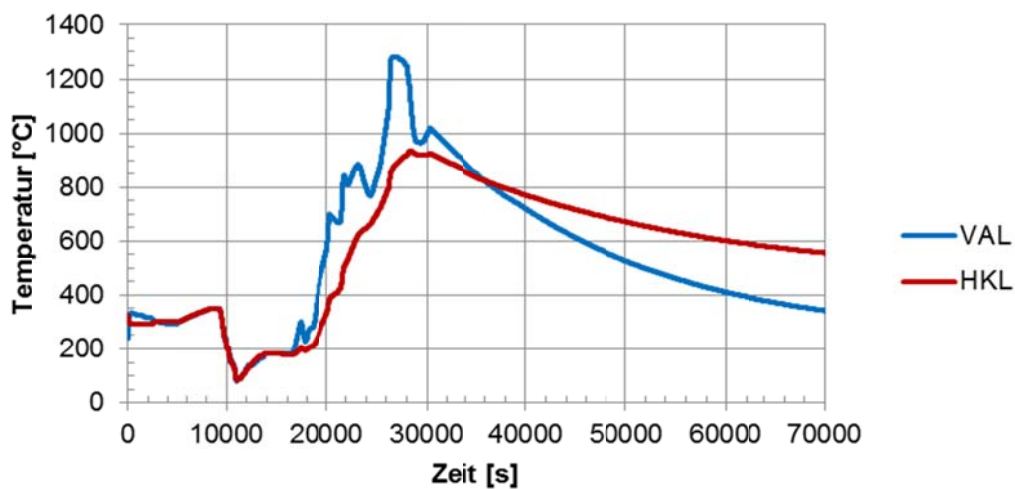


Abb. 4-30 Temperaturverlauf in der HKL und VAL

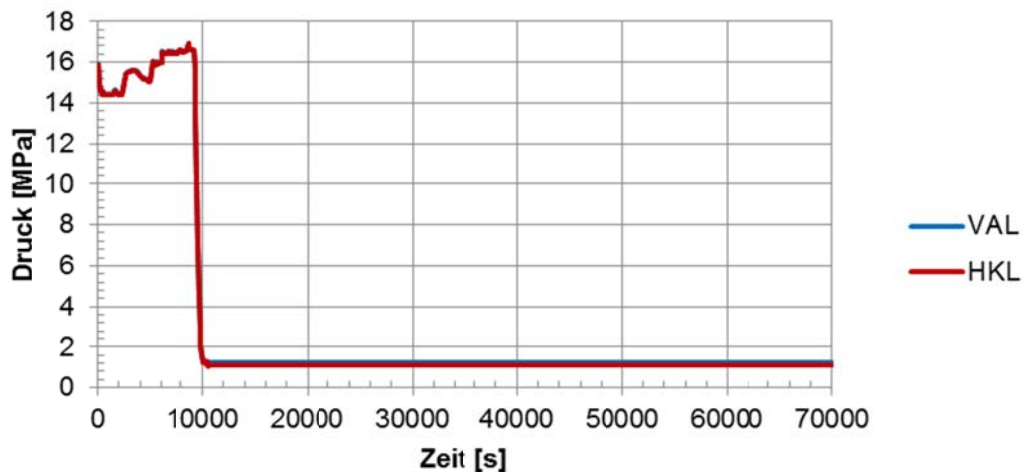


Abb. 4-31 Druckverlauf in der HKL und VAL

Für die Integritätsbewertung der HKL und VAL werden sowohl FE-Analysen mit einem rotationssymmetrischen Analysemodell als auch Berechnungen mit der Näherungsme-

thode ASTOR herangezogen. Dabei werden sowohl ein sicherheitsgerichtetes Versagenskriterium, d. h. Versagen kann ab einem bestimmten Zeitpunkt, nicht ausgeschlossen werden, als auch ein Versagenskriterium zum sicheren Versagen berücksichtigt. Details dazu sind im Fachbericht /ARN 12/ enthalten.

Abb. 4-32 enthält den mit ASTOR bestimmten Verlauf des akkumulierten Schädigungsfaktors $D(t)$ für HKL und VAL für das o.g. Berechnungsbeispiel. Zum Vergleich ist der im Rahmen einer FE-Analyse bestimmte Zeitpunkt eingezeichnet, ab dem ein Versagen der VAL gemäß dem angenommenen Versagenskriterium nicht ausgeschlossen werden kann. Demnach liegt die Versagensgrenze für eine Integritätsbewertung der VAL mit der Näherungsmethode ASTOR im Bereich $D = 0.5 - 0.6$.

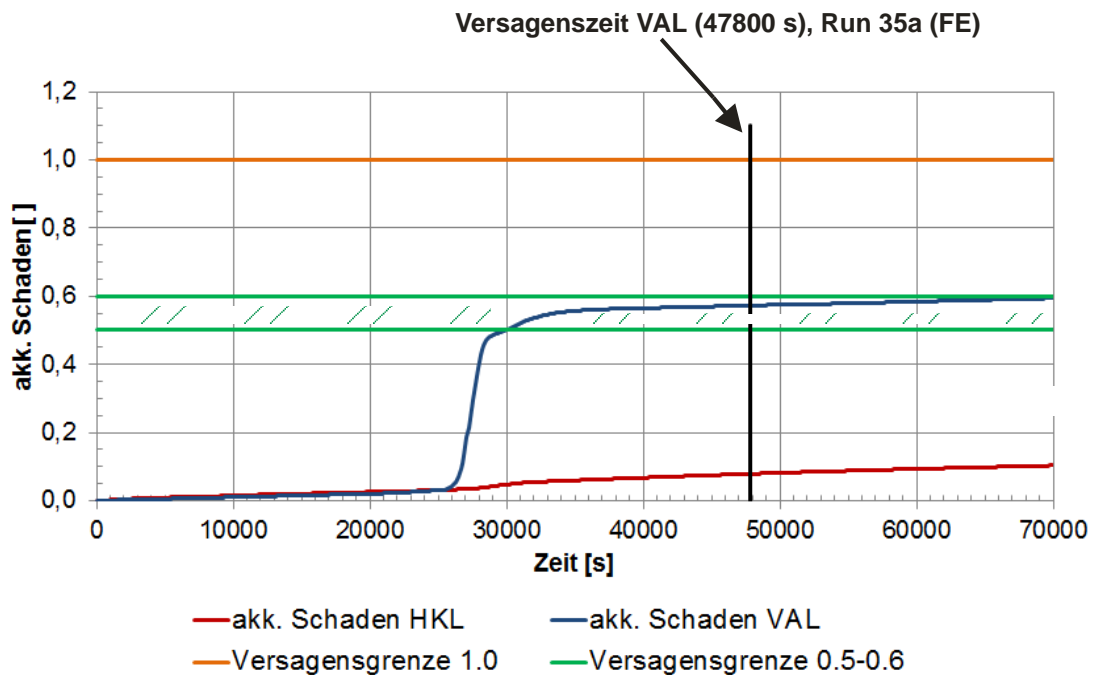


Abb. 4-32 Schadensakkumulation und Versagensgrenzen

Für eine Integritätsbewertung bezüglich eines sicheren Versagens einer Rohrleitung wird der Grenzwert $D = 1$ angesetzt. Dieser würde in der Analyse im betrachteten Zeitraum für HKL und VAL nicht erreicht.

Die Auswertung zeigt auch auf, dass die Analyse ein Versagen der VAL mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit prognostiziert, obwohl frühzeitig im Unfallablauf der Reaktorkreislauf weitgehend druckentlastet wurde. Dies ist insbesondere durch die sehr ho-

hen Strukturtemperaturen bedingt, deren sichere Prognose eine wesentliche Randbedingung ist.

4.5.6 Zusammenfassung

Im Rahmen des Vorhabens wurde eine Analysemethodik weiterentwickelt und validiert, welche eine vereinfachte Berechnung von Versagenszeiten von Rohrleitungen bei transienten Belastungen ermöglicht. Im Zentrum dieser Analysemethodik steht das Näherungsverfahren ASTOR, basierend auf einer linearen Schadensakkumulationshypothese unter Verwendung von Versagensflächen, die mit Hilfe einer Vielzahl von einzelnen FE-Berechnungen, exemplarisch für die HKL (Werkstoff 20 MnMoNi 5 5) und die VAL (Werkstoff X 10 CrNiNb 18 9) vom Typ Konvoi erzeugt wurden.

Die berechneten Versagenszeiten sind stark abhängig von den Annahmen zu den Versagenskriterien, den Spannungsänderungen während der Lasttransiente, den Materialeigenschaften des Rohrleitungswerkstoffs bezüglich Plastifizierung und Kriechen sowie den berechneten Temperaturen und Drücken.

Die Simulation eines Behälterberstversuchs bestätigt, dass die FE-Methode mit den angewendeten Versagenskriterien als "best estimate" Methode angesehen werden kann. Untersuchungen zu einem unterstellten Speisewasserausfallszenario in einem DWR vom Typ Konvoi zeigen, dass die Näherungsmethode ASTOR für Abschätzungen zur Integrität von HKL und VAL geeignet ist, insbesondere für sicherheitsgerichtete Aussagen, d. h., dass Versagen nicht ausgeschlossen werden kann, sowie für Aussagen, dass auf jeden Fall mit einem Versagen gerechnet werden muss. Das Softwaremodul ASTOR wurde für die Integration in ASTEC vorbereitet. Für Anwendungen, die von den bisher betrachteten Randbedingungen, insbesondere bezüglich Rohrleitungsgeometrie und Werkstoffeigenschaften wesentlich abweichen, müssten zusätzliche Versagensflächen bestimmt werden. Details zu der Analysemethodik und den beispielhaften Anwendungsrechnungen sind im Fachbericht /ARN 12/ zusammengefasst. Teilergebnisse wurden auf der internationalen Konferenz SMiRT21 /ARN 11/ präsentiert.

4.6 Übergang von der Version ASTEC V1 nach V2

Der Entwicklungsbedarf für ASTEC leitet sich aus verschiedenen Quellen ab. Der langfristige Entwicklungsplan wird in den aus Mitgliedern von GRS und IRSN paritätisch

besetzten Kontroll- und Arbeitsgremien gemeinsam erarbeitet und definiert und basiert sowohl auf neuen Erkenntnissen aus Wissenschaft und Technik als auch auf eigenen Analysen der Entwickler. Im Verlaufe des Projektes wurden sieben Treffen der Technical Review Group (TRG) und vier Treffen des Steering Committee (SC) abgehalten. Die TRG-Treffen waren meist mit einem technischen Meeting zu speziellen Fragestellungen verknüpft. Hierzu zählen speziell Themen mit besonderem Interesse für die GRS, also z. B. die bei GRS entwickelten Modellerweiterungen für MCC1, die Abstimmung der Arbeiten zu DCH unter Einbeziehung der Erfahrungen mit COCOYS, die Neuformulierung der ASTEC-ATLAS-Kopplung, die Strategie zur Überprüfung und Verbesserung des SPARC-Modells sowie der Erfahrungsrückfluss aus den KONVOI-Anlagenrechnungen. Die Ergebnisse der Treffen sind in den entsprechenden Protokollen festgehalten.

Insbesondere erwachsen aber auch aus den Arbeiten der ASTEC-Anwender innerhalb des Exzellenz-Netzwerkes der Europäischen Kommission (Severe Accident Research Network – SARNET2) zusätzliche Anforderungen an die Entwickler, die oftmals nicht vorab berücksichtigt werden können, in der Regel aber eben nicht im langfristigen Entwicklungsplan detailliert vorgesehen sind. Diese zusätzlichen, oftmals kurzfristigen Anforderungen ergeben sich meist aus der Bearbeitung und Analyse sogenannter MARCUS-Anfragen. MARCUS (s. auch Abschnitt 4.8) stellt eine WWW-basierte Plattform zur Unterstützung der ASTEC-Anwender dar.

Entsprechend dem langfristigen Entwicklungsplan sind bestimmte Entwicklungsabschnitte definiert, zu denen dann jeweils eine neue ASTEC-Version freigegeben und an die Anwender verteilt oder zum Herunterladen vom SARNET-Portal im Internet bereitgestellt wird. Zusätzlich können nach Bedarf bzw. bei größeren Änderungen im Programm, die eine Herausgabe einer neuen Version sinnvoll machen, sog. Revisionen definiert werden. Die genauen Randbedingungen sind (neben anderen qualitätssichernden Maßnahmen) in /CHA 11/ festgehalten.

Mit dem Abschluss des Projekts im März 2012 ist ein Überblick über die während der Projektlaufzeit freigegebenen Versionen hilfreich, dies verdeutlicht gleichzeitig auch den Entwicklungsfortschritt und -status.

Freigegebene Versionen ("Release") und Revisionen/Patches seit Beginn von SARNET:

- ASTEC-V1.3 rev 3 patch 1 (Dezember 2008)

- ASTEC-V2.0 (July 2009)
- ASTEC-V2.0 revision 1 (Juni 2010)
- ASTEC-V2.0 revision 1 patch 2 beta (März 2011)
- ASTEC-V2.0 revision 2 (Dezember 2011, /CHA 11b/)

Entsprechend der ASTEC-Qualitätssicherung wird eine "Patch"-Version nur unter besonderen Bedingungen erstellt und an solche Anwender ausgeliefert, deren spezielle Anforderungen eigens die Erstellung einer "Patch"-Version notwendig machen. Dies gilt z. B. für geringfügige Fehler, die nur bei dem betreffenden Anwender bzw. bei dem von ihm gerechneten Problem auftreten. Vorrangiges Ziel ist die rasche Beseitigung dieses Einzelfehlers.

Schwerpunkt bei der ASTEC-Entwicklung seitens IRSN war der Ersatz des Kernzerstörungsmoduls DIVA durch das Modul ICARE mit Übergang von ASTEC V1.3 auf ASTEC V2.0 /CHA 10/, das sich insbesondere durch einige Modelle für die Spätphase eines Unfalls auszeichnet, bei der die Brennstabstruktur aufgelöst wird und die Kernstruktur eher als magmaartige Schmelzeansammlung angesehen werden kann. Neben der eigentlichen Modellerweiterung, die für jede neue Version in einem gemeinsam verfassten Fortschrittsbericht dokumentiert werden, sind auch Änderungen an den Datensätzen zu berücksichtigen. Weitere wesentliche Entwicklungsschritte durch IRSN betreffen z. B. den Einbau eines Moduls zur Dosisleistungsberechnung in der Atmosphäre des Containments und die Erweiterung von MEDICIS auf die Modellierung mehrerer nacheinander auftretender Schmelzepools (wie im Falle des EPRs). Die Entwicklung eines neuen Flammenfrontmodells in CPA (vgl. Abschnitt 4.3) sowie die neue Kopplung von ATLAS mit ASTEC wurden insbesondere durch die GRS oder mit Beteiligung der GRS durchgeführt. Nicht näher aufgeschlüsselt werden an dieser Stelle die zahlreichen „kleinen“ Modellerweiterungen und Fehlerbeseitigungen, die im Freigabebericht zu jeder neuen Version dokumentiert sind (z. B. /DOR 08, CHA 11/).

4.7 Änderungen COCOSYS <-> ASTEC-CPA

Im Rahmen des Modellabgleichs von COCOSYS und ASTEC-CPA werden die Modellentwicklungen z. B. auch anhand der Regressionstests ausgewertet und hinsichtlich eines notwendigen Modelltransfers überprüft. Neben einer Vielzahl von Detailverbesserungen

rungen betraf dies die nachfolgend aufgeführten Einzelpunkte, die meist detailliert an anderer Stelle dieses Berichts erläutert werden:

- Der Transfer des Modells zur trockenen Resuspension ist von COCOSYS zu ASTEC-CPA durchgeführt worden. Ein COCOSYS-Datensatz ist auf einen CPA-Datensatz umgestellt worden. CPA berechnet in den Anwendungsfällen vergleichbare Ergebnisse zu COCOSYS.
- Das Flammenfront-Modell FRONT in ASTEC ist nach COCOSYS übertragen worden. Intensive Tests führten zu zahlreichen Modifikationen und Verbesserungen. So wurde in COCOSYS die Flammenfrontintegration in die FEBE eingebaut und es wurden sämtliche Arten von atmosphärischen Strömungsverbindungen als Möglichkeit für die Flammenausbreitung berücksichtigt. Diese Modifikationen des FRONT-Moduls wurden nach ASTEC zurück übertragen.
- Die Diskussion von Ergebnissen zum Pool-Scrubbing Model SPARC in ASTEC/CPA hat Fragestellungen zur Leistungsfähigkeit und Konsistenz der SPARC-Implementationen in ASTEC und COCOSYS aufgeworfen. Bei dem Vergleich der SPARC-Versionen in ASTEC und COCOSYS sind einige Fehler in der CPA-Version von SPARC entdeckt worden. Ferner ist ein Modellunterschied zwischen CPA und COCOSYS identifiziert worden, der einen großen Einfluss auf die Ergebnisse hatte. Die Fehlerkorrekturen und eine Modellanpassung sind so in CPA eingepflegt worden, dass SPARC in COCOSYS und in CPA jetzt vergleichbare Ergebnisse liefert. Die Arbeiten werden fortgeführt.
- Für Vergleichsrechnungen zwischen ASTEC und COCOSYS ist eine automatische Umstellung der Datensätze für die beiden Programme sehr hilfreich. Die zu diesem Zwecke bereits verfügbaren Transferprogramme "ast2coc" und "coc2ast" wurden aktualisiert und an veränderte Eingabestrukturen angepasst.

4.8 Unterstützung interner und externer ASTEC-Nutzer

Im Projektzeitraum wurde begleitend zu den Aktivitäten im SARNET2-Rahmen die Unterstützung externer als auch der ASTEC-Anwender im SARNET2 sichergestellt. Des Weiteren wurden im Rahmen von SARNET2 sog. "Users' Clubs" durchgeführt, die eine Rückmeldung der Aktivitäten der ASTEC-Anwender ermöglichen und ein direktes Diskussionsforum darstellen und somit dem Entwickler eine wertvolle Hilfe bei der Diskussion von Anwenderproblemen geben. Der letzte Workshop wurde im Herbst 2010 in

Köln von der GRS ausgerichtet. Als zusätzliches Thema wurde auch die Kopplung von ASTEC mit dem GRS-eigenem Visualisierungswerkzeug ATLAS in zwei Präsentationen ausführlich vorgestellt.

Unterstützende Arbeiten seitens der GRS konzentrierten sich im Wesentlichen auf die Beseitigung von Anwenderproblemen bei der Erstellung korrekter Eingabedatensätze insbesondere für das von der GRS bereitgestellte ASTEC-Modul CPA zur Simulation von Vorgängen im Containment.

MARCUS

Als fester Bestandteil der Unterstützung ist die von Beginn an verfolgte Strategie mittels des Software-Werkzeugs MARCUS etabliert worden. Vor dem Hintergrund steigender Nutzerzahlen muss dem Support hohe Aufmerksamkeit beigemessen werden. Über dieses zentrale Werkzeug werden Fehler oder Probleme dem Entwickler direkt mitgeteilt. Der MARCUS-Zugang steht allen offiziell registrierten Anwendern kostenlos zur Verfügung. Der Zugriff erfolgt nach Zulassung direkt über das World Wide Web (<https://www-marcus.irsn.fr/irsn/irsn/login/>). MARCUS stellt eine einheitliche Prozedur für die Kommunikation zwischen Benutzer und Entwickler zur Verfügung und vereinfacht somit die Abarbeitung der Anfragen, deren Dokumentation und Problemlösung und nutzt letztlich auch Synergieeffekte, da allen Nutzern die bereits abgehandelten Anfragen und Problemlösungen, soweit sie nicht der Geheimhaltung unterliegen, jederzeit zur Verfügung stehen. Hier können externer Programmanwender ihre Probleme (i. a. Programmabstürze oder unlogische Ergebnisse), Fragen zur ASTEC-Anwendung und Wünsche an die Programmentwickler von IRSN und GRS kommunizieren. Nach Lösung/Bearbeitung der Fragen werden diese Lösungen in MARCUS abgelegt und sind damit für alle registrierten ASTEC-Anwender einsehbar. Programmänderungen fließen dabei jeweils in die nächste freigegebene ASTEC-Version ein. Unter besonderen Bedingungen werden von IRSN auch Patches zur sofortigen Fehlerkorrektur für einzelne Anwender erstellt.

Die Aktivitäten zur Betreuung externer Nutzer von ASTEC sind nicht genau planbar, sondern werden mit Öffnung von MARCUS-Sheets durch die Anwender angestoßen. Details können unter obiger Adresse nachvollzogen werden. Hierbei sind durch die GRS schwerpunktmäßig relevante Fragen zu dem Modul CPA (Containment Part of ASTEC) zu bearbeiten. U. a. betraf dies während der Projektlaufzeit Probleme mit dem DRASYS-Zonenmodell zur Simulation von Druckabbausystemen, zur Pumpensimulati-

on oder der Aerosolrückhaltung in Wasservorlagen (SPARC). Ein weiterer Problemkreis stellte die Anwendung des Verbrennungsmodells PROCO sowie seine Kopplung mit CPA dar.

Um die Einbeziehung der GRS in den ASTEC User Support zu zeigen, wird im Folgenden beispielhaft die Lösung des MARCUS Sheets "CAD/2062/PROCO" genauer erläutert:

- Von dem Institut IVS Trnava wird über MARCUS ein Programmabsturz mit der ASTEC V2.0r2-Version gemeldet. Er trat auf, als das PROCO-Verbrennungsmodell im generischen Beispiel-Datensatz für einen WWER-440 aktiviert wurde. Datensatz und Ausgabefiles wurden dem MARCUS-Sheet beigelegt.
- Das Problem wurde vom ASTEC-Maintenance-Team analysiert und als Ursache eine Division durch Null auf Grund unvollständiger PROCO-Eingabedaten identifiziert. Dies wurde bei der ASTEC-Rechnung nicht festgestellt, da für die entsprechenden PROCO-Eingabedaten keine Rule-Files zum Check der Daten existierten. Da das von IRSN entwickelte PROCO-Modell von der GRS modifiziert und dann in ASTEC implementiert wurde, erfolgte die Weiterleitung des Problems inklusive weiterer Hinweise für die Lösung an die GRS.
- Der ursprüngliche GRS-Bearbeiter ist nicht mehr Mitglied des ASTEC-Teams und konnte deshalb nicht für die weitere Bearbeitung herangezogen werden. Als erster Lösungsschritt wurde das Problem auf Computern der GRS reproduziert. Basierend auf dem PROCO-User-Manual erfolgte die Vervollständigung des ASTEC-Datensatzes. Nach Rücksprache mit dem ursprünglichen Bearbeiter der GRS konnte dazu ein von ihm entwickeltes Hilfsprogramm NodalCmp reaktiviert werden. Anschließend wurde der Rule-File proco.rul zum Check der Daten vervollständigt. Auf Grund der GRS-Modifikationen nicht mehr benötigte Daten wurden aus der PROCO-Einlese-Routine entfernt. Alle Änderungen wurden in das CVS-System eingespielt. Sie werden damit automatisch in die nächste freigegebene ASTEC-Version übernommen. Der vervollständigte WWER-440-Datensatz, der komplettierte Rule-File, das reaktivierte Hilfsprogramm und weitere Hinweise wurden in MARCUS als Lösung abgelegt und der Sheet damit geschlossen.
- MARCUS sendet eine automatische Information an das IVS Trnava, das auf alle Informationen und Dateien Zugriff hat. Andere ASTEC Nutzer können bei ähnlichen Problemen als Hilfestellung auf den Lösungsablauf zugreifen.

CVS

Das Konfigurationsmanagement von ASTEC, d. h. die Protokollierung aller durch IRSN und GRS vorgenommenen Änderungen am Quelltext, erfolgt durch die ausschließliche Nutzung von CVS. Das bisherige CVS-System lief auf einem mehr als 10 Jahre alten Linux-Server. Hier war auf Grund des Umzugs des SfR-Rechenzentrums der Wechsel auf einen neuen Server notwendig, was einen relativ hohen und ungeplanten Aufwand erforderte.

Von SfR wurde im Zusammenhang damit die Virtualisierung des CVS-Server ftp.grs.de vorgeschlagen. Vorteil dieser Lösung ist die Möglichkeit, dass dieser virtuelle Linux-Server jederzeit auf andere Hardware übertragen werden kann sowie eine höhere Sicherheit des ASTEC-Repository gegen Angriffe von außen. Gemeinsam mit SfR wurde ein Weg erarbeitet, den Wechsel vom alten zum neuen Server ohne jegliche Änderung auf Seiten der ASTEC-CVS-Anwender durchzuführen. Vor Freigabe des neuen Servers waren umfangreiche Tests notwendig, um alle bisherigen CVS-Features auch in der neuen Umgebung zu konfigurieren und auf Grund der strengeren Zugriffsberechtigungen zu gewährleisten. Der Wechsel zum neuen virtuellen CVS-Server, d. h. dessen Freischaltung für alle CVS-Nutzer, erfolgte im August 2011.

Seitens SfR wurde empfohlen, in naher Zukunft von CVS zu einem neueren System wie SVN zu wechseln. IRSN will gegenwärtig allerdings an CVS festhalten, da laut IRSN ASTEC mit seinen vielen Entwicklungszweigen unter SVN Probleme bereitet. In Zusammenarbeit mit SfR wurde eine Präsentation für ein Meeting der ASTEC-Technical-Review-Group als Diskussionsgrundlage für das weitere Vorgehen beim Konfigurationsmanagement erarbeitet. Eine entsprechende Entscheidung der TRG steht noch aus.

5 Querschnittsaktivitäten

5.1 Rückwirkungen aus der Validierung

5.1.1 Brandsimulation

Da konventionelle Brände in Kernkraftwerken aufgrund möglicher Redundanzüberschreitungen ein ernsthaftes Sicherheitsrisiko darstellen können, hat die Bedeutung von Brandsimulationen im Rahmen von Sicherheitsanalysen für Kernkraftwerke zugenommen. Daher wurde COCOSYS in früheren Vorhaben (z. B. /SPE 09/) dahingehend weiterentwickelt, dass es sich ebenfalls zur Anwendung auf Brandszenarien (sowohl von flüssigen Brennstoffen als auch Kabelbränden) eignet. Zur Validierung von COCOSYS im Rahmen der Brandsimulation hat die GRS am fünfjährigen, durch OECD/NEA/CSNI finanzierten PRISME-Projekt teilgenommen, in dessen Rahmen 22 realmaßstäbliche Brandversuche in Ein- und Mehrraumgeometrie in der DIVA-Anlage in Cadarache (Frankreich) von IRSN durchgeführt worden sind (BMU Vorhaben 3607R02577, /KLE 10/).

Eine der größten Schwierigkeiten bei der Brandsimulation stellt die Vorhersage der Pyrolyserate (d. i. die Masse, die pro Zeiteinheit in den gasförmigen Zustand übergeht – pyrolysiert) bzw. der Verbrennungsrate (pyrolysierte Masse, die pro Zeiteinheit verbrennt) dar. Das sind die wichtigsten Einflussfaktoren auf fast alle interessanten thermodynamischen Größen im betrachteten Gebäude bei Verbrennungsvorgängen /KLE 09/. Für die Validierung von Brandsimulationsprogrammen anhand von Experimenten wird üblicherweise die im Experiment beobachtete Verbrennungsrate direkt vorgegeben und nur geprüft, inwiefern sich das Simulationsprogramm zur Berechnung der Thermodynamik des Brandraumes und der Entstehung und Verbreitung der Brandgase eignet.

In realen Anwendungssituationen oder für Auslegungsrechnungen von geplanten Experimenten ist die Vorausberechnung der Pyrolyserate jedoch von großer Bedeutung.

Für Ölbrände unter freiem Himmel gelang es Brabauskas, eine Korrelation für die Pyrolyserate $\dot{m}''_{PYR,0}$ des voll entwickelten Feuers (stabile Gleichgewichtsphase) abzuleiten /BRA 03/:

$$\dot{m}''_{\text{PYR},0} = \dot{m}''_{\text{MAX}} \cdot (1 - e^{-k\beta D}) \quad (5-1)$$

für Öllachen mit Durchmesser $D > 20\text{cm}$

Diese Korrelation hängt nur von bekannten Materialkonstanten (maximale Pyrolyserate \dot{m}''_{MAX} ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$), Absorptions-Extinktionskoeffizient k (m^{-1}) und der durchschnittlichen Strahlungslängenkorrektur β) ab.

In diesem Vorhaben wurde ein Modell zur Vorausberechnung der Pyrolyserate für Flüssigkeitsbrände in geschlossenen Räumen in COCOSYS implementiert und anhand von verschiedenen OECD-PRISME Versuchen sowie dem Versuch HDR E41.7 erfolgreich validiert /PEL 11/ Flüssigkeitsbrände stellen den grundlegendsten Fall eines Brandgutes dar und werden daher in der Literatur besonders intensiv untersucht; zudem beschäftigte sich das OECD-PRISME-Projekt fast ausschließlich mit Ölbränden.

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

5.1.1.1 Darstellung des Modells

Die während eines Brandes (Abb. 5-1) pyrolysierte Masse ist durch die Energiebilanz an der Brandgutoberfläche gegeben /BEN 01/:

$$\dot{m}''_{\text{PYR}} \cdot \Delta H_v \cdot A_{\text{surf}} = \dot{Q}_{\text{conv,fl}} + \dot{Q}_{\text{rad,fl}} - \dot{Q}_{\text{loss,fuel}} + \dot{Q}_{\text{rad,ext}} \quad (5-2)$$

Hierbei ist \dot{m}''_{PYR} die Pyrolyserate ($\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$), ΔH_v die Verdampfungsenthalpie (J/kg) und A_{surf} die Oberfläche des Brandgutes (m^2). Die aufgeführten Wärmeströme sind

1. Der konvektive Wärmestrom von der Flamme auf das Brandgut $\dot{Q}_{\text{conv,fl}}$
2. Die Strahlung der Flamme auf das Brandgut $\dot{Q}_{\text{rad,fl}}$
3. Wärmeverluste im Brandgut, die nicht zur Pyrolyse beitragen $\dot{Q}_{\text{loss,fuel}}$
4. Externe Strahlung (z. B. von der Heißgasschicht) auf das Brandgut $\dot{Q}_{\text{rad,ext}}$

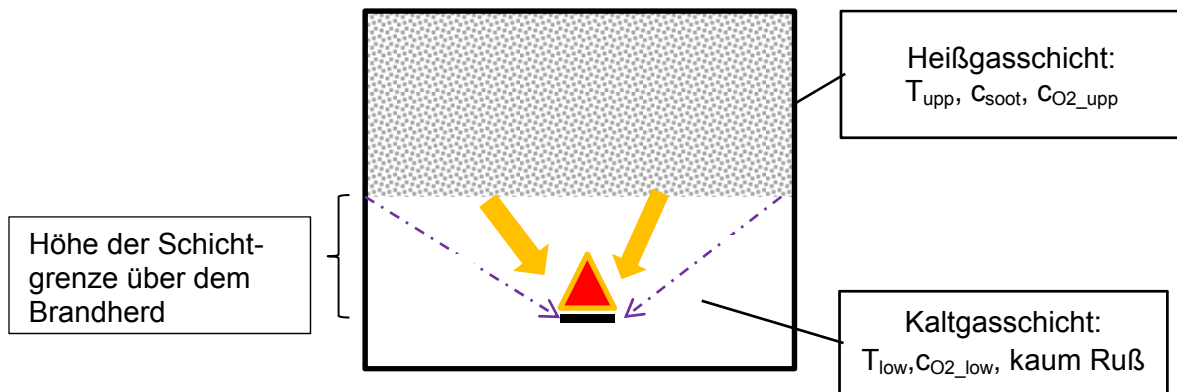


Abb. 5-1 Schematische Darstellung eines Brandraumes

Phänomenologisch gesehen hängt die Pyrolyserate in einem geschlossenen Raum hauptsächlich von der Sauerstoffkonzentration und der Raumtemperatur ab. Während eine geringere Sauerstoffkonzentration den Abbrand verlangsamt, können hohe Temperaturen in der Heißgasschicht den Brand durch die Strahlung $\dot{Q}_{\text{rad,ext}}$ weiter anfeuern.

Die Abbrandrate unter freiem Himmel (5-1) reduziert sich bei Sauerstoffmangel im geschlossenen Brandraum gemäß der Peatross-Beyler-Korrelation /PEA 97/:

$$\dot{m}_{\text{PYR}}'' = \dot{m}_{\text{PYR,o}}'' \cdot \left[(1 + \alpha) \cdot \frac{c_{\text{O}_2}}{c_{\text{O}_2,o}} - \alpha \right] \quad (5-3)$$

Hierbei ist c_{O_2} die Sauerstoffkonzentration in der Kaltgasschicht (Vol.-%) (vgl. Abb. 5-1) und $c_{\text{O}_2,o} = 21$ Vol.-% die Sauerstoffkonzentration unter freiem Himmel. Die Peatross-Beyler-Korrelation nimmt für sich in Anspruch, den kompletten Wärmestrom von der Flamme zum Brandgut $\dot{Q}_{\text{conv,fl}} + \dot{Q}_{\text{rad,fl}}$ aus (5-2) zu beschreiben. Sie konnte für die vergleichsweise „kalten“ PRISME-SOURCE- und PRISME-DOOR-Versuche und $\alpha = 1,1$ bestätigt werden (Abb. 5-1).

Im Gegensatz dazu konnte sie für die PRISME-LEAK- und INTEGRAL-Versuche nicht bestätigt werden. In diesen Versuchen lag die Temperatur der Heißgasschicht mehrere hundert K über der Verdampfungstemperatur des verwendeten Öls. Die von der Heißgasschicht emittierte Wärmestrahlung $\dot{Q}_{\text{rad,ext}}$ hat den Brand trotz geringer Sauerstoff-

konzentration weiter angefacht. Dieser Prozess wird durch die Peatross-Beyler-Korrelation nicht erfasst.

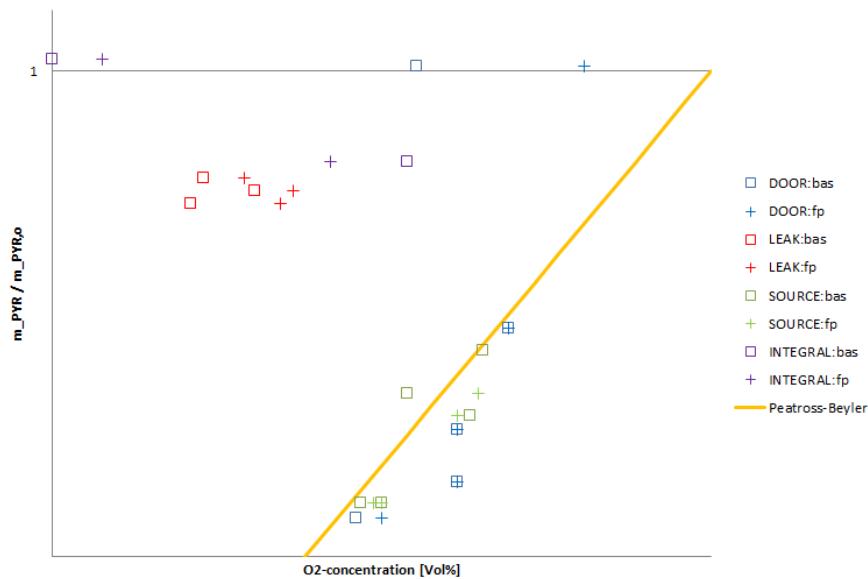


Abb. 5-2 Gemessene Gleichgewichts-Pyrolyseraten in den OECD PRISME Experimenten (normalisiert mit der Pyrolyserate unter freiem Himmel) in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration in der Kaltgasschicht (zwei Messpunkte pro Versuch)

Bei der Berechnung der externen Wärmestrahlung $\dot{Q}_{rad,ext}$ beschränkt sich das in COCOSYS implementierte Modell auf die Strahlung aus der Heißgasschicht. Die Strahlung von den den Brandraum umfassenden Wänden wird vernachlässigt, da die Wandtemperaturen üblicherweise und insbesondere in allen PRISME Versuchen unterhalb der Verdunstungstemperatur des Öls lagen.

Der Brandraum ist in COCOSYS in (nicht notwendigerweise) äquidistante Layer unterteilt (Abb. 5-3). Die vertikale Unterteilung sollte fein sein, da in einem Brandszenario üblicherweise hohe vertikale Temperaturgradienten auftreten.

Die vom Layer k in Höhe H_k über der Öllache emittierte Wärmestrahlung wird teilweise in den darunter liegenden Schichten absorbiert. Diese Absorption hängt hauptsächlich von der Rußkonzentration in den entsprechenden Schichten ab (Faktor A_{ABSORB}). Von der ursprünglich von Layer k emittierten Wärmestrahlung wird damit letztendlich von der Öllachenoberfläche absorbiert:

$$\dot{Q}_{\text{Rad},k} = \Phi_k \cdot \sigma \cdot A_{\text{pan}} \cdot \varepsilon_{\text{fuel}} \cdot \varepsilon_{\text{soot},k} \cdot (1 - A_{\text{ABSORB}}) \cdot (T_k^4 - T_{\text{evap}}^4) \quad (5-4)$$

Φ_k bezeichnet den Sichtfaktor zwischen Öllache und Layer k (Abb. 5-3), $\varepsilon_{\text{fuel}}$ ist die Emissivität und A_{pan} die Oberfläche der Öllache und $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4}$ die Stefan-Boltzmann-Konstante. T_k ist die Gastemperatur (K) in Layer k und T_{evap} die Verdunstungstemperatur (K) des Öls.

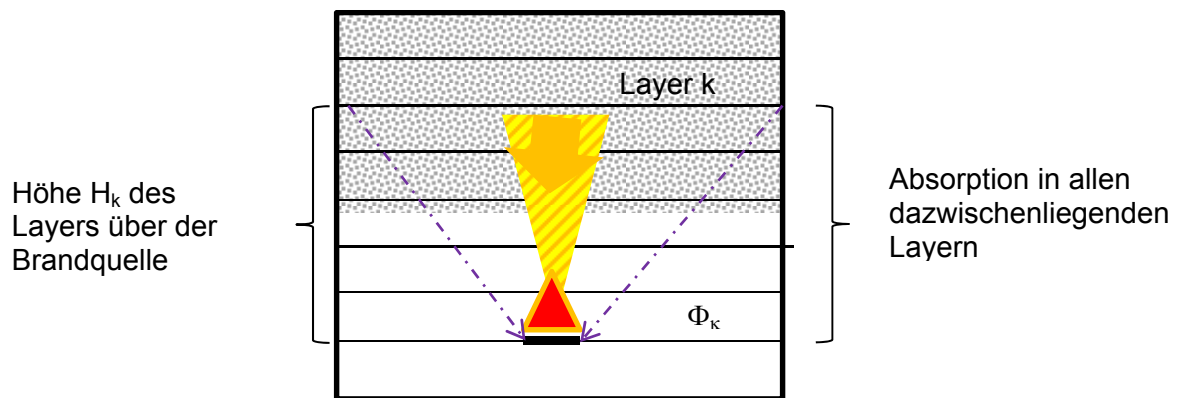


Abb. 5-3 Wärmestrahlung von Layer k auf die Brandgutoberfläche

Die Emissivität $\varepsilon_{\text{soot},k}$ von Layer k hängt von der Rußkonzentration und der Dicke Δh_k des Layers ab. Sie wird in COCOSYS zu jedem Zeitschritt berechnet, indem die Beiträge aller Rußaerosolklassen $i = 1 \dots m$ gemäß /VDI 88/ aufsummiert werden:

$$\varepsilon_{\text{soot},k} = 1 - \exp\left(-a_v \cdot \Delta h_k \cdot \frac{1}{4} \pi \cdot \sum_{i=1}^m (n_{\text{soot},i}^k \cdot d_i^2)\right) \quad (5-5)$$

$n_{\text{soot},i}^k$ ist die Anzahl-Konzentration der Rußpartikel (m^{-3}) in der entsprechenden Größenklasse und d_i der entsprechende geometrische mittlere Durchmesser in Layer k. Der Emissivitätskoeffizient a_v für Kohle und Ascheteilchen liegt zwischen 0,8 und 1 /VDI 88/. Zu Grunde liegt hierbei das Lambert-Beersche Gesetz.

Die gesamte Absorption (bzw. der Transmissionsfaktor $(1 - A_{\text{ABSORB}})$) in den Layern $j = 1 \dots k-1$ zwischen emittierendem Layer k und der Öllache berechnet sich durch:

$$(1 - A_{ABSORB}) = \left[\prod_{j=1}^{k-1} (1 - \varepsilon_{\text{soot},j})^{\frac{l_{H_k}}{H_k}} \right] \quad (5-6)$$

Die mittlere Strahlungslänge $l_{H_k} = \sqrt{H_k^2 + \frac{1}{6}(A_{\text{layer}} + A_{\text{pan}})}$ berücksichtigt, dass ein durchschnittlicher Strahlungspfad von der Unterseite von Layer k auf die Öllache länger als die orthogonale Entfernung zwischen den beiden Ebenen ist (Abb. 5-4).

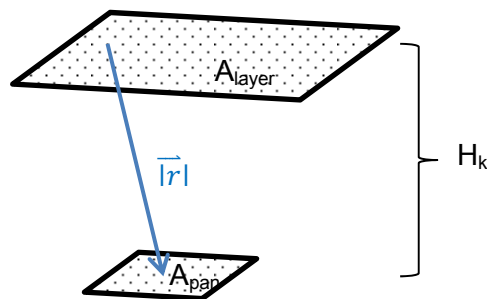


Abb. 5-4 Berechnung der mittleren Strahlungslänge mit Annahme einer Gleichverteilung auf beiden Flächen

Die insgesamt von der Öllache aufgenommene externe Wärmestrahlung $\dot{Q}_{\text{rad,ext}}$ aus der Heißgasschicht ergibt sich durch Addition aller Beiträge $\dot{Q}_{\text{Rad},k}$ aus allen Layern mit $T_k > T_{\text{evap}}$. Die hierdurch zusätzlich pyrolysierte Ölmasse pro Zeiteinheit ist somit:

$$\dot{m}_{\text{PYR,rad}}'' = \frac{\sum_k \dot{Q}_{\text{Rad},k}}{\Delta H_V \cdot A_{\text{pan}}} \quad (5-7)$$

In COCOSYS wird (in Anlehnung an (5-2)) zunächst die Pyrolyserate gemäß Peatross-Beyler (5-3) berechnet, und dann der von der emittierten Wärmestrahlung aus der Heißgasschicht verursachte Term $\dot{m}_{\text{PYR,rad}}''$ hinzuaddiert.

Das beschriebene Modell ermöglicht einen Gleichgewichtszustand:

Wenn der Brand stärker wird (z. B. in der Anfangsphase), steigt auch die Temperatur der Heißgasschicht und somit $\dot{Q}_{\text{rad,ext}}$, was den Brand weiter anfacht. Andererseits sinkt bei steigender Abbrandrate die Sauerstoffkonzentration im Brandraum, was gemäß der Peatross-Beyler-Korrelation (5-3) zu einer Abnahme der Pyrolyserate führt. Aufgrund der Abhängigkeit T^4 in (5-4) steigt die Pyrolyserate aber schneller, als (5-3)

sie reduzieren kann; ferner erfolgt die Reduktion in (5-3) nur bis zu einer Sauerstoffkonzentration von 11 Vol.-%.

Bei steigender Pyrolyserate steigt aber auch die Rußkonzentration in der Heißgasschicht, wodurch die Emissivität (5-5) und daher die Absorption in den zwischen Layer und Öllache befindlichen Schichten gemäß einer Exponentialfunktion zunimmt. Dies beschränkt letztendlich effektiv eine weitere Erhöhung der Pyrolyserate durch gestiegene Temperaturen.

Die hier dargestellte Berechnung der Wärmestrahlung aus der Heißgasschicht hat eine sehr ähnliche funktionale Gestalt wie die von Nasr /NAS 12/ abgeleitete Formel (genauerer Vergleich siehe /PEL 11/).

5.1.1.2 Implementierung in COCOSYS

Um eine Brandsimulation mit von COCOSYS vorausberechneter Pyrolyserate gemäß dem vorgestellten Modell durchzuführen, muss der Nutzer zunächst eine zeitabhängige Pyrolyserate, die den Brandverlauf unter freiem Himmel darstellt, angeben. Diese Rate kann mit Hilfe von (5-1) bestimmt werden.

Die jeweils aktuelle Pyrolyserate $\dot{m}_{PYR,PEA}''$ gemäß Peatross-Beyler (5-3) wird dann zu jedem Zeitschritt berechnet. Als Sauerstoffkonzentration c_{O_2} in der Kaltgasschicht des Brandraumes wird die Größe LOWTEM(TREE) des angegebenen TREE im Brandraum verwendet (zur Konzeption des TREE siehe /KLE 12/). Alternativ kann der User auch zwei ausgewählte Kontrollvolumen im Brandraum angeben. Bei der Wahl dieser Zonen ist zu beachten, dass sie die „frische Sauerstoffzufuhr“, die die Öllache erreicht, repräsentieren sollen.

Aus numerischen Gründen wird zudem die Sauerstoffkonzentration gemäß einer einzugleichen Glättungszeit τ geglättet (empfohlen ist $\tau = 20$ s):

$$\tilde{c}_{O_2} = c_{O_2}^0 + (c_{O_2} - c_{O_2}^0)e^{-\frac{t-t_0}{\tau}} \quad (5-8)$$

$c_{O_2}^0$ ist hierbei die Sauerstoffkonzentration zum vorherigen Zeitschritt t_0 .

Der zusätzliche Beitrag zur Pyrolyserate aufgrund der externen Wärmestrahlung aus der Heißgasschicht $\dot{m}''_{\text{PYR,rad}}$ wird gemäß (5-7) berechnet und ähnlich (5-8) geglättet. Hierfür erwiesen sich Glättungszeiten von 50 – 100 s als sinnvoll. Als Temperatur und Rußkonzentration jedes Layers wird der entsprechende Wert in dem Kontrollvolumen auf der entsprechenden Höhe im angegebenen TREE verwendet. Die gesamte Pyrolyserate ergibt sich dann aus der Summe von $\dot{m}''_{\text{PYR,PEA}}$ und $\dot{m}''_{\text{PYR,rad}}$.

5.1.1.3 Anwendung auf den Versuch PRISME-INTEGRAL-D4

Eine detaillierte Darstellung der Versuche OECD-PRISME sowie deren Nachrechnungen mit COCOSYS findet sich in /KLE 10/, die ausführliche Validierung des in den vorangegangenen Abschnitten dargestellten Pyrolysemodells anhand von mehreren PRISME-Versuchen in /PEL 12/. In diesem Abschnitt werden nur kurz die Ergebnisse bezüglich des Versuchs PRISME-INTEGRAL-D4 vorgestellt.

Der Versuch PRISME-INTEGRAL-D4 wurde in den drei aneinandergrenzenden Räumen (Volumen jeweils $5 \times 6 \times 4 \text{ m}^3$) des Erdgeschosses und dem Korridor (Volumen $15,6 \times 2,5 \times 4 \text{ m}^3$) der DIVA-Anlage (Abb. 5-5) durchgeführt /PRE 10/. In der Mitte des Brandraumes (Raum 2) befand sich auf 0,4 m Höhe eine 1 m^2 große Schale mit 52 kg Öl (Typ: TPH, ähnlich Dodekan). Die Wände der Räume sind aus 30 cm dickem Beton; der Brandraum, Raum 3 sowie die Decken von Raum 1 und dem Korridor waren zudem mit Isolierwolle bedeckt. Die Räume waren durch offene Türen ($2,1 \times 0,8 \text{ m}^2$) verbunden. Die Ventilation erfolgte durch Frischluftzufuhr in Raum 1 und dem Korridor, während die Abluft aus Raum 3 abgesaugt wurde (Abb. 5-6).

Der im Versuch beobachtete Brand erwies sich als stärker, als allein von der Peatross-Beyler-Korrelation vorhergesagt (Abb. 5-2). Hieran lässt sich also die Bedeutung der von der Strahlung aus der Heißgasschicht zusätzlich induzierten Pyrolyse darstellen.

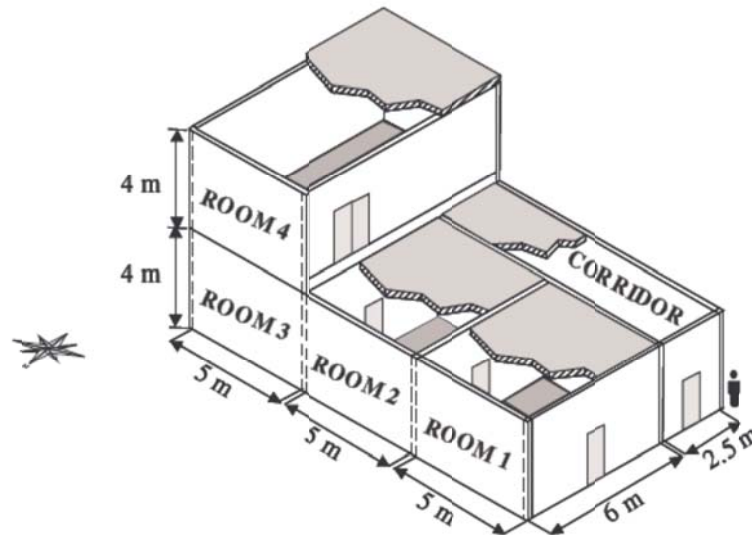


Abb. 5-5 DIVA-Anlage in Cadarache (links) /AUD 09/

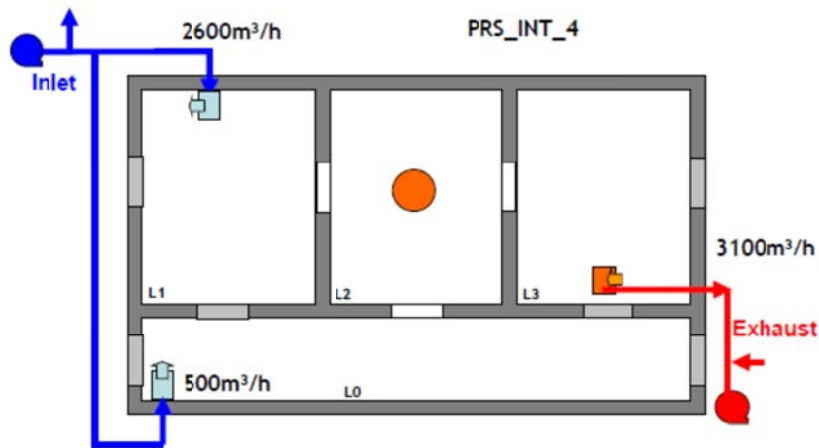


Figure 1 : Configuration of the fire scenario

Abb. 5-6 Ventilationskonfiguration von Versuch PRISME-INTEGRAL D4 (rechts) /PRE 10/

Die Räume sind in COCOSYS in insgesamt 670 Kontrollvolumen in 10 vertikale Layer unterteilt. Das Ventilationssystem der Anlage wird mitsimuliert /KLE 10/. Die für die Berechnung von $\dot{m}''_{PYR,rad}$ wichtigen Materialeigenschaften sind in Tab. 5-1 angegeben. Die Rußausbeute der Verbrennung muss ebenfalls vom User tabellarisch in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration angegeben werden. In der dargestellten Rechnung wurden Rußausbeuten vorgegeben, die sich in vorangegangenen Validierungen an anderen PRISME Versuchen mit vorgegebener Pyrolyserate als zutreffend erwiesen hatten. Es wird eine hohe Rußausbeute für die Anfangsphase (in der die Verbren-

nung noch nicht so effektiv ist) und eine geringere für die Gleichgewichtsphase verwendet.

Tab. 5-1 Materialeigenschaften für TPH, wie sie in COCOSYS benutzt werden

Eingabegröße	Wert
Verdunstungstemperatur des Öls T_{evap}	200 °C
Emissivität ε_{TPH}	0,95
Koeffizient zur Berechnung der Emissivität von Ruß a_v	0,9

Die vom User vorgegebene Pyrolyserate der Verbrennung unter freiem Himmel ist in Abb. 5-7 in orange dargestellt. Die von COCOSYS für das Szenario von LEAK-D1 berechnete Pyrolyserate (rot) ist in guter Übereinstimmung mit der gemessenen Pyrolyserate (schwarz). Der Beitrag durch die Wärmestrahlung (blau) beträgt fast 30%. In der Anfangsphase überschreitet die gemessene Pyrolyserate aufgrund des zusätzlichen Strahlungsanteils sogar die Rate, welche unter freiem Himmel gemessen wurde – ein Effekt, der durch COCOSYS reproduziert wurde. Kurz vor Brandende wurde eine plötzliche Verstärkung des Brandes gemessen. Vermutlich war zu diesem Zeitpunkt die stählerne Brandschale so heiß geworden, dass die letzte Ölpfütze spontan komplett verdampfen konnte.

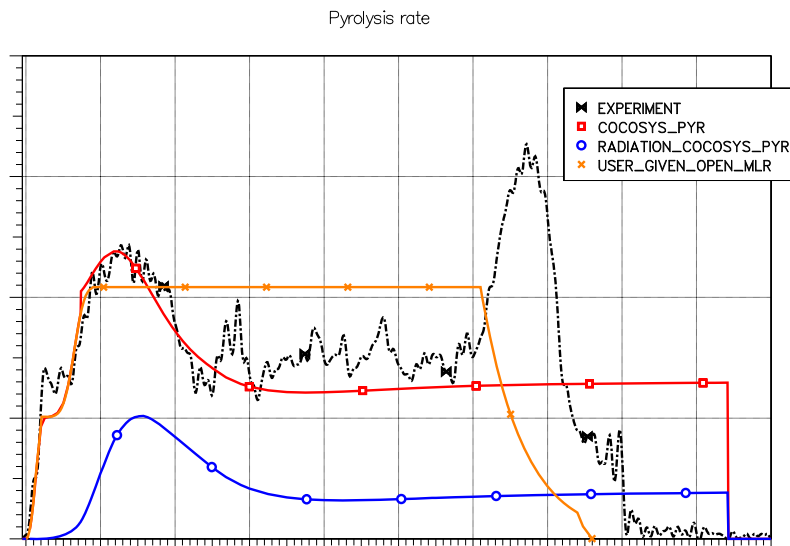


Abb. 5-7 Pyrolyserate in INTEGRAL-D4 in Abhängigkeit von der Zeit

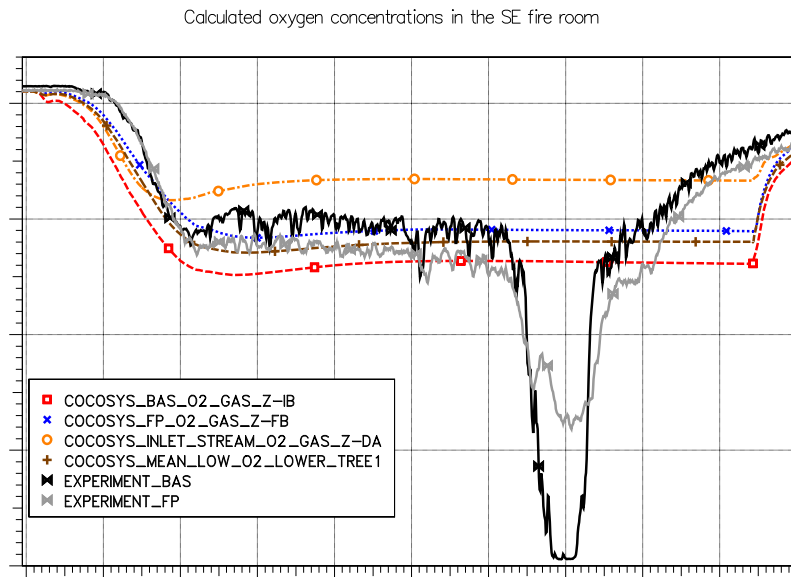


Abb. 5-8 Sauerstoffkonzentration in der Kaltgasschicht in Abhängigkeit der Zeit

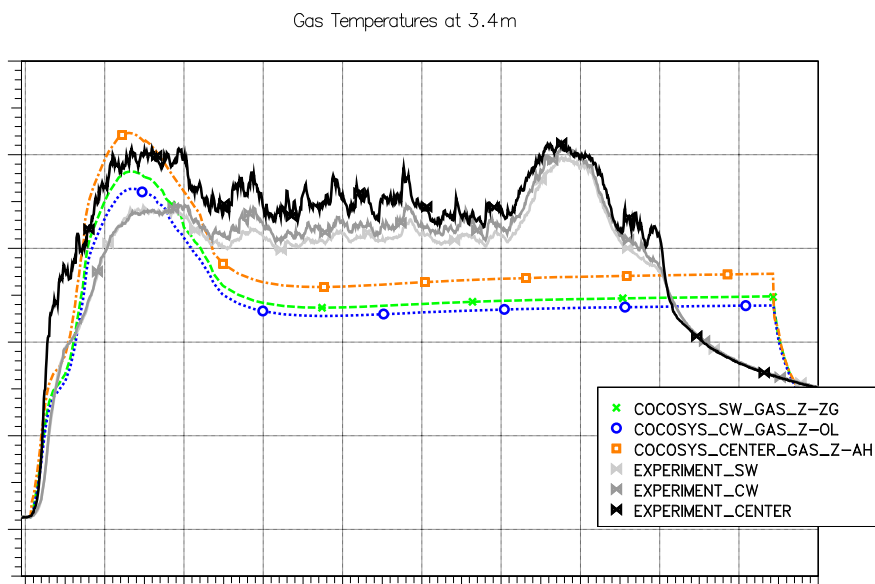


Abb. 5-9 Temperaturen in der Heißgasschicht (3,4 m) in Abhängigkeit der Zeit

Abb. 5-8 und Abb. 5-9 zeigen die gemessene und berechnete Sauerstoffkonzentration an verschiedenen Punkten in der Kaltgasschicht bzw. die Temperaturen in der Heißgasschicht. Die Übereinstimmung ist recht gut, auch wenn COCOSYS die Temperaturen deutlich unterschätzt (ist bei den anderen Versuchen üblicherweise nicht der Fall /PEL 12/).

Die Rußausbeute ist ein Eingabeparameter, der mit hohen Unsicherheiten verknüpft ist. Das Modell zur Berechnung der Pyrolyserate erweist sich jedoch erstaunlich insensitiv hierauf (Abb. 5-10 und Abb. 5-11): Neben der bisher dargestellten Rechnung

(Rußkonzentration in Abb. 5-10 mit offenen Kreisen dargestellt) wurde eine weitere Rechnung mit höherer Rußausbeute durchgeführt (gefüllte Quadrate in Abb. 5-10). Die sich jeweils ergebenden Pyrolyseraten (vergleiche gefüllte Quadrate mit offenen Kreisen in Abb. 5-11) differieren nur marginal voneinander. Selbstverständlich hätte aber eine Änderung der Rußkonzentration von mehreren Größenordnungen jedoch eine deutlichere Auswirkung auf die berechneten Pyrolyseraten.

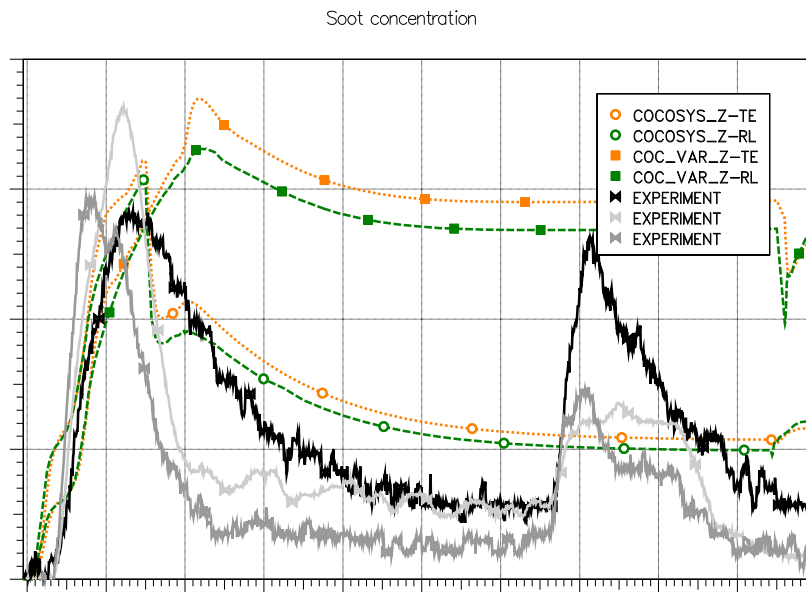


Abb. 5-10 Zwei Rechnungen mit unterschiedlicher Rußkonzentration

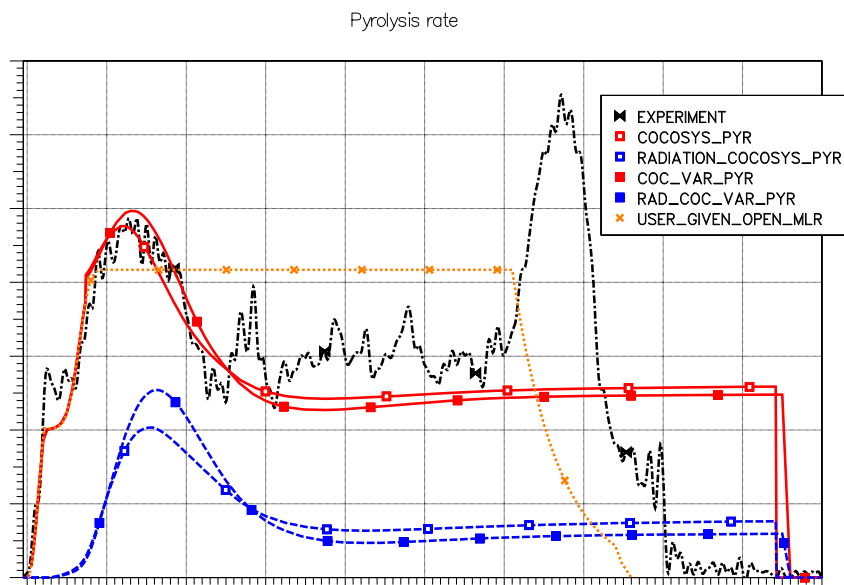


Abb. 5-11 Pyrolyseraten für die zwei Rußkonzentrationen aus Abb. 5-10

Mit dem neu implementierten Modell zur Vorausberechnung von Pyrolyseraten von Flüssigkeitsbränden in geschlossenen Räumen steht in COCOSYS nun ein leistungsstarkes Modell für Anwendungs- und Auslegungsrechnungen zur Verfügung, mit dem zumindest die ungefähre Größenordnung des zu erwartenden Brandes verlässlich abgeschätzt werden kann.

5.1.2 Rekombinatormodelle

5.1.2.1 AREVA Rekombinatoren

Das ursprünglich in COCOSYS verwendete Modell für Rekombinatoren der Firma Siemens (heute AREVA) stammt bereits aus dem Vorgängercode RALOC. Zur Berechnung der Reaktionsraten an den katalytischen Platten benutzte es einen Arrheniusansatz. Dieses Modell war mit COCOSYS bisher an dem Versuch Gx-4 im Battelle Model Containment erfolgreich validiert worden.

Nachrechnungen der neueren HR-Versuche in der THAI-Anlage bei Becker Technologies aus dem OECD THAI Vorhaben zeigen hingegen bei Verwendung des ursprünglichen Arrheniusmodells eine teilweise starke Überschätzung der Abbauraten (Arbeiten aus Validierungsvorhaben RS1170 /KLE 10a/). Aus Arbeiten des Forschungszentrums Jülich /BÖH 06, DRI 06/ war bekannt, dass die Abbauraten in Rekombinatoren kein Arrheniusverhalten aufweist. Basierend auf diesen Erkenntnissen wird die Abbauleistung durch die Diffusion des Wasserstoffs an die katalytischen Platten begrenzt.

Aufgrund der schlechten Nachrechnungen der HR-Versuche in dem Validierungsvorhaben (siehe Abb. 5-12, da die Daten der OECD-THAI-Versuche noch vertraulich behandelt werden, sind keine Werte auf der y-Achse eingetragen.) ist der bisherige Arrheniusansatz in dem COCOSYS-Modell daher durch einen diffusionskontrollierten Ansatz ersetzt worden. Diese Modellumstellung geht weit über die im Arbeitsplan vorgesehene Modellanpassung für Sauerstoffarmut hinaus. Bedingungen mit Sauerstoffarmut werden von dem neuen Modell auch berücksichtigt, indem es Diffusionsraten für Wasserstoff, Sauerstoff und Kohlenmonoxid berechnet. Ist die Diffusionsrate von Sauerstoff kleiner als die für Wasserstoff, ist auch der berechnete Wasserstoffumsatz geringer.

Die Abbauraten eines Rekombinators sind an den REKO-3-Experimenten des FZJ in Abhängigkeit der Plattenhöhe überprüft worden. Ausgewählte aktuelle THAI HR-Versuche sind mit dem neuen Modell jetzt gut nachgerechnet worden (siehe Abb. 5-13), wobei die thermodynamischen Randbedingungen als Tabellenwerte aufbauend auf den Versuchsdaten für das Rekombinatoremodell vorgegeben wurden. Dort wurden halbe Rekombinatoren des kleinen Typs FR-380 eingesetzt. Auch die Anwendung auf den alten Gx4-Versuch liefert plausible Ergebnisse (Abb. 5-14).

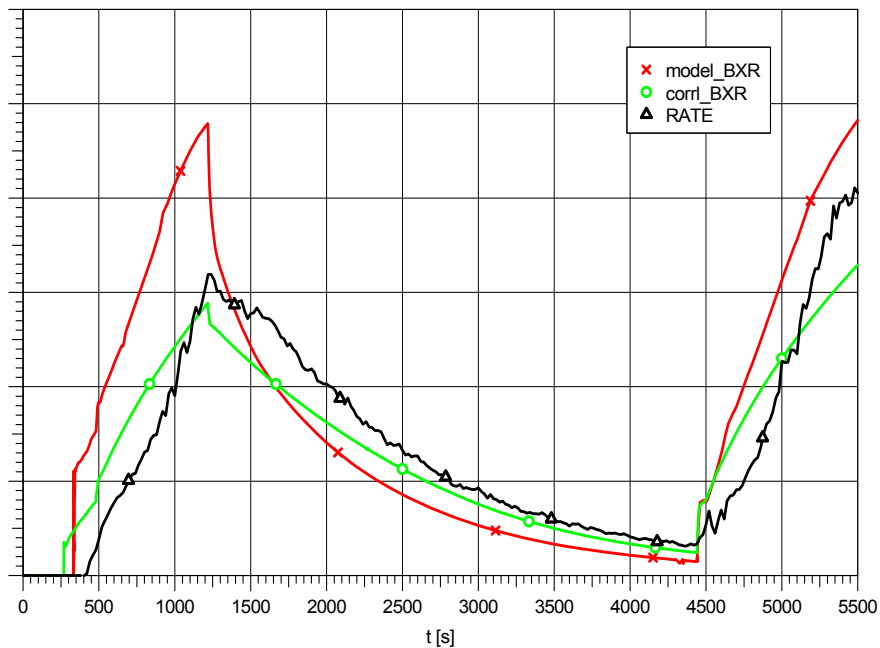


Abb. 5-12 Rekombinationsrate THAI HR-2, Vergleich mit altem Reko-Modell der GRS (model_BXR) und der Gleichung von AREVA (corr_BXR)

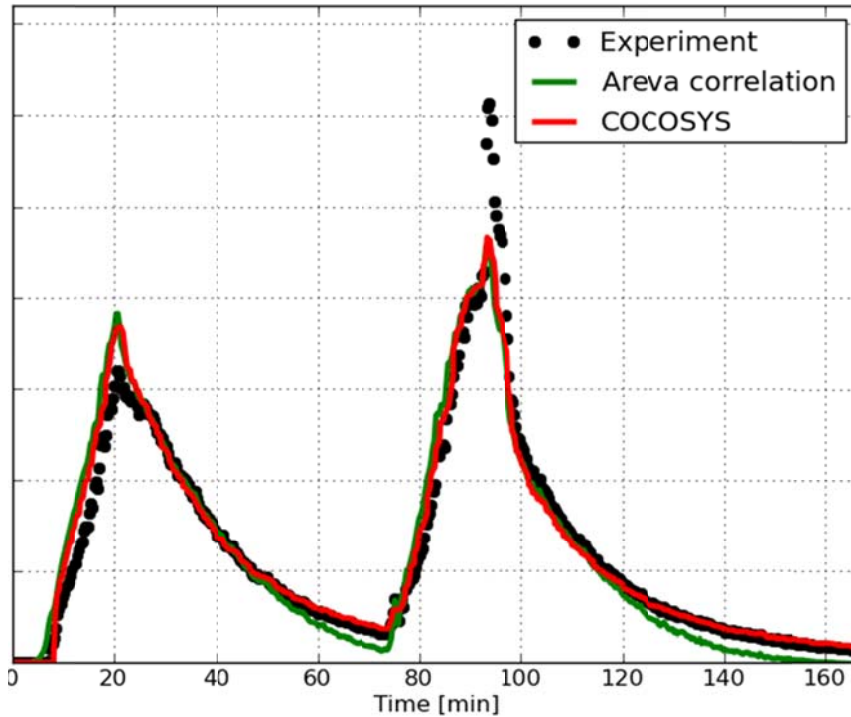


Abb. 5-13 Rekombinationsrate THAI HR-2, Vergleich mit neuem Reko-Modell der GRS (COCOSYS) und der Gleichung von AREVA (AREVA correlation)

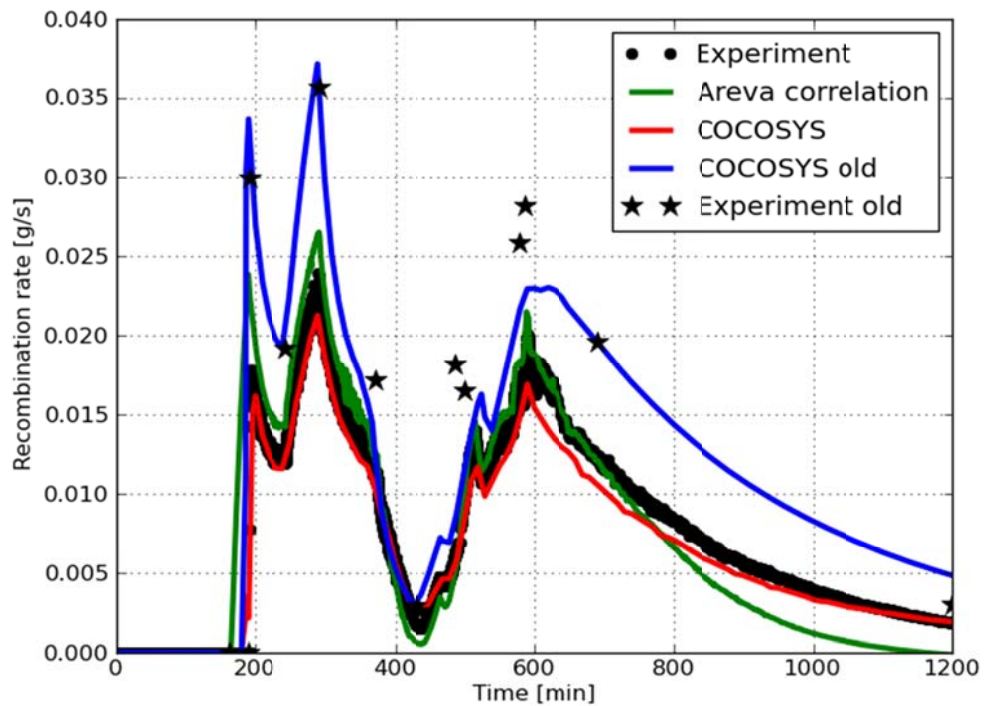


Abb. 5-14 Rekombinationsrate Gx-4, Vergleich mit altem (COCOSYS old) und neuem Reko-Modell der GRS (COCOSYS) und der Gleichung von AREVA (AREVA correlation)

Als Modellunsicherheit bleibt die Skalierung auf die Rekombinatorgrößen, die in Containments eingebaut (z.B. FR-1500T) sind. Ein Vergleich des Modells mit der experimentell bei AREVA gewonnenen Korrelation für die beiden Rekombinatortypen FR-380half (aus THAI Experiment) und FR-1500T (größer Typ in realen Anlagen) lässt Rückschlüsse über das Modell bei einer Skalierung auf größere Rekombinatoren zu. Der Vergleich zwischen dem Modell und der AREVA-Korrelation ist in Abb. 5-15) als relative Abweichung des Modells von der AREVA-Korrelation in Abhängigkeit der Molaren Dichte von Wasserstoff und dem Gesamtdruck dargestellt. Im Bereich kleiner molarer Dichten liefert das Modell höhere Abbauraten als die AREVA-Korrelation. In diesem Bereich beträgt die relative Abweichung bis zu 120 %. Diese Unterschiede bei niedriger molarer Dichte von Wasserstoff liegen in einem Bereich, in dem auch Experimente sehr unterschiedliche Ergebnisse für die Abbauraten ergeben. In dem Bereich mittlerer Konzentrationen ist für den FR-380half aus den THAI-Experimenten die Abweichung sehr gering, wohingegen für das große Modell FR-1500T Abweichungen bis etwa -40 % erzielt werden. In diesem Bereich berechnet die AREVA-Korrelation für den FR-1500T also größere Abbauraten als das Modell. Im Bereich hoher molarer Wasserdichte bei niedrigem Druck liegt die Rekombinationsrate des Modells deutlich über der AREVA-Korrelation. Dieses resultiert auch daher, dass in diesem Bereich die AREVA-Korrelation auf eine maximale Abbauraten begrenzt wird, die 8 Vol.% H₂-Eingangskonzentration entspricht. Eine solche Begrenzung ist in dem Detailmodell nicht vorhanden, da eine solche Begrenzung in den HR-Versuchen nicht ersichtlich ist. In diesem Bereich liegen auch bereits deutlich zündfähige Gemische vor, die beim Einsatz von Rekombinatoren nicht erreicht werden sollten.

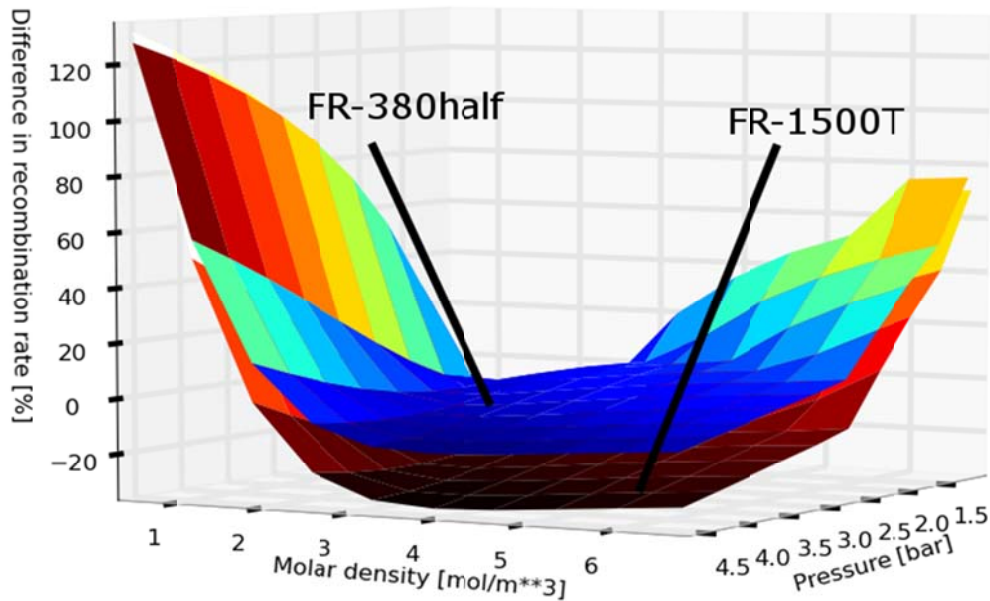


Abb. 5-15 Abweichung – Reko-Detailmodell – AREVA-Korrelation - für FR-380half und FR-1500T

Das Modell liefert auch Ergebnisse, um die Abbauleistung von Kohlenmonoxid (Freisetzung aus Beton-Schmelze-Wechselwirkung) zu berechnen, allerdings ist eine experimentelle Überprüfung dieser Werte nicht möglich, da der GRS keine Experimente mit Kohlenmonoxid vorliegen.

Mögliche Zündungen eines Gasmisches, wie sie in den THAI-Experimenten bei H_2 -Konzentration um 8 – 10 Vol.% beobachtet wurden, werden von dem aktuellen Modell als auch der AREVA Gleichung nicht berücksichtigt.

Um den Rechenaufwand in Anlagenrechnungen zu minimieren, ist zusätzlich zum Detailmodell eine einfache, schnell laufende Korrelation zur Beschreibung des neuen diffusionskontrollierten Rekombinatormodells entwickelt worden.

Die Arbeiten und weitere Details über die Modellentwicklung für AREVA-Reko's und die Anwendung auf ausgewählte HR-Versuche sind in einem GRS-A-Bericht festgehalten worden /NOW 10/.

5.1.2.2 AECL Rekombinatoren

In deutschen KKW sind überwiegend Rekombinatoren des AREVA-Typs installiert. Darüber hinaus werden aber auch Rekombinatoren der Firmen NIS und AECL in KKW eingesetzt. In den OECD-THAI Experimenten der HR-Reihe sind auch Versuche mit Rekombinatoren der NIS Ingenieurgesellschaft mbH und der Firma AECL durchgeführt worden. Die NIS-Rekombinatoren verwenden anstelle von beschichteten Platten Kassetten gefüllt von mit Palladium beschichteten Kügelchen, durch die die wasserstoffhaltige Atmosphäre durchströmt. Daher ist eine Übertragung des oben beschriebenen Modells auf diesen Rekombinatortyp nicht möglich. In der Literatur ist ein einfaches Modell von /FIS 95/ für derartige Rekombinatoren verfügbar, das an Tests validiert wurde /BLA 99/.

Die AECL-Rekombinatoren verwenden auch Platin-beschichtete Platten als Rekombinationsflächen und sind im Aufbau ähnlich. Damit weisen sie dasselbe Funktionsprinzip wie die AREVA-Rekombinatoren auf und unterscheiden sich nur in der Geometrie. Daher ist das für die AREVA-Rekombinatoren erstellte und erfolgreich validierte Modell auch auf die AECL-Rekombinatoren angewendet worden. Abb. 5-16 zeigt einen Vergleich der gemessenen Rekombinationsrate im Versuch THAI HR-22 mit dem COCOSYS-Modell. Dieses ist ein Versuch bei 1,5 bar und 61,5 Vol.-% Wasserdampf, womit beinahe gesättigte Bedingungen herrschen. Da die Daten der OECD-THAI-Versuche noch vertraulich behandelt werden, sind keine Werte auf der y-Achse eingetragen.

Während der ersten Einspeisephase von Wasserstoff bis 27 min unterschätzt COCOSYS die Rekombinationsrate etwas, während in der nachfolgenden Abbauphase bis 60 min die Rekombinationsrate leicht überschätzt wird. Danach wird in dem Experiment eine Abnahme der Rekombinationsrate beobachtet, die nicht vom Modell berechnet wird. Zu diesem Zeitpunkt ist die Wasserstoffkonzentration im Bereich unter 2 Vol.-%. Sauerstoffarmut liegt nicht vor. Das Abnehmen der Rekombinationsrate erfolgt durch eine Abnahme der Durchtrittsgeschwindigkeit durch den Rekombinator. Nach 131 min erfolgt die zweite Einspeisephase von Wasserstoff. Der Anstieg der Rekombinationsrate wird sehr gut wiedergegeben. Nach etwa 122 min ist ein Abnehmen der Rekombinationsrate aufgrund von Sauerstoffarmut zu erkennen. Dieser Zeitpunkt wird von dem Rekombinationsmodell sehr gut wiedergegeben. In der Folge wird die Rekombination etwas überschätzt.

Die Versuche mit den AECL-Rekombinatoren zeigen eine etwas andere Charakteristik während der erstmaligen Einspeisung von Wasserstoff als die AREVA-Rekombinatoren. Während der Einspeisephase bis 27 min werden die Rekombinationsraten eher unterschätzt, während sie bei den AREVA-Versuchen systematisch überschätzt worden sind. Generell wird die Abbauleistung auch für die AECL-Rekombinatoren gut berechnet. Sauerstoffarmut wird ebenfalls gut wiedergegeben. Der Zeitpunkt des Eintritts stimmt mit dem Experiment überein. Danach werden die Rekombinationsraten wie bei den AREVA-Modellen leicht überschätzt.

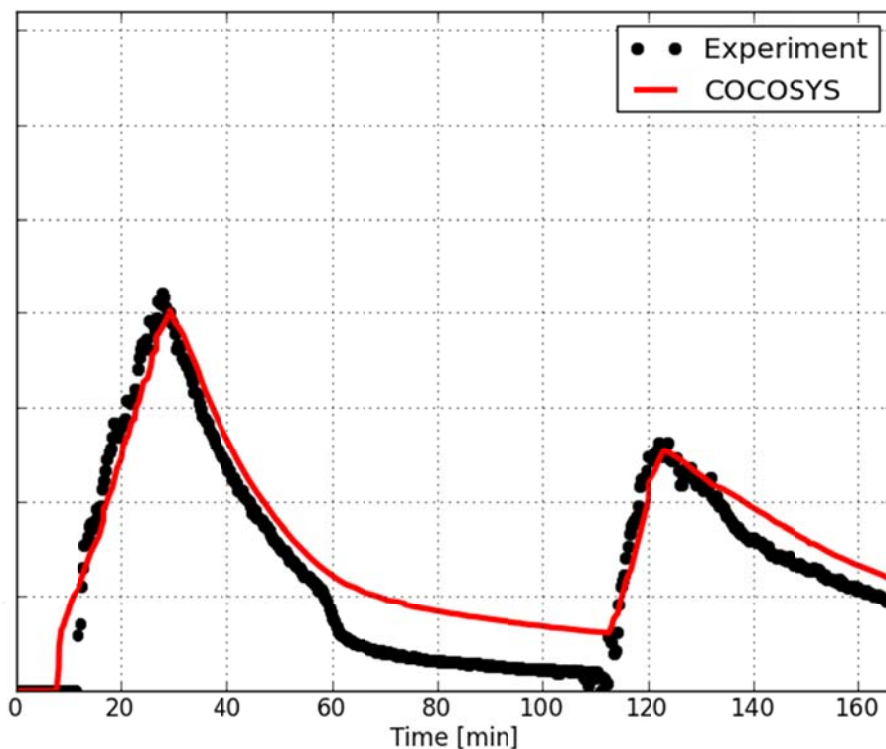


Abb. 5-16 Rekombinationsrate im OECD-THAI-Versuch HR-22

Zusammenfassend zeigen die Rechnungen, dass das für AREVA-Rekombinatoren entwickelte Modell genauso gut auch für AECL-Rekombinatoren anwendbar ist. Eine Überprüfung für andere Rekombinatorgrößen, als die im Versuch verwendete, konnte nicht erfolgen.

5.1.2.3 Zündung an Rekombinatoren

In der Vergangenheit wurde vielfach diskutiert, inwieweit Rekombinatoren selbst zum Zünder für Wasserstoffgemische in Ihrer Umgebung werden können und ob diese dadurch ein erhöhtes Sicherheitsrisiko darstellen. Die HR-Experimente im OECD-THAI

Projekt haben sich diesem Sachverhalt ausführlich gewidmet und experimentell untersucht, ob und unter welchen Bedingungen Rekombinatoren der Hersteller AREVA, NIS und AECL die Gasgemische im THAI-Behälter zünden können /KAN 10/. In allen Fällen wurden H₂-Verbrennungsvorgänge bei höheren H₂-Konzentrationen ausgelöst, wenn keine Dampf inertisierung vorliegt. Eine detaillierte Erklärung für die Zündorte oder –mechanismen war für die Rekombinatoren von AECL und AREVA nicht möglich.

Bei IRSN wird der detaillierte CFD-Code SPARK (Simulation for Passiv Autocatalytic Recombiners' Risk) entwickelt, der detailliert auch chemische Reaktionen berücksichtigt. Von Meynet /MEY 11c/ wird untersucht unter welchen Bedingungen Wasserstoff in den Rekombinatoren zündet unter Variation der drei wichtigsten Einflussgrößen Wasserdampf, Druck und Temperatur. Meynet zeigt auch Vergleiche zwischen mit SPARK berechneten Zündkriterien und experimentellen Ergebnissen. Diese Ergebnisse könnten in COCOSYS verwendet werden, um Zündkriterien festzulegen. Dazu müssten die Zündpunkte in Abhängigkeit der untersuchten Einflussfaktoren Wasserdampf, Druck und Temperatur jeweils in Dreistoffdiagramme eingetragen werden. Bei dieser Vorgehensweise handelt es sich nicht um eine direkte Modellierung in COCOSYS, sondern um eine Übertragung aus experimentellen Daten bzw. Daten aus einem CFD-Code unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen in eine COCOSYS-Korrelation. Eine direkte Modellierung in COCOSYS ist aufgrund des hohen Aufwandes zurzeit nicht vorgesehen.

5.1.2.4 Zusammenfassung

Im Folgenden werden die Arbeiten zusammengefasst.

- **Analyse der vorhandenen Experimente:** Die HR-Versuche der THAI-OECD-Versuchsreihe stellen eine sehr gute Verbesserung der Datenbasis für Rekombinatoren dar und sind ausgiebig genutzt worden, um das Rekombinatormodell auf die neue Reaktionskinetik umzustellen und zu validieren.
- **Ergänzung des detaillierten Rekombinator-Modells bezüglich Sauerstoffarmut:** Durch die Umstellung des Rekombinatormodells auf eine diffusionskontrollierte Reaktionskinetik wird im Modell auch Sauerstoffarmut mit berücksichtigt. Weitere Arbeiten waren nicht erforderlich
- **Untersuchung, inwieweit Zündung an Rekombinatoren modellmäßig erfassbar sind:** Aufbauend auf den Arbeiten von IRSN /MEY 11c/ könnten verschiedene

Dreistoffdiagramme in Abhängigkeit von Wasserdampf, Druck und Temperatur erstellt und innerhalb von COCOSYS als Zündkriterien herangezogen werden. Eine mechanistische Beschreibung erscheint nicht sinnvoll.

- **Aktualisierung der GRS-Korrelation für AREVA-Rekombinatoren und Entwicklung von Korrelationen für andere Rekombinatortypen, z. B. das kanadische Modell der Firma AECL:** Aufbauend auf dem neuen Rekombinatormodell sind Korrelationen für die AREVA- (Siemens-) Rekombinatoren hergeleitet worden. Diese sind aufgrund der ähnlichen Geometrie auch für AECL-Rekombinatoren nutzbar. Für die Rekombinatoren der Firma NIS existiert in COCOSYS kein detailliertes Modell. Bei Bedarf könnte ein aus der Literatur /FIS 95/ bekanntes Modell implementiert werden.
- **Durchführung von Testrechnungen anhand der Rekombinatorversuche in der THAI-Anlage:** Das neue Modell ist anhand der HR-Versuche getestet worden. Dabei sind meistens die thermodynamischen Randbedingungen als Tabellenwerte aufbauend auf den Versuchsdaten für das Rekombinatormodell vorgegeben worden und der Rekombinator ist alleine simuliert worden.

5.1.3 H₂-Verbrennung

Das in Abschnitt 4.3 vorgestellte FRONT-Modell ist in gleicher Form in COCOSYS implementiert worden. In allen Stadien der Entwicklung sind mit dem in Kap. 4.3.2 skizzierten Modellsystem Vergleiche zwischen ASTEC und COCOSYS durchgeführt worden, um zu garantieren, dass die Ergebnisse äquivalent sind, s. a. /ECK 11a/. Neben den für ASTEC gültigen Möglichkeiten kann das FRONT-Modell in COCOSYS auch auf den Zonentyp DRASYS (für Druckabbausysteme) angewendet werden.

5.1.4 Nasse Resuspension

Unter Entrainment oder Tropfenmitriss versteht man die mechanische Freisetzung von Tropfen aus Flüssigkeiten, die von Gasen oder Dämpfen durchströmt werden. Im Falle einer Einzelblasenströmung werden die an der Flüssigkeitsoberfläche beim Zerplatzen der Gasblasen gebildeten Tropfen mit den austretenden Gasen und Dämpfen in den darüber liegenden Gasraum transportiert. Größere Tropfen fallen in die Flüssigkeit zurück, während die kleinen trocknen und der Feststoffanteil mit den Spaltprodukten als Aerosol im luftgetragenen Zustand bleibt. Vor allem in der späten Unfallphase, wenn

keine Spaltprodukt-Freisetzung aus dem geschmolzenen Kern mehr erfolgt und die Aerosolkonzentration im Containment aufgrund natürlicher Ablagerungsprozesse schon stark reduziert ist, kann das die Resuspension wegen des teilweise sehr langen Freisetzungszeitraumes u. U. einen signifikanten Beitrag zum radioaktiven Quellterm bei schweren Störfällen leisten. Mögliche Szenarien beinhalten die Freisetzung aus dem Sumpf beim DWR, die Wiederfreisetzung beim "Pool-Scrubbing" in der Kondensationskammer beim SWR; Freisetzung aufgrund von Schmelze-Beton-Wechselwirkung sowie aus dem Wasserpool über einer Kernschmelze, z. B. EPR).

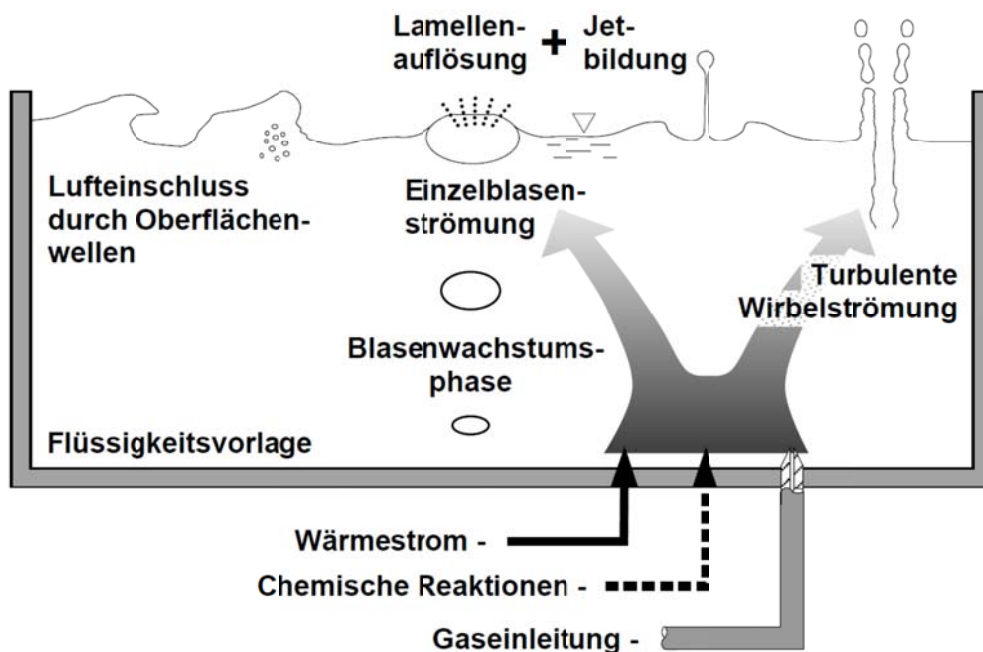


Abb. 5-17 Blasen- und Aerosolbildungsmechanismen in Flüssigkeitsvorlagen (nicht maßstäblich).

In den Jahren 2005 und 2006 wurden die THAI-Versuche TH14 bis TH17 mit löslichem Material durchgeführt /KAN 07/. Vom Lehrstuhl Energiesysteme und Energiewirtschaft an der Ruhr-Universität in Bochum (LEE-RUB) wurde anhand der Messwerte eine Korrelation für den Tropfendurchmesser und die freigesetzte Tropfenvolumenrate als Funktion der Leerrohrgeschwindigkeit entwickelt (zitiert in /KLE 10a/). Zielsetzung der Arbeiten im Projekt war es, diese Korrelation in COCOSYS zu implementieren.

Die nasse Resuspension mit unlöslichem Aerosolmaterial unterscheidet sich von der mit löslichem Material vor allem durch einen höheren Freisetzungsanteil und durch größere Partikel. Bei löslichem Material ist die Größe der eingetrockneten Partikel durch die Konzentration im Tropfen bestimmt. Bei unlöslichem Material hängt dagegen

die Größe der Partikel von der Partikelgröße des suspendierten Aerosols (Hydrosols) ab. Sind die Partikel größer als die Tropfen, werden sie gar nicht erst freigesetzt. Kleine unlösliche Partikel wiederum können wegen der Anreicherung an der Sumpfoberfläche („Aufschwimmen“) überproportional stark freigesetzt werden.

In drei neuen Resuspensionsversuchen soll im Sommer 2012 unter vergleichbaren thermohydraulischen Bedingungen wie für TH14 bis TH17 die Resuspension von unlöslichen Aerosolen untersucht werden. Dazu war vorgesehen, im Projekt Auslegungsrechnungen mit COCOSYS durchzuführen /WEB 12/. Die in COCOSYS verfügbare Korrelation für das Entrainment löslichen Materials /DAP 09/ konnte hier nicht eingesetzt werden, da sich die Freisetzungprozesse für lösliches und unlösliches Material sehr voneinander unterscheiden. Die zu erwartenden Resuspensionsanteile wurden daher anhand der REST-Versuche (REsuspension Source Term) abgeschätzt /BUN 92/. In der COCOSYS-Rechnung wird eine Partikelgröße von 1,0 µm angenommen. Die wichtigsten Daten für die Auslegungsrechnung sind in Tab. 5-2 zusammengestellt.

Tab. 5-2 Daten der Auslegungsrechnung

Parameter	THAI TH14 bis TH17 Lösliches Material	COCOSYS-Rechnung Unlösliches Material
Leerrohrgeschwindigkeit (m/s)	0,018 bis 0,075	0,01 bis 0,1
Tröpfchen-Entrainment bzw. Resuspensionsanteil (RA)	2,0E-5 bis 3,3E-4 zurückgerechnet	1,0E-3 bis 4,5E-3 RA aus REST-Versuchen
Tröpfchengröße MMD (µm)	0,35 bis 0,82 zurückgerechnet	---
Trockene Partikelgröße MMD (µm)	0,05 bis 0,1 gemessen	1,0 vorgegeben
Aerosolkonzentration (g/l)	1,7E-8 bis 4,1E-6	1,5E-6 bis 2,5E-5

Ziel der Auslegungsrechnungen war vor allem, die Verhältnisse im Gasraum über dem Sumpf zu untersuchen und gegebenenfalls zu optimieren. Einerseits sollten möglichst realitätsnahe thermohydraulische Bedingungen (Temperaturen, Feuchte, Luftwechsel) eingestellt werden, andererseits sollten Nebeneffekte, die die Auswertung erschweren (Agglomeration, Ablagerung), vermeiden werden.

Wie die COCOSYS-Ergebnisse zeigen, ist die Aerosolkonzentration im Behälter weitgehend homogen (Abb. 5-18). Sie ist auch um bis zu 2 Größenordnungen höher (maximal 2,5E-5 g/l) als in den THAI-Versuchen mit löslichem Material. Ein Grund dafür

sind die jetzt größeren Partikel. Nur bei geringen Leerrohrgeschwindigkeiten (0,01 und 0,04 m/s) macht die Ablagerung einen nennenswerten Anteil am eingespeisten Aerosol aus (max. 50 %) und muss bei der Auswertung berücksichtigt werden. Bei hohen Leerrohrgeschwindigkeiten ist die Ablagerung wegen des größeren Luftwechsels im Behälter deutlich geringer.

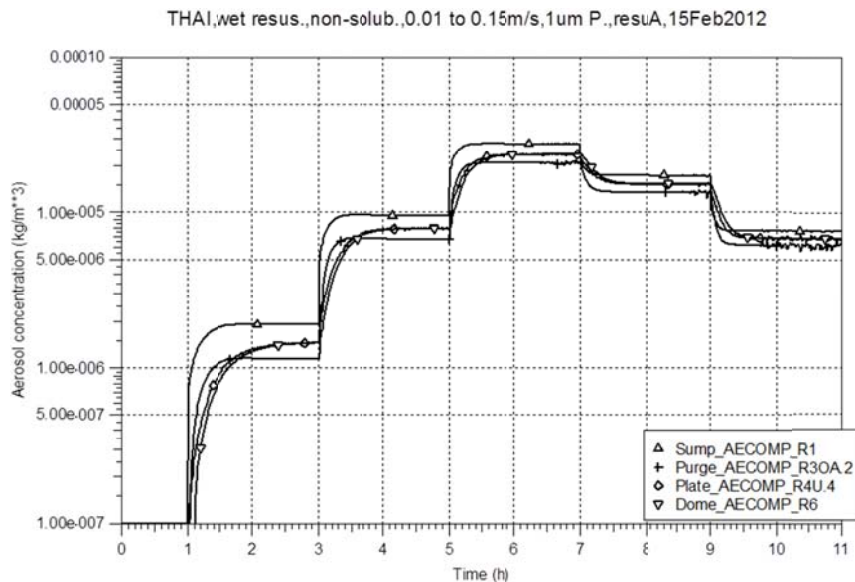


Abb. 5-18 Aerosolkonzentration in verschiedenen Raumbereichen

Anhand der Voraussrechnung wurden für die Auslegung der Versuche die folgenden Empfehlungen gemacht:

- Das Entrainment sollte stufenweise bei Leerrohrgeschwindigkeiten zwischen 0,01 und 0,2 m/s gemessen werden. Der Bereich ist größer als in TH14 bis TH17. Dort lag die Geschwindigkeit zwischen 0,018 und 0,075 m/s.
- Bei der Resuspension löslichen Materials sind vor allem die kleinen Filmtropfen wirksam. In THAI-TH14 bis -TH17 lag die mittlere Tröpfchengröße zwischen 0,3 μm und 0,8 μm . Die größeren Jet-Tropfen spielten keine Rolle. Ob dies auch für unlösliche Partikel gilt, ist unklar. Es wird daher vorgeschlagen, beim unlöslichen Aerosol zwei Partikelgrößen zu verwenden.
- Nach Möglichkeit sollte keine Zusatzluft im Dampfstrom durch den Sumpf verwendet werden, da diese das Tröpfchen-Entrainment negativ beeinflusst. In den THAI-Versuchen mit löslichen Aerosolen war mit Zusatzluft das Entrainment geringer als ohne, was auf eine höhere Feuchte im Gasraum und ein langsames Trocknen der Tröpfchen zurückgeführt wurde.

- Für die Leerrohrgeschwindigkeiten $\geq 0,1$ m/s liegt die relative Feuchte der Behälteratmosphäre über 90 %. Im Hinblick auf ein schnelles Trocknen der Tröpfchen zur Vermeidung von Ablagerungsverlusten muss die Feuchte gesenkt werden (z. B. Behältermantelheizung).

Diese Empfehlungen wurden mit den Experimentatoren von Becker Technologies diskutiert und sollen, soweit dies technisch möglich ist, umgesetzt werden. Da LEE-RUB in absehbarer Zeit keinen Beitrag zur Auswertung der neuen Versuche leisten kann, muss anhand der Versuchsergebnisse von der GRS eine einfache Entrainment-Korrelation für unlösliche Aerosole erstellt werden. Diese Arbeiten werden im Nachfolgevorhaben durchgeführt.

5.1.5 Berücksichtigung des Atmosphärenmitrisses beim Sprühen

Beim Vergleich von Sprühmodellen in Rahmen des SARNET Projektes zeigte sich, dass in keinem der Sprühmodelle der verwendeten Lumped-Parameter-Codes der Mit-riss von Atmosphäre durch Sprühstrahlen berücksichtigt wird. Das bedeutet, dass die Durchmischung der Containmentatmosphäre beim Betrieb von Sprühsystemen zu gering berechnet wird. Dies trifft auch auf die Modelle in COCOSYS bzw. ASTEC/CPA zu.

Im Rahmen des Vorhabens sollten deshalb durch eine Recherche Modelle zum Atmosphärenmitriss durch Sprühstrahlen identifiziert und ihre Anwendbarkeit auf die COCOSYS bzw. ASTEC/CPA Sprühmodelle geprüft werden. Anhand von COCOSYS als Testbett war eine generelle Schnittstelle für die Implementierung von Entrainment-Modellen zu schaffen und zu testen. Durch die Teilnahme an den SARNET Projekten werden zu verschiedenen Versuchsständen experimentelle Daten verfügbar, die für die Testung der Schnittstelle und eines Entrainment-Modells zweckmäßig erschienen. Dies waren zu Vorhabensbeginn Aktivitäten in der SARNET WP12.2 Arbeitsgruppe "Containment Atmosphere Mixing" und dort insbesondere der MISTRA MASPn Sprüh-Benchmark.

Weiterhin wird in keinem der Sprühmodelle berücksichtigt, dass kleine Tropfen nicht zu Boden fallen, sondern als Nebel in die Atmosphäre übergehen (Einfluss auf den Sättigungszustand). Hier war eine Modellerweiterung angedacht, die die prinzipielle Be-

rücksichtigung dieses Effekts ermöglicht. Diese kann nur in Testrechnungen überprüft werden, da z.Z. keine passenden Versuche für eine Validierung vorliegen.

Die im Folgenden dargestellten Arbeiten stellen somit einen ersten Schritt zur entsprechenden Erweiterung von COCOSYS dar. Nach erfolgreichem Abschluss der Entwicklung sollen später die Modellerweiterungen nach ASTEC/CPA übertragen werden.

Die im Rahmen des Vorhabens erfolgten Aktivitäten zu diesem Arbeitspunkt sind ausführlich in /ARN 12a/ dokumentiert.

5.1.5.1 Atmosphärenentrainment

Die Sprühmodelle in den Programmen COCOSYS und ASTEC/CPA berücksichtigen nicht den der Mitriß von Atmosphäre durch einen Sprühstrahl (Phänomen ist in Abb. 5-19 illustriert). Dies ist im zugrunde liegenden Lumped-Parameter-Ansatz begründet, wodurch in den Modellzonen keine lokalen Geschwindigkeiten und damit kein gerichteter Impulstransport berechnet werden können.

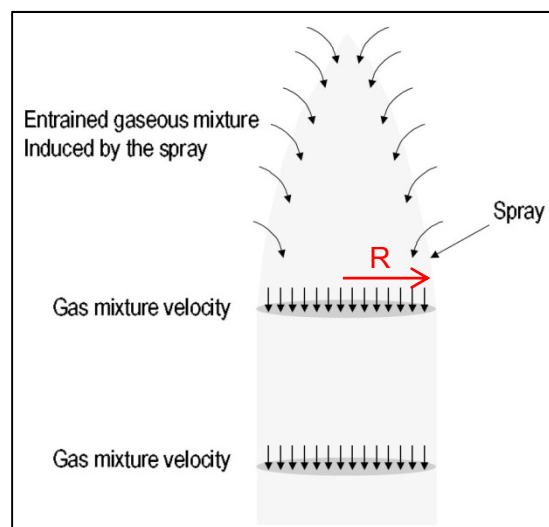


Abb. 5-19 Atmosphärenentrainment durch einen Sprühstrahl /FIS 02/

Dadurch sind z. B. keine sicherheitsrelevanten Aussagen möglich zur Problematik des Betriebes von Sprühsystemen in einer wasserstoffhaltigen Atmosphäre: führt die Kondensation von Dampf und damit die Anreicherung von Wasserstoff zu lokalen brennbaren Gemischen oder verbessert das Sprühsystem die Atmosphärenmischung im Containment und verhindert das Auftreten lokal brennbarer Gemische.

Die Literaturrecherche zu Modellen zum Atmosphärenmitriss (Gasmassenstrom) durch Sprühstrahlen führte zu einer einfachen Korrelation, die von Mc Quaid /MCQ 75/ zum Atmosphärenmitriss für eine einzelne Düse mit vollem Sprühkegel entwickelt wurde. Das Entrainment bezieht sich dabei auf die Stelle, wo die Sprühtropfen ihre stationäre Fallgeschwindigkeit erreicht haben und sich der Sprühkegel nicht mehr ausweitet (siehe Abb. 5-19). Mit dieser Korrelation wird also der durch den Sprühstrahl hervorgerufene integrale Atmosphärenmitriss beschrieben.

Ein weiterer potentieller Ansatz ist die Liepe Korrelation, auf deren Basis auch die Vorschläge zur Nodalisierung von Freistrahlen und Leichtgas-Plumes in COSCOSYS beruhen /SCH 04/. Diese Korrelation beschreibt einen Freistrahler des Fluids 0, der aus einer Öffnung mit hoher Geschwindigkeit und großem Impuls in einen mit dem Fluid 1 gefüllten Raum austritt. Eine Annahme bei Erstellung dieser Korrelation war, dass beide Fluide vollständig ineinander löslich sind, was bei einem Sprühstrahl aber nicht der Fall. Vorteil der Korrelation ist, dass sie das Entrainment in Abhängigkeit vom Abstand von der Öffnung ermittelt.

Im Laufe des Vorhabens kam es im Rahmen der COSCOSYS Anwendung zu Kontakten mit der Ruhr-Universität Bochum (RUB). Dabei stellte sich heraus, dass an der RUB gegenwärtig eine Doktorarbeit zum Atmosphärenmitriss durch Sprühstrahlen läuft. In Absprache mit dem Doktoranden wurde vereinbart, seitens der GRS keine weiteren Anstrengungen zu alternativen Korrelationen zu unternehmen und stattdessen auf die Zuarbeit von RUB zu warten. Die GRS steht dabei als Ansprechpartner zur Verfügung und gibt insbesondere Unterstützung bei der Implementierung von Korrelationen in COSCOSYS sowie ihrer Testung. Auf Anforderung wurde von RUB vorab eine erste als geeignet angesehene Korrelation bereitgestellt /RIS 12/ und für den prinzipiellen Aufbau einer Schnittstelle in COSCOSYS verwendet. Die Korrelation beruht auf Experimenten von Ricou und Spalding /RIC 61/. Dabei wurde ein Freistrahler in einem runden, unten und seitlich geschlossenen Behälter erzeugt und dann der seitwärts durch eine poröse Wand angesaugte Gasstrom gemessen. Wie schon bei der Liepe Korrelation wurde auch in diesen Experimenten ein Gasfreistrahler, aber kein Wassersprühstrahl verwendet. Quellen oder Senken im Freistrahler wie Kondensation oder Verbrennung sind ebenfalls nicht berücksichtigt. Entsprechend /RIS 12/ berechnet sich die Geschwindigkeit der mitgerissenen Atmosphäre als:

$$|v_e| = \frac{0,32 \times m_0}{\rho_s A_j d_0} \sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_0}} \quad (5-9)$$

Während der Erstellung des Arbeitsplanes war vorgesehen, den Atmosphärenmitriss durch zum Sprühstrahl gleichgeschaltete Ventilationssysteme (in COCOSYS als FAN bezeichnet) zu simulieren. In einem ersten Arbeitsschritt wurden deshalb vor der Implementierung einer Schnittstelle Testrechnungen dazu durchgeführt. Hierfür wurden die als Ergebnis der Mitarbeit im SARNET Projekt, WP12.2 "Containment Atmosphere Mixing", vorliegenden Daten genutzt, d.h. ein Datensatz zum MISTRA Sprühbenchmark, Phase C, Versuch MASP1 /MAL 06, KLE 10a/. Die MISTRA Anlage ist ein zylindrischer Stahlbehälter von ca. 99,5 m³. Im Zentrum des Behälterdeckels ist eine Sprühdüse angebracht, die einen vollen Sprühkegel von 30° generiert. Für die COCOSYS Testrechnungen wurde ein 58 Zonenmodell verwendet. Im Folgenden sind 2 Varianten verglichen: V1: Basisfall, d.h. ohne Definition von FANs während des Sprühens (2000 – 3800 s) und V2: mit aktivierten FANs zwischen 2800 – 3800 s (d.h. FAN Aktivierung 800 s nach Sprühbeginn, siehe unten). In V2 sind entlang der Pfade und Sektionen des Sprühstrahls (d.h. zwischen den Zonen) manuell FAN Systeme definiert, deren Volumenstrom in Abhängigkeit vom Abstand von der Sprühdüse grob abgeschätzt wurde.

Abb. 5-20 zeigt den Vergleich der mit COCOSYS berechneten Massenströme für die Atmosphärenverbindungen im inneren Bereich des Sprühstrahls. Positive Massenströme bedeuten dabei eine nach unten gerichtete Strömung. Mit Einsetzen des Sprühens bei 2000 s wird diese abwärts gerichtete Strömung um eine Größenordnung höher. Ursache ist das Sprühen, d.h. die Abkühlung der Atmosphäre mit starker Volumen Kondensation und damit einer Dichteänderung. In Variante 2 wurden die FANs erst 800 s nach Sprühbeginn aktiviert (d.h. nach 2800 s), um ihren Einfluss zu verdeutlichen. Es ist ersichtlich, dass sich beim Zuschalten der FANs die Strömungen in den Atmosphärenverbindungen innerhalb des Sprühstrahls umkehren. Die bisher nach unten gerichteten Strömungen drehen sich und kompensieren damit teilweise die durch die FANs aufgeprägten Strömungen.

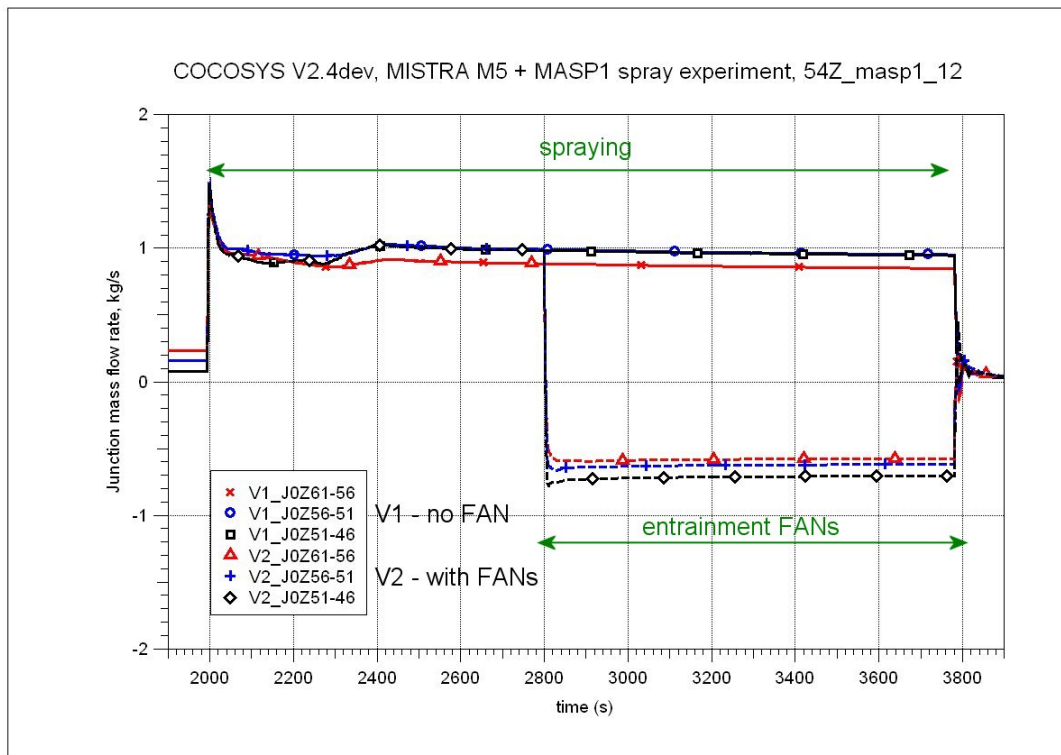


Abb. 5-20 MISTRA MASP1, Testrechnungen ohne und mit FANs

Nach entsprechenden internen Diskussionen sowie mit RUB wurde deshalb der Ansatz zur Implementierung von Entrainment-Korrelationen geändert. Jetzt wird direkt in die Berechnung der Atmosphärenströmungen durch die entsprechenden Verbindungen, die parallel zum Sprühstrahl definiert sind, eingegriffen. Dazu müssen geeignete Entrainment-Korrelationen eine Geschwindigkeit bereitstellen, die in der instationären, inkompressiblen Verbindungsgleichung verwendet wird (blau markiert):

$$\dot{G}_j = \frac{A_j}{l_j} \left\{ (p_{js} - p_{jt}) + w_j - K_j G_j |G_j| + \frac{\rho_j}{2} v_e^2 i_{dir} \right\} \quad (5-10)$$

Nach erster Auswertung der bisher ermittelten Entrainment-Korrelationen durch RUB stellte sich heraus, dass sich diese in 2 unterschiedliche Ansätze gruppieren lassen. Beide Ansätze sind in Abb. 5-21 verdeutlicht:

- Fall 1: bezogen auf das seitliche Ansaugen von Atmosphäre, d.h. senkrecht zur Mantelfläche des Sprühkegels und
- Fall 2: bezogen auf den Sprühstrahlquerschnitt.

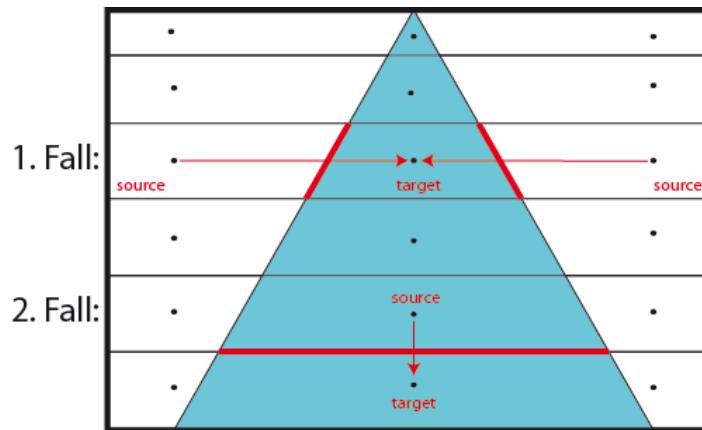


Abb. 5-21 Verschiedene Definitionen der Entrainmentbewegung in der Literatur /RIS 12/

Für die Implementierung einer Schnittstelle wurde der Fall 2 gewählt, da dieser besser in das gegenwärtige Konzept passt. Um das Atmosphärenentrainment in einer Rechnung zu aktivieren, sind lediglich zwei neue Texteingaben im Datensatz unter C---SYS_COMP bei der Definition der Sprühdüsen erforderlich. Für Fall 1 wurden nur Ansätze vorbereitet; hier muss von RUB weitergearbeitet werden. Vorschläge dazu sind in /ARN 12a/ dargelegt.

Die korrekte Implementierung der Schnittstelle sowie die Plausibilität der exemplarisch eingebauten Ricou-Spalding Korrelation wurde anhand eines Testdatensatzes mit 10 Zonen, 14 Atmosphären- und 9 Drainageverbindungen sowie einem Pumpensystem (Sprühsystem) überprüft. Die Form der Zonen R1 bis R3 ist dabei an die Form des Sprühkegels mit 30° Öffnungswinkel angepasst (Abb. 5-22). Die Atmosphärenverbindungen wurden entsprechend der sich ergebenden geometrischen Bedingungen festgelegt (Flächen, Längen).

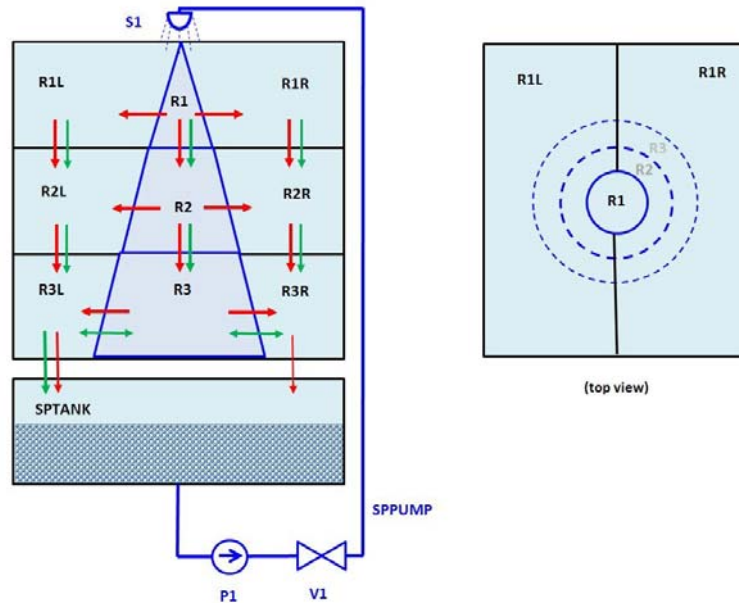


Abb. 5-22 Testdatensatz zum Atmosphärenentrainment

In Abb. 5-23 sind die Ergebnisse von 2 Varianten verglichen:

- **V1** - Basisfall, d.h. ohne Berücksichtigung von Atmosphärenentrainment (Kurven gestrichelt dargestellt) und
- **V2** – wie V1, aber mit Berücksichtigung von Atmosphärenentrainment.

Auf Basis der Ricou-Spalding Korrelation wird eine Entrainment-Geschwindigkeit von etwa 6 m/s für die Verbindung von R1 nach R2 sowie von ca. 3 m/s für die Verbindung von R2 nach R3 berechnet. Diese Geschwindigkeit geht dann als Anteil in die Berechnung der Ableitung der Massenströme ein. Sichtbar wird der Einfluss des Entrainments anhand der berechneten Massenströme (Abb. 5-23). Die Verbindungen sind dabei mit positiver Strömungsrichtung nach unten definiert, sodass im Sprühstrahl (Verbindungen A-R1-2 und A-R2-3) positive Ströme und durch die seitlichen Zonen (A-R1L-2L und A-R2L-3L) negative Ströme auftreten. Nach Aktivierung des Sprühens werden die Massenströme in Variante V2 wesentlich größer als in V1. Eine Strömungsumkehr wie bei Anwendung von FANs (siehe Abb. 5-20) tritt nicht auf. Die neue Schnittstelle und das implementierte Ricou-Spalding Modell liefern also physikalisch logische Werte. Über die Werte selbst kann ohne experimentelle Ergebnisse noch nichts ausgesagt werden.

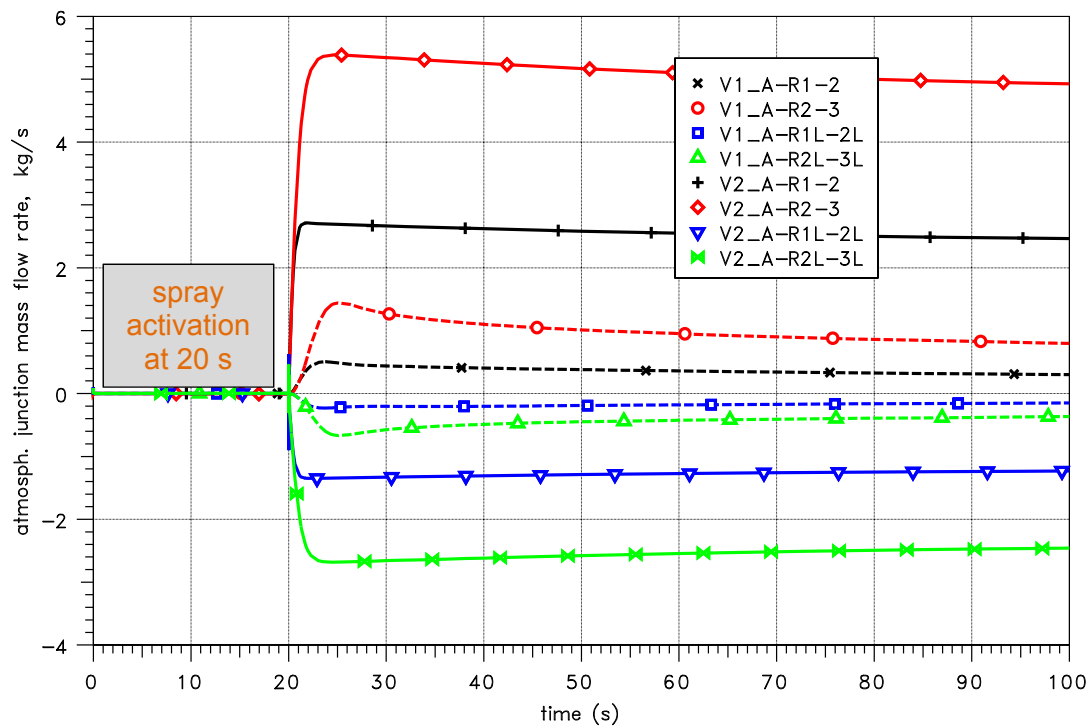


Abb. 5-23 Testrechnung Atmosphärenentrainment, Atmosphärenmassenströme

Während der Implementierung und Überprüfung der Schnittstelle haben sich einige Modellgrenzen bzw. als notwendige angesehene Erweiterungen herausgestellt. Diese sind in /ARN 12a/ aufgelistet Sie sollten soweit möglich in der weiteren Arbeit von Ruhr-Universität Bochum berücksichtigt bzw. komplementär von der GRS bearbeitet werden

5.1.5.2 Übergang luftgetragener Tropfen aus dem Sprühstrahl in die Atmosphäre

Ein weiterer Effekt beim Sprühen ist, dass sehr kleine Tropfen den Sprühstrahl verlassen und in der Atmosphäre schweben bleiben. Zur Berücksichtigung dieses Effektes wurde in COCOSYS eine Modellerweiterung implementiert, die die Definition eines "luftgetragenen" Anteils der Sprühtropfen sowie den Ort ihres Entstehens durch den Nutzer (Zone am Ende der Sprühpfade oder entlang der definierten Sprühpfade) erlaubt. Eine Abschätzung dieses Effektes kann auf Basis von Abb. 5-24 und falls verfügbar des Düsen-spezifischen Tropfenspektrums erfolgen. Man kann sehen, dass kugelförmige Partikel und damit in erster Näherung auch Tropfen mit einem Durchmesser

von 0,1 µm in ruhender Atmosphäre eine Geschwindigkeit von 0,001 mm/s erreichen, d.h. sie bleiben praktisch schweben.

CHARACTERISTICS OF PARTICLES AND PARTICLE DISPERSOIDS

		Particle Diameter, microns (µ)																										
		0.0001			(1mm.) 0.001			0.01			0.1			1			10			100			(1mm.) 1,000			(1cm.) 10,000		
Technical Definitions	Gas																											
	Dispersoids	Solid: Fume						Mist						Dust						Spray								
	Soil:	Atterberg or International Std. Classification System adopted by Internat. Soc. Soil Sci. Since 1934																										
Terminal Gravitational Settling for spheres	In Air at 25°C. 1 atm.	Reynolds Number	10 ⁻¹²	10 ⁻¹¹	10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁹	10 ⁻⁸	10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	10 ⁻⁴	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻¹	10 ⁰	10 ¹	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁸	10 ⁹	10 ¹⁰			
		Setting Velocity, cm/sec.	2	3	5	10	20	30	50	100	200	300	500	1000	2000	3000	5000	10000	20000	30000	50000	100000	200000	300000	500000	1000000		
	In Water at 25°C.	Reynolds Number	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁴	10 ⁻¹³	10 ⁻¹²	10 ⁻¹¹	10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁹	10 ⁻⁸	10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	10 ⁻⁴	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻¹	10 ⁰	10 ¹	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁸		
		Setting Velocity, cm/sec.	10 ⁻¹⁰	10 ⁻⁹	10 ⁻⁸	10 ⁻⁷	10 ⁻⁶	10 ⁻⁵	10 ⁻⁴	10 ⁻³	10 ⁻²	10 ⁻¹	10 ⁰	10 ¹	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷	10 ⁸	10 ⁹	10 ¹⁰	10 ¹¹	10 ¹²	10 ¹³		

Abb. 5-24 Partikel-Fallgeschwindigkeit in ruhender Umgebung

Entsprechende Modellerweiterungen erfolgten am Quelltext im THY Hauptmodule von COCOSYS. Die korrekte Implementierung sowie die Ermittlung des Einflusses der Definition von luftgetragenen Tropfen wurden in Testrechnungen für den MISTRA MASP1 Versuch überprüft. Der Anteil luftgetragenen Tropfen wurde dabei auf 0,1% vom eingespeisten Sprühmassenstrom abgeschätzt. Entsprechend der Rechnungen scheint dieser Anteil für die MISTRA Versuche zu gering zu sein. Bessere Ergebnisse liefern Anteile über 1%. Werte über 10% sind aber eindeutig zu hoch, d.h. dadurch wird ein großer Teil des an den Sprühtropfen kondensierten Dampfes wieder durch Verdampfung luftgetragener Tropfen kompensiert. Zu einer besseren Bewertung wären umfangreichere Analysen notwendig, um nur auf einen Parameter wirkende Verbesserungen auszuschließen. Hier sind aber insbesondere die in /KLE 10a/ aufgelisteten Probleme und Vorbehalte zu den MASP Sprühexperimenten zu berücksichtigen (z. B. großer Einfluss der Anfangsbedingungen, keine direkten Messwerte zur Bewertung von Sprühsystemen). Eine Validierung der Modelloptionen ist mit den z. Z. verfügbaren Experimenten nicht möglich.

5.1.6 Rückflüsse von internen und externen Anwendern

5.1.6.1 SWR-Hydrodynamik in THAI-IV

In den korrespondierenden Vorhaben RS1170/1190 werden verschiedene in der THAI-Versuchsanlage durchgeführte Versuche analytisch begleitet. Die in THAI-IV vorgesehenen Versuche zur SWR-Hydrodynamik stellen für diese analytische Begleitung „Neu-

land“ dar und es war deshalb damit zu rechnen, dass kurzfristig Fehler und einfachere Modellschwächen vor allem in den COCOSYS-Modulen DRASYS und SPARC-B behoben werden müssen. Der Informationsrückfluss aus der Validierung wurde hier ausgewertet für den Fall, dass eine Behebung von Programmierfehlern bzw. eine Anpassung vorhandener Modelle für die Simulation der SWR-Hydrodynamik-Versuche in THAI-IV sich als notwendig erweisen sollte.

Das Zonenmodell DRASYS zur Berechnung von Druckabbausystemen in COCOSYS unterteilt den Druckabbau nach einer Druckspitze in verschiedene Phasen. Nach dem Freiblasen des Kondensationsrohrs wird in der zweiten Phase der Wasseraufwurf durch das Ausblasen des Wasserdampf-Inertgas-Gemischs aus dem Kondensationsrohr berechnet. Dabei wird eine zylinderförmige Blase des Gemischs am Austritt des Kondensationsrohrs angenommen. Die Annahme einer zylinderförmigen Blase basiert auf Filmaufnahmen zu großskalierten Experimenten am Lawrence Livermore Laboratory (USA, 1977, Blowdown Versuche für BWR Mark 1, Skalierung 1:5). Eine solche Blase ist in Abb. 5-27 schematisch mit einem Radius r_{ex} dargestellt. Während der Pool-Swell Phase bildet sich diese Gasblase am Ende des Kondensationsrohrs und hebt die Wasseroberfläche in dem DRASYS-Modell an, bevor es zum Durchbruch von Gasen durch die Pooloberfläche kommt. Für die an den Kondensationsrohren auftretenden Druckspitzen (typische Druckschwingungen zwischen Druck- und Kondensationskammer eines SWR) und die dadurch auftretenden Belastungen ist der Blasenradius als Modellparameter "Expansionsradius" während dieser Pool-Swell Phase von entscheidender Bedeutung. Um diesen Radius experimentell genauer zu bestimmen und mögliche Belastungen der Kondensationsrohre während eines Druckabbauereignisses abschätzen zu können, sind Versuche zu dieser Thematik in THAI durchgeführt worden. Die Nachrechnung dieser Versuche sollte klären, ob mögliche Modellverbesserungen an DRASYS notwendig sind.

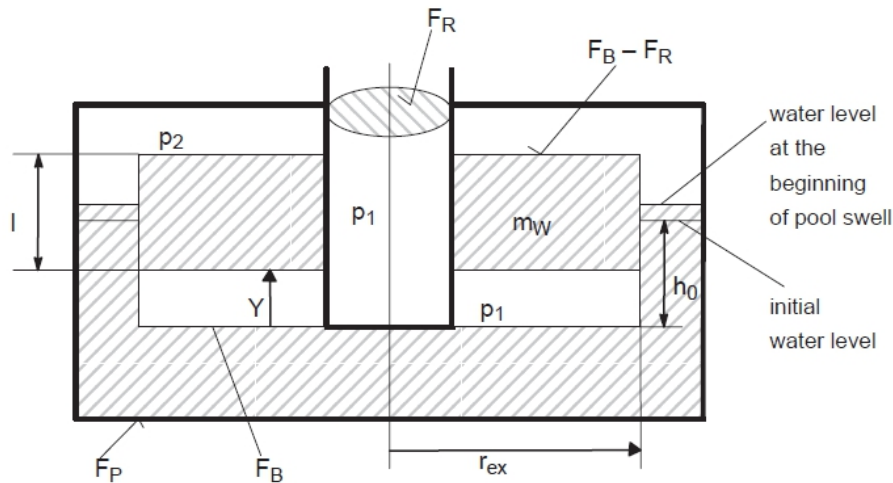


Abb. 5-25 Darstellung der Blase mit Radius r_{ex} während der „Pool-Swell“ Phase

In Abb. 5-26 sind der Versuchsaufbau des THAI-Behälters und die gewählte COCOSYS-Nodalisierung dargestellt. Aus einem Druckbehälter RPRES außerhalb des THAI-Behälters strömt nach dem Öffnen eines Kugelhahns Stickstoff über das Kondensationsrohr RPIPE in die Wasservorlage POOL innerhalb des THAI-Behälters. Das Kondensationsrohr hat innerhalb des Wasservolumens einen Durchmesser von 0,21 cm, da allerdings die Zufuhr in den THAI-Behälter nicht genügend Platz lässt, hat das Rohr oberhalb der Wasseroberfläche nur einen Durchmesser von 0,11 cm. In diesen Versuchen sind Druckmessaufnehmer radial auf der Wasseroberfläche an 9 Messpositionen angebracht worden, um den Radius der Blase abschätzen zu können, die sich während der Pool-swell Phase bildet. Diese Messungen lassen Rückschlüsse auf die maximalen Belastungen für die Kondensationsrohre bei Druckabbauereignissen zu. Zusätzlich sind Hochgeschwindigkeitsaufnahmen von der Blase aufgenommen worden. Die so gewonnenen Blasenradien sind für Rechnungen mit COCOSYS verwendet worden. Die erzielten Ergebnisse sind in /NOW 11/ dokumentiert.

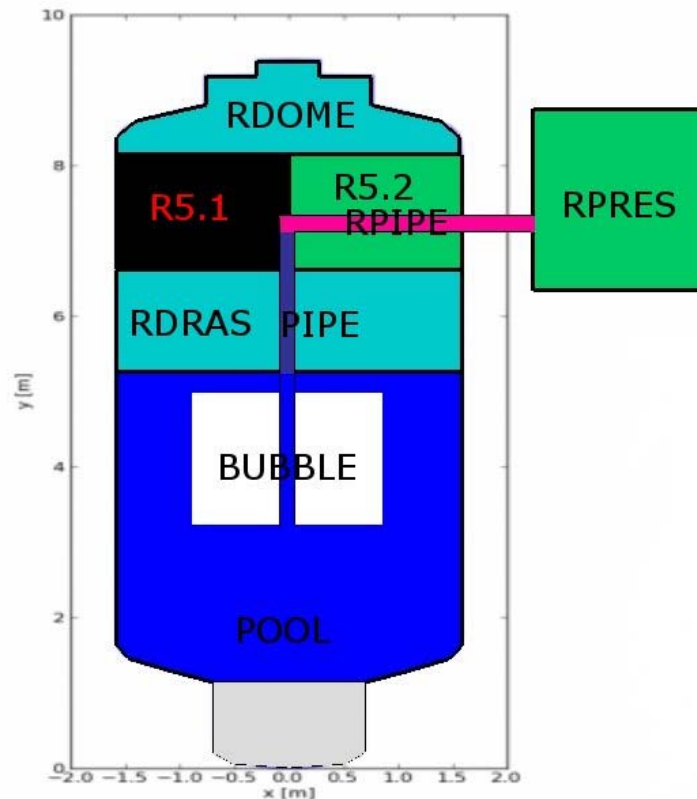


Abb. 5-26 Schematische Darstellung der Wasseraufwurfversuche mit der benutzten COCOSYS-Nodalisierung

Abb. 5-27 zeigt exemplarisch die Messung der Druckaufnehmer an der Pooloberfläche für einen Versuch mit 2 m Eintauchtiefe des Kondensationsrohrs und 4 bar Überdruck. Die oberste Kurve zeigt den Druckaufnehmer bei einem Radius von 0,12 m, also direkt neben der äußeren Wand des Kondensationsrohrs. Die tieferen Kurven zeigen die Messungen in radial größer werdendem Abstand. Die unterschiedlich hohen Ausschläge mit abnehmender Amplitude, je weiter die Messstelle vom Kondensationsrohr entfernt ist, lassen Rückschlüsse über die Größe der Gasblase während der Pool-Swell-Phase zu. In Wirklichkeit tritt natürlich keine zylinderförmige Blase am Rohrende auf, wie sie im DRASYS-Modell unterstellt wird, und die Messungen lassen nur eine ungefähre Aussage über die Größe der Blase zu. Aus der Auswertung dieser experimentellen Ergebnisse wird ein Blasenradius von 0,7 m für die THAI-Versuche abgeschätzt. Dieser Wert wird in allen durchgeführten COCOSYS-Rechnungen für das DRASYS-Modell benutzt.

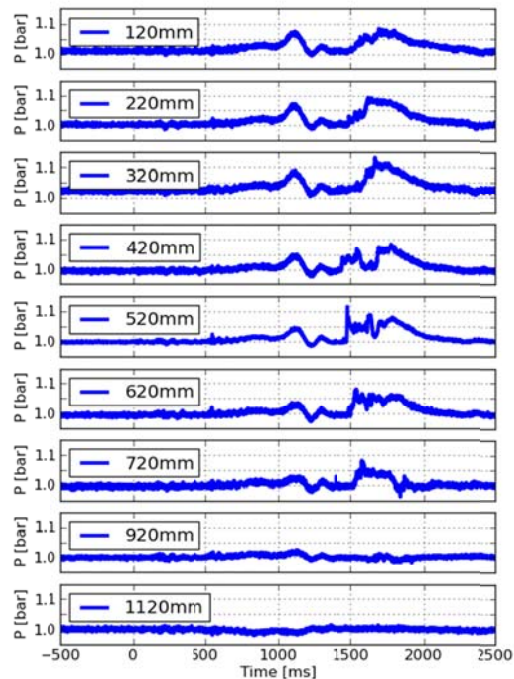


Abb. 5-27 Radiale Messungen der Druckaufnehmer in einem Versuch mit 2 m Eintauchtiefe und 4 bar Überdruck

In Abb. 5-28 ist ein typisches Ergebnis des Vergleichs zwischen COCOSYS und demselben Experiment wie in Abb. 5-27 dargestellt. Die grünen Kurven zeigen die mit COCOSYS berechnete Druckentwicklung in dem Druckbehälter RPRES und dem Kondensationsrohr RPIPE. Die blauen Kurven zeigen die dazugehörigen Messkurven. Die Höhe der Druckschwankungen während der Pool-Swell-Phase bestimmen die maximalen Belastungen an den Kondensationsrohren. In der Abb. 5-28 überschätzt COCOSYS die Druckbelastungen deutlich, d. h. das DRASYS-Modell liefert konservative Werte für die Druckbelastungen der Kondensationsrohre. Dieses Verhalten deckt sich mit früheren Berechnungen des GKSS-M1-Experiments mit der Stand-Alone Version von DRASYS /SCH 84/ und innerhalb von COCOSYS /NOW 07/. Dieses Ergebnis zeigt, dass COCOSYS die THAI-Versuche ähnlich gut nachrechnet wie die GKSS-Versuche und keine weitere Modellverbesserung nötig ist.

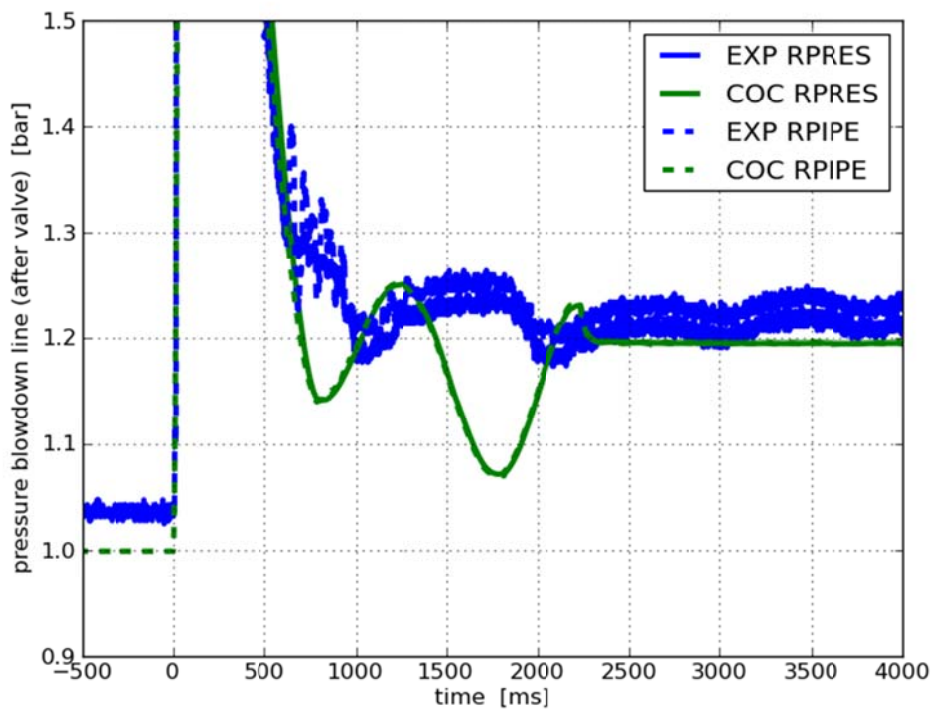


Abb. 5-28 Vergleich Druckentwicklung COCOSYS – Experiment

Darüber hinaus sind Rechnungen für ein Experiment mit 15 bar Überdruck durchgeführt worden. Unter diesen Annahmen versagt das DRASYS-Modell, da es eine Anhebung der Wasseroberfläche oberhalb des höchsten Punkts des THAI-Behälters berechnet.

Die durchgeführten Versuche liefern wichtige Ergebnisse für die möglichen Belastungen der Kondensationsrohre in einem Druckabbauszenario. Der experimentell bestimmte Blasenexpansionsradius ist ein wichtiger Eingabewert für DRASYS und kann in zukünftigen COCOSYS-Rechnungen benutzt werden. Eine weitere Modell-Verbesserung anhand der durchgeführten THAI-Versuche erscheint nicht notwendig bzw. möglich, da die Nachrechnungen vergleichbar gute Ergebnisse wie bei den alten GKSS Versuchen zeigen. Außerdem weisen die Versuche eine stark THAI-spezifische Geometrie auf. Durch das Öffnen des Ventils an dem Druckbehälter, der von Beginn an unter Druck steht, entsteht ein unrealistischer Ausströmvorgang, der viel schneller als der Druckverlauf während eines Störfalls abläuft. Außerdem besitzt das verwendete Rohr einen kleineren Querschnitt als in realen Anlagen, um die Zuleitung durch die Behälterflansche zu ermöglichen. Auch die Pool-Geometrie ist unterschiedlich im Vergleich zu den Druckabbausystemen in deutschen SWR. Der kleinere Querschnitt des

Kondensationsrohrs erleichtert ein Auftreffen der Strömung auf den Grund des Wasserpools, wodurch eine Umleitung der Strömung erzielt wird. Auch der Abstand zum Boden ist geringer als in realen Anlagen. Mit den durchgeführten Arbeiten wurden letztlich die aus den THAI-Versuchen verwertbaren Informationen genutzt.

5.1.6.2 Mehrdimensionale Wärmeleitung

Die THAI-Versuchsanlage ist mit drei Heiz-/Kühlmänteln ausgestattet, die bei einigen Versuchen unterschiedlich stark oder auch einzeln beheizt oder gekühlt werden. Bei dem Thermohydraulik-Versuch TH9 wurde z. B. der obere Mantel gekühlt, während die übrigen Mäntel ungekühlt blieben /SPE 09/. Die tatsächlichen mehrdimensionalen Wärmeleitungseffekte in der THAI-Versuchsanlage konnten damals nicht ausreichend genau und dies auch nur mit erheblichem Mehraufwand auf iterative Weise simuliert werden, da COCOSYS nur über ein eindimensionales Wärmeleitmodell verfügt.

Der Einfluss solcher mehrdimensionalen Effekte kann mit dem entwickelten Modell genauer erfasst werden. In COCOSYS können nun Strukturen verbunden werden, so dass die Wärmeleitung entlang der Strukturschichten simuliert wird. Die Simulation erfolgt dabei nur vereinfacht, da die Wärmeleitung durch die Schichten und entlang der Schichten separat berechnet wird. Da meistens relativ plattenförmige und dünne Strukturen simuliert werden, ist diese Vereinfachung akzeptabel. Allerdings muss auch beachtet werden, dass die Abstände der Knoten relativ groß ist, und damit das Temperaturprofil entlang der Strukturen nur grob abgebildet werden kann.

Meistens kann davon ausgegangen werden, dass die Wärmeleitung entlang der Strukturschichten für die gesamte Struktur gilt. In diesem Fall wird vorausgesetzt, dass die Schichteinteilung für die verbundenen Strukturen identisch ist, so dass die jeweiligen Schichten zugeordnet werden können. In dem unten dargestellten, generellen Konzept ist es möglich, dass nur ein Teilbereich einer Struktur mit einem Teilbereich der anderen Struktur verbunden werden kann.

Das generelle Konzept ist in Abb. 5-29 dargestellt, das Modell ist detailliert im COCOSYS Reference und User Manual beschrieben. Im Modell wird eine Wärmeleitung zwischen den Schichten mit der Tiefe d angenommen, d. h. die Strukturen sind im Bereich links (davor) und rechts (dahinter) nicht miteinander verbunden. Die linke Seite der Strukturverbindung ist durch die Offsets x_L der oberen und x_R der unteren Struktur definiert. Wichtig ist, dass die jeweiligen Schichteinteilungen in dem Bereich d der Ver-

bindung identisch ist, so dass die einzelnen Schichten einander zugeordnet werden können. Zur Berechnung der Wärmeleitung ist es notwendig den Abstand l_L+l_R zwischen den Strukturmittelpunkten vorzugeben. Zur Bestimmung der Kontaktfläche muss noch die Breite b (nicht in der Abbildung dargestellt) angegeben werden.

Nimmt man die Temperatur T an der Schnittfläche an, ergeben sich die Wärmeströme

$$\dot{Q}_L = F\lambda_L \frac{T_L-T}{l_L} \text{ und } \dot{Q}_R = F\lambda_R \frac{T_R-T}{l_R} .$$

Mit der Annahme, dass beide Wärmeströme gleich sind, lässt sich daraus die Temperatur an der Schnittstelle ermitteln:

$$T = \frac{l_R\lambda_L T_L + l_L\lambda_R T_R}{l_R\lambda_L + l_L\lambda_R} .$$

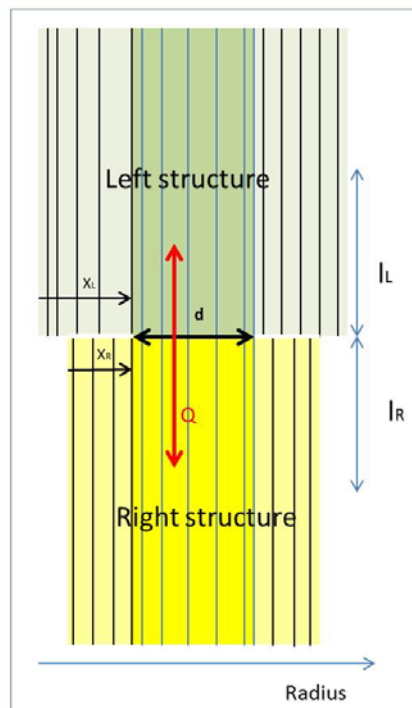


Abb. 5-29 Konzept zur Berechnung der Wärmeleitung entlang von Strukturen

Das Modell wurde anhand eines einfachen Testbeispiels überprüft. In diesem Beispiel werden 2 gleiche quadratische Stahlplatten mit einer Fläche von 1 m^2 und einer Dicke von 1 cm miteinander verbunden. Beide Platten sind auf der rechten Seite adiabatisch und auf der linken Seite mit einer 1000 m^3 -Zone verbunden. Die Zone R2 mit der Platte S2S hat eine Starttemperatur von $150 \text{ }^\circ\text{C}$, während die untere Zone R1 mit der Platte

S1S eine Starttemperatur von 20 °C hat. In der Rechnung über eine Problemzeit von 10 h können sich die Temperaturen ausgleichen.

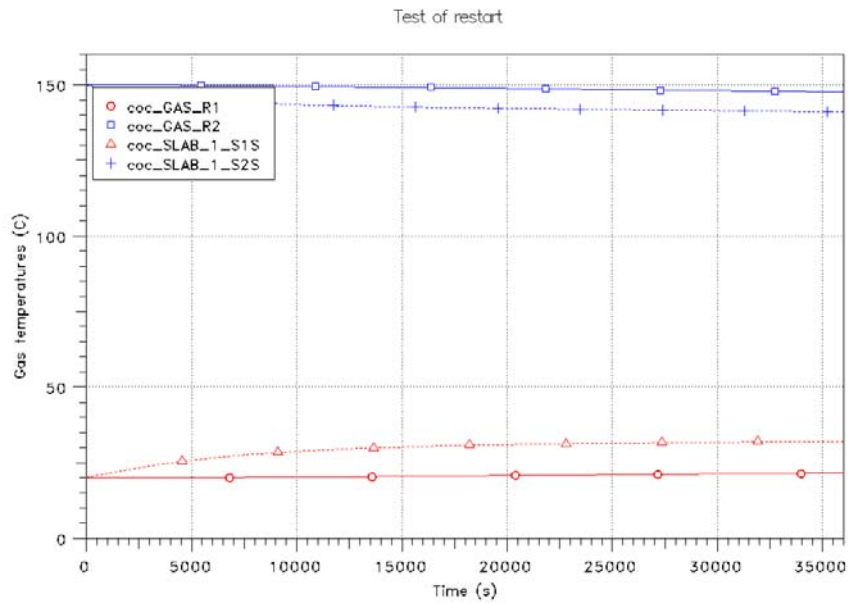


Abb. 5-30 Temperaturen in den Zonen R1 und R2 sowie Oberflächentemperatur der Platten

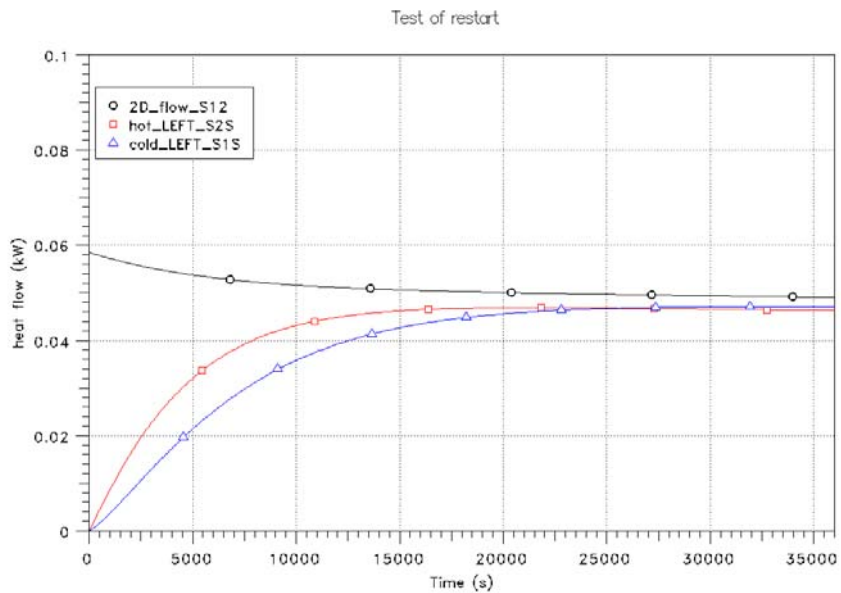


Abb. 5-31 Wärmeströme an der Oberfläche und zwischen den Platten

Die Ergebnisse sehen plausibel aus. Im Allgemeinen ist der Einfluss dieses Phänomens sehr gering. Beispielhaft wird die Oberflächentemperatur des oberen Kühlmantels im THAI-Versuch TH-23 verglichen. Die rote Kurve zeigt die Ergebnisse mit Verwendung dieser Option.

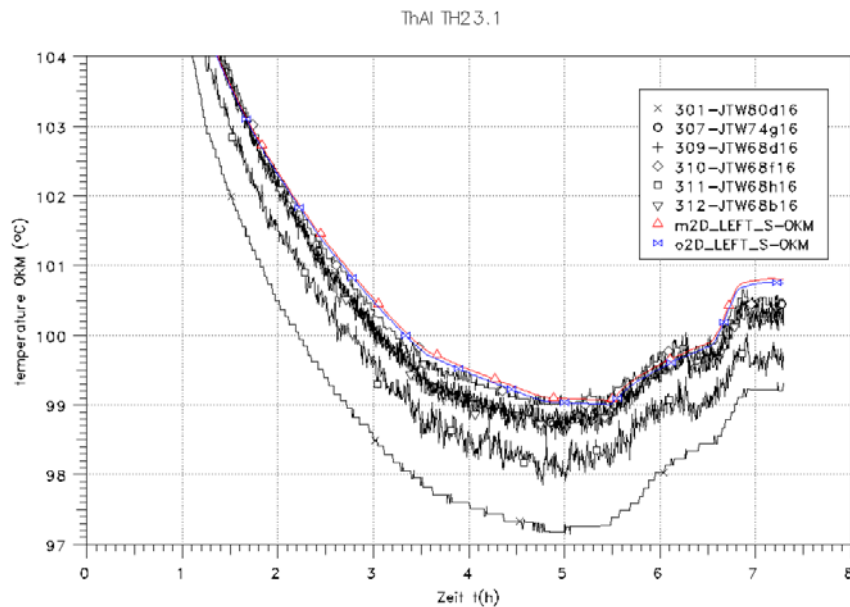


Abb. 5-32 Vergleich der Rechenergebnisse anhand von THAI-TH23

5.2 Begleitung der CoPool-Entwicklung

Seitens des Fraunhofer-Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) wurde im Rahmen des Vorhabens 1501361 „CoPool: Mehrdimensionales Containment Pool-Modell – Entwicklung eines COCOSYS Moduls zur orts aufgelösten Simulation großer Wasservorlagen“ ein Simulationsprogramm zur einphasigen (nur Wasser) dreidimensionalen Berechnung von Strömungs- und Wärmeübertragungsvorgängen in Wasservorlagen (z.B. Sumpf eines DWR oder Kondensationskammer eines SWR) entwickelt. Dieses Modul soll in einer nächsten Phase in das COCOSYS-Programmsystem eingebunden werden, um eine deutlich genauere Berechnung der Vorgänge in großen Wasser-pools zu ermöglichen. Bislang können Vorgänge innerhalb solcher Wasser-pools nicht räumlich aufgelöst werden, sondern werden in COCOSYS nur durch mittlere Werte in einer Zone beschrieben. Die GRS war bei dieser Entwicklung beratend tätig, damit sichergestellt ist, dass das Programm CoPool die geforderten Anforderungen insbesondere im Hinblick auf die Auflösung, die Rechengenauigkeit und die Rechenge-

schwindigkeit erfüllt und eine spätere Ankopplung an COCOSYS bereits in der Entwicklungsphase mit in Betracht gezogen wird.

Da ITWM erstmalig in ein Projekt aus dem Bereich Störfallsimulation für Kernkraftwerke eingebunden war, wurden zahlreiche Projektgespräche mit ITWM und unter Beteiligung von Becker Technologies (Unterauftragnehmer im Projekt von ITWM) durchgeführt, um die Anforderungen an das Simulationsprogramm zu diskutieren. Im Projektverlauf wurden mehrere Lösungsansätze und Vorgehensweisen für die dreidimensionale Simulation der Vorgänge im Wasserpool diskutiert und seitens ITWM mehrere Prototypen exemplarisch realisiert. Wesentliche Diskussionspunkte waren dabei Vereinfachungen in Bezug auf die Simulation der Wasseroberfläche (keine Oberflächenwellen) sowie der Simulation des Wärmeübergangs und der Wandstrukturen. Zur Erstellung der Datensätze wurde ein spezieller Präprozessor seitens ITWM entwickelt. Zur Visualisierung werden frei verfügbare Programme (z. B. Visit oder Paraview) verwendet.

Die GRS nahm an zwei Trainingseinheiten zum Erlernen und zur Erprobung des Werkzeugs CoPool inklusive des Präprozessors teil.

Das Vorhaben zur CoPool-Entwicklung wurde Anfang 2012 erfolgreich abgeschlossen. Die erstellte CoPool-Version 2.5 wurde in der GRS installiert und exemplarisch getestet. Ein Beitrag zur Validierung des CoPool-Programms wurde durch Becker Technologies geleistet /FRE 12/. Bei den Tests durch die GRS standen Anwendungsrechnungen für den Sumpf einer Konvoi-Anlage im Vordergrund. Dazu wurde ein vereinfachter CoPool-Datensatz entwickelt. Als Szenario wurde im Wesentlichen ein Bruch der Volumenausgleichsleitung am Reaktorkreislauf angenommen. Mit den vergleichsweisen hohen Wassermassenströmen, die aus dem Leck in den Sumpf (punktuell) einfließen und diesen auffüllen sollte die Robustheit von CoPool getestet werden.

Die Abb. 5-33 zeigt exemplarisch die erstellte dreidimensionale Geometrie sowie die Temperaturverteilung im Sumpf nach ca. 1800 s. In der Abbildung ist der Sumpf im Schnitt dargestellt. Zu diesem Zeitpunkt hat sich die Wassertemperatur außer an der Einspeisestelle bereits ausgeglichen (grüner Bereich), die umgebenden Wände wärmen sich langsam auf.

Die Arbeiten zur Anbindung an COCOSYS werden in einem geplanten Folgevorhaben realisiert.

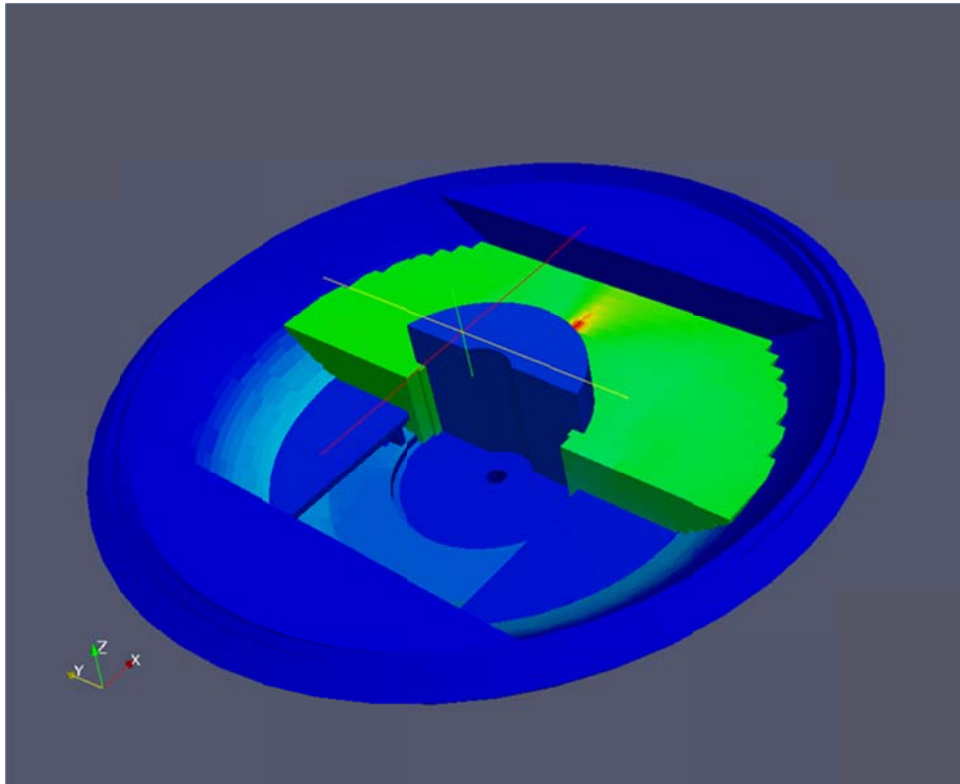


Abb. 5-33 Berechnete Temperaturverteilung nach ca. 1800 s, CoPool-Testanalyse

5.3 SARNET/ISTC

5.3.1 SARNET2

Im Rahmen der Mitarbeit in SARNET2 trägt die GRS zu folgenden SARNET-Arbeitspaketen bei:

- WP1: Management (MANAG)
- WP3: Information Systems (IS)
- WP4: ASTEC (ASTEC)
- WP4.1: Users' Support and Integration (USI)
- WP4.2: ASTEC Code ASsesment (ACAS)
- WP4.3: ASTEC Model EXtension (AMEX)
- WP5: Corium and Debris Coolability (COOL)
- WP6: Molten Corium Concrete Interaction (MCCI)

- WP7: Containment (CONT)
- WP8: Source Term (ST)

Im aktuellen Entwicklungsvorhaben sind die Arbeiten zu WP4 vorgesehen, da sie thematisch nah an die Code-Entwicklung anschließen. Die Arbeiten innerhalb der anderen Arbeitspakete sind im COCOSYS/ASTEC Validierungsvorhaben abgedeckt.

Im Rahmen von WP4.1 (Users' Support and Integration (USI)) wurden verschiedene Aktivitäten zur Unterstützung der ASTEC-Anwender sowie zur Herausgabe einer jeweils neuen Version angesiedelt.

- Vorbereitung und Teilnahme am User-Workshop zu ASTEC (2010 in Köln)
- Teilnahme mit Beiträgen an den ERMSAR-Konferenzen (2010 in Bologna und 2012 in Köln)
- Vorbereitung und Teilnahme an einem Training-Course für ASTEC (2009)
- Beiträge zur Erstellung aktualisierter Dokumente im Rahmen der Freigabe neuer Versionen

In WP4.2 ACAS beteiligt sich die GRS an der Bewertung und Validierung von ASTEC speziell durch die Anwendung von ASTEC auf DWR-Anlagen deutscher Bauart (Konvoi). Des Weiteren wurde ein Beitrag zur Validierung des ASTEC-Moduls CPA in Form einer Nachrechnung zu einem Sprühexperiment in der französischen MISTRA-Anlage erbracht. Die Arbeitsergebnisse sind im SARNET Rahmen in verschiedenen Progress- und Assessment-Reports dokumentiert worden /CHA 10b, CHA 11d, CHA 11e/. Die nachfolgende Zusammenfassung konzentriert sich dabei auf die Arbeiten zur Bewertung von ASTEC bei der Simulation von Unfallszenarien in deutschen DWR Anlagen vom Typ KONVOI.

Mit Freigabe der ASTEC-Version V2.0 Anfang Juli 2009 mussten die bisher für die Version 1.33 verwendeten Datensätze insbesondere an die Erfordernisse des von IRSN neu implementierten Kernzerstörungsmoduls ICARE, das das bis dato verwendete DIVA Modul ersetzte, angepasst werden. Diese betrafen die Überarbeitung der Kopplung zwischen ICARE und CESAR durch z. B. die versionsbedingte Umbenennung verschiedener Eingabestrukturen. Weiterhin wurde insbesondere der erweiterten Modellierung innerhalb von ICARE Rechnung getragen. Dies betraf z. B. die Möglichkeit neben der bisher verfügbaren Modellierung eines 1-dimensionalen, abwärts gerichteten

teten Schmelzeabflusses die Möglichkeit der Simulation einer Schmelzeansammlung im Kern mit nachfolgend radialer Ausbreitung. Weitere Modifikationen betrafen die geänderte Anbindung von betrieblichen Einrichtungen wie Pumpen und Druckspeichern.

Der so geänderte Datensatz erforderte dann wieder eine Neuqualifizierung der Berechnung des stationären Anlagenzustands bei Nennbetrieb, wozu spezielle Regelkreise zur Kontrolle von charakteristischen Anlagenparametern angepasst werden mussten. Nach Aussage des Entwicklungspartners IRSN ist die möglichst korrekte Einstellung des Nennbetriebs für die Stabilität und Rechnungsgüte der nachfolgenden Unfallsimulation notwendig, weshalb die Einstellung der verschiedenen Regelparameter mit besonderer Sorgfalt durchzuführen waren. Diese Regelkreise beinhalten neben betrieblichen Systemen wie Druckhalterstrühen und -beheizen auch die Regulierung und Kontrolle z. B. des Füllstandes der Dampferzeuger (DE), die maßgeblich den Wärmetransport von der Primär- zur Sekundärseite beeinflussen. Weitere Parameter sind die Drehzahl bzw. Massenstrom der Kühlmittel- bzw. Speisewasserpumpen.

Für die dann durchgeführten Unfallrechnungen sind die Module CESAR, ICARE, CPA, SOPHAEROS, RUPUICUV, CORIUM, MEDICIS, IODE sowie ISODOP aktiviert worden. Damit lassen sich prinzipiell alle während des Unfallszenarios auftretenden Phänomene (In-Vessel sowie Ex-Vessel) beschreiben, einschließlich Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung (MEDICIS) und Iodchemie (IODE).

Neben einem Vergleich der verschiedenen ASTEC Versionen untereinander (also V2.0 mit V1.3) wurden im weiteren Verlauf des Vorhabens die jeweils aktuell verfügbaren, überarbeiteten ASTEC-Versionen mit MELCOR-Rechnungen verglichen. Die Auswahl der Unfallszenarien orientierte sich an den schon verfügbaren Rechnungen sowohl der Vorläuferversion ASTEC-V1 als auch der MELCOR-Version 1.8.6. Generell waren die Szenarien nach deren Eintrittshäufigkeit und der Risikorelevanz basierend auf Ergebnissen einer PSA der Stufe 1 ausgesucht worden und schon in einem anderen BMWi Vorhaben untersucht worden.

Die ausgewählten Unfallabläufe waren demzufolge:

- ein kleines Leck (50 cm²) im kalten Strang der Hauptkühlmittleitung des Druckhalterstrangs sowie
- eine Transiente infolge Totalausfalls der Speisewasserversorgung (TLFW).

Bei den ausgewählten Szenarien mussten Annahmen über die Systemverfügbarkeiten dem Analyseziel angepasst werden. So wurden z. B. schadensverhindernde Maßnahmen, die Wärmeabfuhr über die Sekundärseite und aktive Einspeisesysteme (Notkühlsysteme) teilweise als unwirksam oder ausgefallen angenommen, um den Bereich von Unfallabläufen zu erreichen. So wird z. B. bei der Transiente neben dem Ausfall der Hauptspeisewasserpumpen zum Zeitpunkt $t = 0$ s gleichzeitig der Ausfall der An- und Abfahrpumpen sowie der Notbespeisung unterstellt. Im Verlaufe des Störfalls wird als anlageninterne Notfallmaßnahme das primärseitige Druckentlasten und Bespeisen durchgeführt bis die Flutbecken entleert sind. Ein unterstelltes Versagen des Umschaltens auf Sumpfumwälzbetrieb führt dann zu Ausdampfen des Kerns und nachfolgend zur Kernzerstörung und schließlich zum RDB-Versagen.

Der Reaktorkreislauf besteht in beiden Programmen aus zwei modellierten Schleifen, einer separaten Abbildung des Druckhalters des angeschlossenen Abblasetanks sowie maßgeblicher betrieblicher Systeme (Pumpen, Ventile, Behälter). Die Anzahl verwendeter Zonen unterscheidet sich etwas zwischen beiden Programmen z. B. im Bereich des Reaktorkerns und der Dampferzeuger, was unter anderem durch die Art der Modellierung der Thermodynamik in den beiden Programmen bedingt ist. Auch für die Nodalisierung des Sicherheitsbehälters wurde eine weitgehende Übereinstimmung beider Modelle angestrebt. In beiden Programmen können die Raumbereiche inner- und außerhalb des Sicherheitsbehälters durch eine frei wählbare Anzahl von Kontrollvolumen abgebildet werden, die durch zu definierende Strömungsverbindungen gekoppelt sind. Diese sind an die realen Gegebenheiten weitestgehend angepasst.

Im Weiteren werden beispielhaft die Ergebnisse der Rechnung von ASTEC für den Fall des Speisewasserausfalls den entsprechenden Ergebnissen mit MELCOR gegenübergestellt.

Ein erster Vergleich der transienten Phase lässt sich zunächst auf eine Gegenüberstellung von Zeitpunkten charakteristischer Ereignisse beschränken (oberer Abschnitt der Tab. 5-4). Anlagenparameter für einen derartigen auslegungsüberschreitenden Störfallablauf liegen nicht vor.

Tab. 5-3 Ereignisablauf und charakteristische Größen des Szenarios TLFW

Event	ASTEC	MELCOR
	Zeit [s]	
Speisewasserausfall	0	0
RESA (DE-Füllstand < 9m)	22	30
Hauptkühlmittelpumpen „Aus“ (DE-Füllstand < 4m)	478	687
Erstmaliges Öffnen der Druckhalterventile	3100	3557
Einleitung „primärseitige Druckentlastung“	5504	5817
Beginn Hochdruck-Sicherheitseinspeisung (JND)	6213	6066
Beginn Druckspeichereinspeisung (JNG)	7002	6496
Beginn der Niederdruck-Sicherheitseinspeisung (JNA)	10539	7624
Ende der Hoch- und Niederdruck-Einspeisung	12198	11810
Ende der Druckspeichereinspeisung	10663	12492
Beginn der Strukturmaterial-Freisetzung	20114	17999
Erste Verlagerung von Corium ins untere Plenum	32588	24984
RDB-Versagen	34214	29478
Rechnungsende	150000	150000
	[kg]	
Freigesetzte H ₂ Masse während bis RDB-Versagen	632 kg	671 kg
Insgesamt in die Reaktorgrube verlagerte Coriummasse	179832 kg	174910 kg

Der Unfallablauf lässt sich wie folgt charakterisieren: Mit dem Eintritt des Ereignisses „Totalausfall der Speisewasserversorgung“ wird das sekundärseitige Wasserinventar reduziert und der Füllstand sinkt rapide ab, da vereinfachend unterstellt wurde, dass die Reaktorabschaltung (RESA) erst bei einem DE-Füllstand < 9 m erfolgt. Dies erfolgte in ASTEC einige Sekunden früher als in MELCOR. Während der heftigen Verdampfung steigt zugleich sekundärseitig der Druck, wodurch bei Erreichen von ~ 8,5 MPa das Teilabfahren mit 100 K/h auf 7,5 MPa eingeleitet wird.

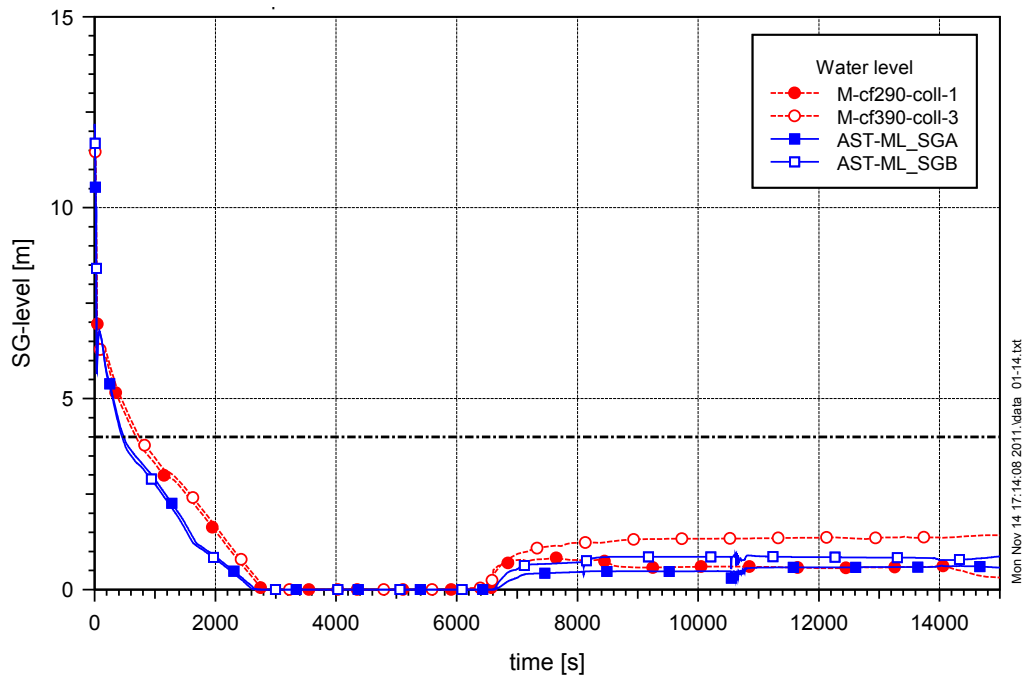


Abb. 5-34 DE-Füllstand bei ASTEC (blau) und MELCOR (rot)

Die Füllstände in den DE fallen wegen fehlender Zufuhr von Speisewasser ständig weiter. Bei einem DE-Füllstand < 4 m werden die Hauptkühlmittelpumpen (HKMP) als unterstellte Handmaßnahme abgeschaltet, wodurch der Energieeintrag der laufenden Hauptkühlmittelpumpen entfällt und das verbliebende Inventar der DE für einen etwas längeren Zeitraum zur Wärmeabfuhr genutzt werden kann. Die Abb. 5-34 zeigt den Füllstand für die Sekundärseite der Dampferzeuger für ASTEC und MELCOR. In früheren Rechnungen waren hier bereits deutliche Unterschiede aufgetreten. So errechnete ASTEC mit der Version V1.3 ein um ca. 2000 s verspätetes Ausdampfen der Dampferzeuger verglichen mit MELCOR. Dieses verspätete Ausdampfen war auf die (unrealistische) Verlagerung von angesammeltem Wasser aus dem oberen Bereich der Dampferzeuger zurückzuführen. Bei den hier diskutierten Analysen wurde die Nodalisierung der Sekundärseite der Dampferzeuger komplett überarbeitet. Die dann erzielten Ergebnisse sind der Abb. 5-34 zu entnehmen und zeigen die Wirksamkeit der geänderten Nodalisierung auf: Das Ausdampfverhalten wird nun von beiden Codes gleich berechnet.

Nach Ausdampfen der Dampferzeuger steigt der Druck primärseitig (Abb. 5-35) dann weiter an, kann aber zunächst durch zyklisches Öffnen des Druckhalter-Abblaseventils begrenzt werden. Durch den fortwährenden Kühlmittelverlust wird bei Anstehen des Min-3-Kriteriums (Füllstand unterhalb der Unterkante der Hauptkühlmittelleitung) als AM-Maßnahme das primärseitige Druckentlasten und Bespeisen angeregt. Dazu wer-

den alle Druckhalterventile vollständig geöffnet. Die entsprechenden Massenströme durch Abblase- und Sicherheitsventile sind der Abb. 5-36 zu entnehmen. Auch hier zeigt sich eine akzeptable Übereinstimmung. Infolge des dann einsetzenden Druckabfalls können nachfolgend die Hochdruck-Sicherheitseinspeisesysteme (HPI) ab 11 MPa bzw. die Niederdrucksicherheitseinspeisung (LPI) ab 1,0 MPa einspeisen (Abb. 5-37).

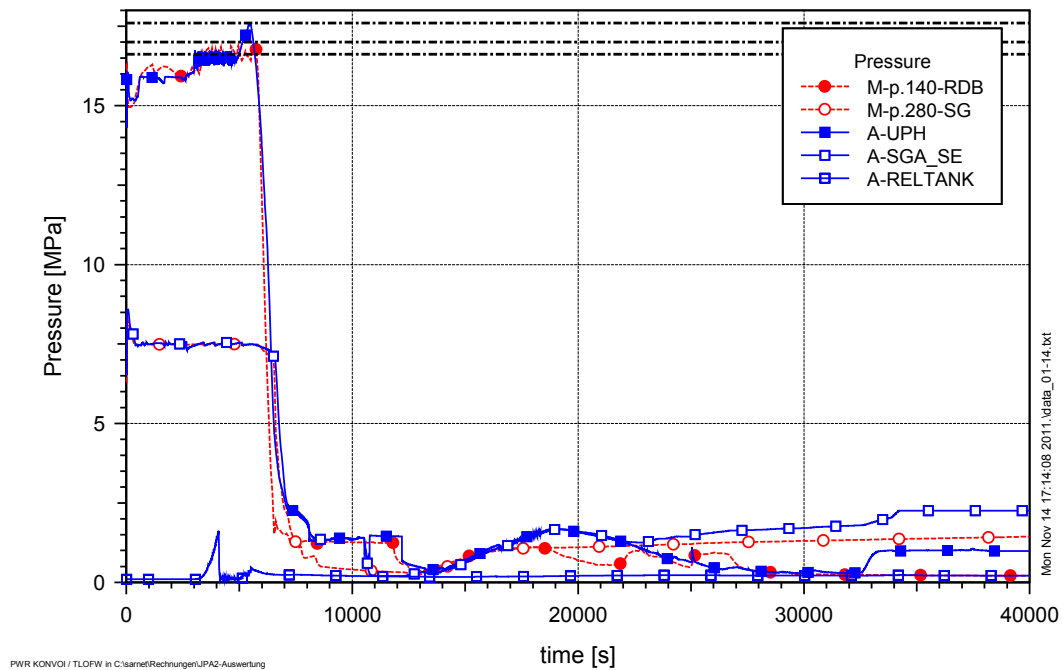


Abb. 5-35 Druck im Primär- und Sekundärkreislauf bei ASTEC (blau) und MELCOR (rot)

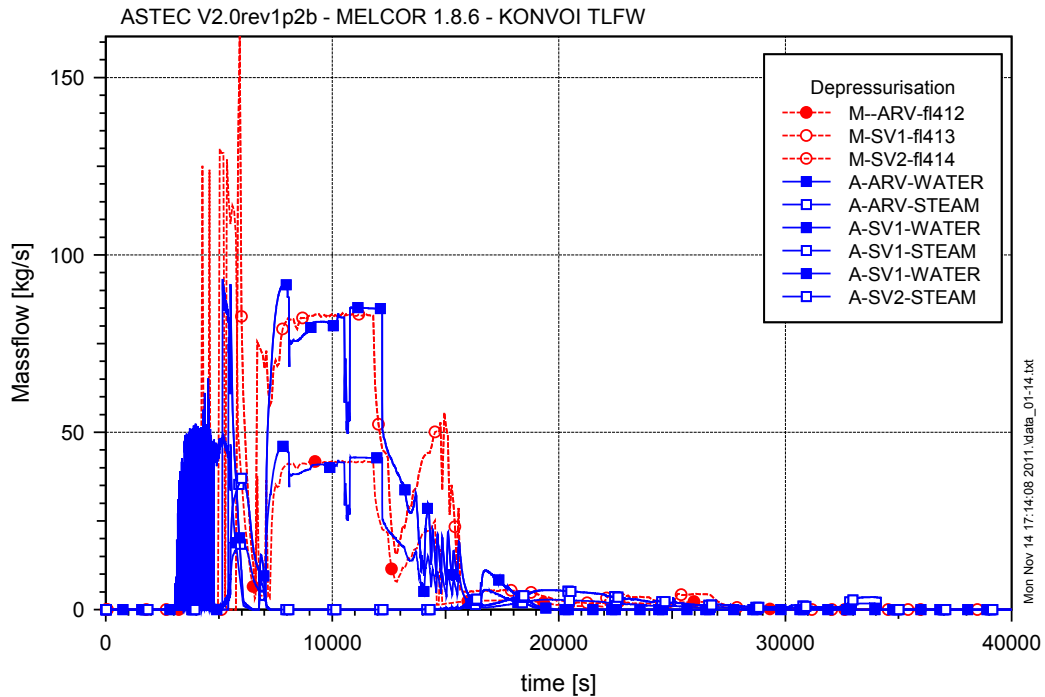


Abb. 5-36 Wasser- und Dampf-Massenströme über die Druckhalter Sicherheits- und Regelventile für ASTEC (blau) und MELCOR (rot).

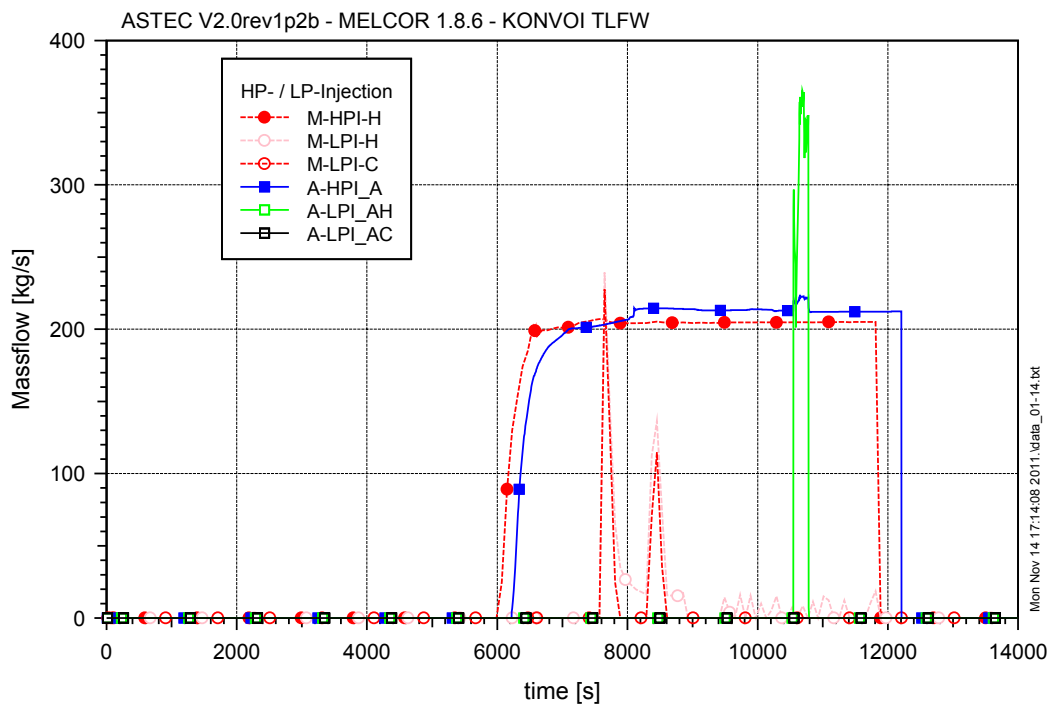


Abb. 5-37 Massenströme der Hochdruck- (HPI) und Niederdruck- (LPI) Sicherheitseinspeisung, für ASTEC und MELCOR.

Mit Leerläufen der Flutbehälter und unterstelltem Versagen der Sumpfschaltung fallen alle Einspeisesysteme schließlich aus, das Ausdampfen des Kerns setzt sich fort, so dass mit Freilegen der Kernstrukturen die Kernaufheizung einsetzt und nun nicht mehr begrenzt werden kann. Der Fortgang der Kernaufheizung und -zerstörung wird deutlich anhand der Wasserstofffreisetzung infolge Oxidation des Zirkoniums (Zr) der Hüllrohre sowie der Eisenstrukturen im Kernbereich (Abb. 5-38). In beiden Rechnungen ist der Zeitpunkt des Beginns der Oxidation und der damit verbundenen Temperatureskalation in guter Übereinstimmung errechnet. Auch dies stellt eine Verbesserung gegenüber früheren Rechnungen dar. Unterschiede lassen sich jedoch bei den Entstehungsursachen ausmachen. Neben der Freisetzung von Wasserstoff als Folge der Eskalation der Hüllrohr-Oxidation berechnet ASTEC einen deutlich stärkeren Anteil durch Oxidation der Stahlstrukturen im RDB. Dies ist teilweise auf Unterschiede in den Programmen selbst zurückzuführen. ASTEC berücksichtigt auch den Beitrag durch Oxidation der (äußeren) Kernumfassung. MELCOR hingegen kann diese äußere Kernstruktur (die als „Objekt“ im Modellpaket HS-Package definiert wurde) prinzipiell erst oxidieren, nachdem sie geschmolzen ist.

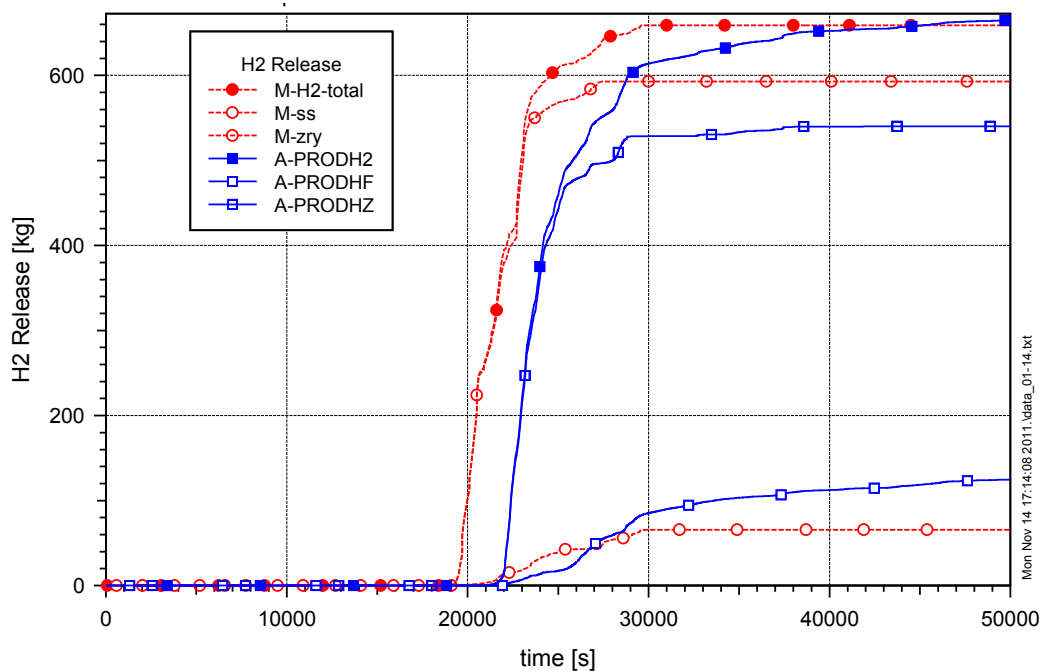


Abb. 5-38 Integral sowie durch Zr und Fe-Oxidation freigesetzte H₂-Masse

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die Rechnungen mit der Version ASTEC V2.0 eine deutliche Verbesserung hinsichtlich der Qualität der Rechnungsergebnisse erfahren haben, dabei wurde das Spaltproduktverhalten inkl. der Iodchemie noch nicht bewertet. Als weiterhin problematisch stellt sich die Stabilität der Rechnun-

gen dar. Hier wird eine Verbesserung mit der Verfügbarkeit der Version V2.1 erwartet, die sich durch eine Umstrukturierung von ICARE und insbesondere durch eine komplette Neuformulierung der Kopplung CESAR-ICARE auszeichnet.

WP4.3 AMEX hat insbesondere die Erweiterung von ASTEC auf SWR und CANDU-Reaktoren zum Ziel, bei dem die GRS sich hier allein auf die Erweiterung auf SWR konzentriert. Diese Arbeiten werden von 4 Partnern IRSN, GRS, KTH und IKE gemeinschaftlich durchgeführt, wobei KTH und IKE keine Arbeiten am Quellcode vornehmen können. GRS leitet gemeinsam mit IRSN dieses Arbeitspaket /CHA 11c/.

Die GRS hat dazu die Erkenntnisse aus ihren Arbeiten mit CESAR und CPA für die frühe Phase eines Störfalls eingebracht. Diese sind in Kap. 4.1 eingehend erläutert und zusätzlich in den entsprechenden SARNET2 Berichten dokumentiert. Die Arbeiten kommen nicht so schnell voran, wie ursprünglich geplant, weil die notwendige Verfügbarkeit einer neuen ICARE-Version sich verzögert. Hier sind zukünftig weiterhin umfangreiche Modifikationen am Modul ICARE selbst sowie an der Kopplung von ICARE mit dem Thermohydraulikmodul CESAR vorzunehmen, die allein von IRSN durchgeführt werden können.

5.3.2 ISTC

Im April 2002 wurde von der Europäischen Kommission und mehreren internationalen Staaten das "International Science and Technology Center" (ISTC) in Russland gegründet, das russischen Wissenschaftlern, die früher auf dem Gebiet der Waffentechnik tätig waren, die Möglichkeit geboten hat, ihr Wissen in den Dienst der friedlichen Nutzung der Kernenergie zu stellen. Später schlossen sich Wissenschaftler des „Science & Technology Center of Ukraine“ (STCU) an.

Die "Contact Expert Group on Severe Accident Management" (CEG-SAM⁵) ist ein von der Europäischen Kommission ins Leben gerufenes Gremium aus erfahrenen Wissenschaftlern auf dem Gebiet der schweren Störfälle, das zu den von den russischen Instituten gestellten Projektanträgen Empfehlungen im Hinblick auf eine Förderung durch die EU ausspricht. Dabei werden die Projektvorschläge speziell im Hinblick auf das Interesse der europäischen Forschergemeinschaft bewertet, was sich im Prinzip an den

⁵ <http://cegsam.grs.de/default.aspx>

Forschungsprioritäten in SARNET bzw. SARNET2 spiegeln lässt. Über die laufenden Aktivitäten in SARNET2 wurde auf den jeweiligen CEG-Sam-Meetings im Gegenzug ebenfalls berichtet.

Im Rahmen dieses Vorhabens erfolgte die aktive Beteiligung an den Treffen der CEG-SAM:

- Treffen-Nr. 15 in Villigen, Schweiz, 10.-12. März 2009
- Treffen-Nr. 16 in Moskau, Russische Föderation, 8.-9. September 2009
- Treffen-Nr. 17 in Madrid, Spanien, 29.-31. März 2010
- Treffen-Nr. 18 in St. Petersburg, Russische Föderation, 28.-30. September, 2010
- Treffen-Nr. 19 in Pisa, Italien, 14.-16. März 2011
- Treffen-Nr. 20 in Moskau, Russische Föderation, 11.-12. Oktober, 2011

Nach Beratungen auf verschiedenen CEG-SAM-Meetings wurden während der Laufzeit des Projektes die folgenden Empfehlungen für ISTC oder STCU-Projekte ausgesprochen:

- CEG-SAM Advice A-20 (3936), April 2009, “Study of fuel assemblies with boron carbide absorber rods under severe accident conditions in the PARAMETER-SF tests series”
- CEG-SAM Advice A-21 (STCU 4758), September 2009, “Natural and calculation-experimental research of processes of fuel melt interaction with construction materials for severe radiation accidents on nuclear power plants”
- CEG-SAM Advice A-22 (STCU 5243), December 2010, „Interaction Studies of Improved VVER Structural Materials at Severe Accident Conditions”

Die nachfolgende Tabelle gibt einen Überblick über wesentliche Projekte, die von der CEG-SAM befürwortet und zumeist von ISTC durchgeführt wurden.

Tab. 5-4 Von der CEG-SAM befürwortete ISTC-Projekte

Project Number	Project Acronym	Project Title
0064	ZirConCatcher	Design of a nuclear reactor core melt catcher on the basis of zirconia concrete
0833	METCOR	Investigation of Corium Melt Interaction With NPP Reactor Vessel Steel
0833.2	METCOR.2	Investigation of Corium Melt Interaction With NPP Reactor Vessel Steel
1648.2	VVER-QUENCH	Examination of VVER Fuel Behavior Under Severe Accident Conditions. Quench Stage
1950.2	CORPHAD	Phase Diagrams For Multicomponent Systems

			Containing Corium and Products of Its Interaction With NPP Materials
2916	CHESS		Development of the Models for Nuclear Fuel Behavior During Active Phase of the Chernobyl Accident
2936	REACTOR CORE MELTING		Modelling of Reactor Core Behaviour Under Severe Accident Conditions. Melt Formation, Relocation and Evolution of Molten Pool
3194	PARAMETER		Fuel Assembly Tests Under Severe Accident Conditions
3345	EVAN		Source Term Assessment at Ex-Vessel Stage of Severe Accident
3592	METCOR-P		Investigation of Corium Melt Interaction With NPP Reactor Vessel Steel
3635	VVER-VESSEL		Scale Experimental Investigation of the Thermal and Structural Integrity of the VVER Pressure Vessel Lower Head in Severe Accident
3690	PARAMETER-2		Study of Fuel Assemblies under Severe Accident Top Quenching Conditions in the PARAMETER-SF Test Series
3813	PRECOS		Phase Relations in Corium Systems
3831	LARGE MCCI	SCALE	Development and Experiments at Large-Scale Installation for Heating and Retention of Corium
3876	THOMAS		Thermo-Hydraulics of U-Zr-O Molten Pool under Oxidising Conditions in Multi-Scale Approach (Crucible - Bundle - Reactor Scales)
4207 (STCU)	CHERNOBYL SHELTER		Long Time Behavior of Chernobyl Fuel
K-1265	INVECOR		Experimental Study of the Processes at the Corium Melt Retention in the Reactor Pressure Vessel

Für das vorliegende Vorhaben war folgender ISTC-Projekte/Projektvorschlag insbesondere von Interesse:

- **Large-Scale Installation for Heating and Retention of Corium (Phase 1), # 3831**

Dieses Projekt dient zur Vorbereitung eines großmaßstäblichen Versuches (mit ca. 1200 kg Schmelze) zur 2D-Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Die vorgeschlagene alternative Beheizungstechnik sieht vor, dass die Schmelze durch periodischen Einwurf von Zirkonium in die Schmelze aufgrund der damit frei gesetzten Reaktionsenergie von innen beheizt wird. Dieses Vorhaben wird wegen seiner engen Verknüpfung zu Fragestellungen in SARNET (2D-MCCI) von der CEG-SAM hoch eingestuft und ist auch für die Entwicklung von COCOCSYS/ASTEC von großem Interesse. Bevor der Großversuch aber insgesamt bewilligt werden sollte, wurde zunächst die Machbarkeit der Beheizungstechnik in einem kleineren Versuch (me-

dium-scale, ~ 100 kg Schmelze ohne UO_2) demonstriert. Es wurde von CEA vorgeschlagen, in dem Vorversuch zur Demonstration der Machbarkeit einen LCS-Beton zu verwenden, bei dem das erwartete Ergebnis der Erosion einen isotropen Charakter hat. Die Phase 1 des Projektes wurde für 6 Monate bewilligt und lief von August 2009 - Januar 2010.

Das vorbereitende Experiment in mittlerem Maßstab wurde erfolgreich durchgeführt und in einem separaten Bericht dokumentiert. Es trat eine Erosion von 2-3 cm in axialer und vertikaler Richtung auf. Die Messtechnik hat sich bewährt. Die geplanten großskaligen Experimente konnten dennoch aus Kostengründen nicht mehr durchgeführt werden.

Auf den CEG-SAM Meetings wurden neben den Diskussionen zu den Ergebnissen der laufenden Projekte auch immer wieder Diskussionen zur Zukunft des ISTC geführt. Generell war die Finanzierung der EU in den letzten Jahren stark rückläufig:

- 2007: ~25 M€
- 2008: ~15 M€
- 2009: ~8 M€
- 2010: ~8 M€
- 2011: vorr. keine

Insgesamt wurden zwischen 2002 und 2011 14 ISTC Projekte gefördert, von denen 11 Ende 2011 abgeschlossen waren. Ein STCU Projekt wurde von Kanada finanziert. Seit 2009 wurden keine neuen Projekte mehr von der EU finanziert.

In 2011 hat Russland einseitig die Unterstützung für ISTC aufgekündigt, so dass damit auch die Arbeit des CEG-SAM mit dem 20. Meeting im Oktober 2011 in Moskau quasi beendet ist. Formen der zukünftigen Zusammenarbeit auch mit STCU wurden diskutiert, waren aber nicht abschließend festzulegen.

5.4 OECD

Die GRS verwendet für die in diesem Vorhaben durchgeführte Modellentwicklung Daten aus den OECD-Vorhaben OECD-BIP, OECD-MCCI2, OECD-PRISME2, OECD-THAI, die sie deswegen auch intensiv über die Teilnahme an den periodischen Treffen der Programme Review Groups (PRG) begleitet.

Die fachlichen Erkenntnisse aus den genannten OECD-Vorhaben und die Verwertung für die Modellentwicklung sind in den zugeordneten fachlichen Themenabschnitten ausführlich diskutiert:

- OECD-BIP: vgl. Abschnitt 2.2.1
- OECD-MCCI2: vgl. Abschnitt 3.2.1
- OECD-PRISME2: vgl. Abschnitt 5.1.1
- OECD-THAI: vgl. Abschnitte 2.1, 2.2 und 5.1.2

Der administrative Aufwand für die Begleitung der genannten OECD-Vorhaben inklusive des Reiseaufwandes und aller mit der PRG-Teilnahme verbundenen Tätigkeiten (wie die Erstellung von Beiträgen in Form von Präsentationen oder zu Berichten) ist über das Validierungsvorhaben der GRS zu COCOSYS und ASTEC (RS1190) abgedeckt.

5.5 Herausgabe einer neuen COCOSYS Version

Die in diesem Vorhaben vorgesehenen Programmergänzungen in COCOSYS wurden abgeschlossen, so dass nunmehr die COCOSYS Anwender-Version V2.4v0 eingefroren und herausgegeben werden kann. Im Unterschied zu V2.3 ist nun auch die Weitergabe des CCI-Hauptmoduls eingeschlossen. Da im Hinblick auf die Kopplung mit ATHLET-CD einige Routinen in ATHLET-CD modifiziert werden müssen, ist im Konfigurationsmanagement von COCOSYS die gesamte ATHLET-CD Version mit einbezogen. Hier ist zurzeit die aktuelle ATHLET-CD Version 2.2c (noch nicht freigegeben) enthalten. Im Rahmen des COCOSYS/ASTEC-Validierungsvorhabens RS1190 wurde die Visualisierung mit der aktuellsten ATLAS-Version 5.1 realisiert.

Vor der Freigabe der neuen COCOSYS-Version sind die festgelegten Regressions-tests durchgeführt worden (siehe Kap. 5.6). Zielsetzung dabei war es, auftretende unterschiedliche Ergebnisse im Vergleich zu der Version V2.3 zu identifizieren und zu klären. Um gleichwertige Ergebnisse auf unterschiedlichen Rechnerplattformen bzw. mit unterschiedlichen Optimierungsstufen für die Codeerzeugung zu erhalten wird nun im Intel Visual FORTRAN Compiler V11 bzw. V12 die Compileroption „/fp:source“ verwendet (Einfluss auf die Berechnung von Gleitkommazahlen). Identifizierte Unterschiede, z. B. im Hinblick auf den Wärmeübergang oder durch Änderungen/Erweiterungen

im Iodmodell oder für MCCI wurden geklärt und sind im Bericht zum Regressionstesten dokumentiert. Eine Freigabe der Anwenderversion V2.4v0 erfolgt in engem zeitlichen Bezug zum Abschluss des Vorhabens.

Das COCOSYS User Manual ist nun vollständig für die Verwendung mit MS-Word umgestellt und wurde für die neue Version V2.4 aktualisiert. Ebenso stehen aktuelle Implementation und QA Manuals und ein sogenanntes Assessment-Manual (erstellt im Rahmen des COCOSYS/ASTEC-Validierungsvorhabens RS1190) zur Verfügung. Die Umstellung des Referenz-Handbuchs nach MS-Word und seine Komplettierung sind dagegen noch nicht vollständig. Hier werden noch die Reference Manual Version V1.2 sowie in einem separatem Dokument die Ergänzungen für V2.4 verwendet. Die Manuals werden im Folgevorhaben laufend aktualisiert bzw. umgestellt und ergänzt.

5.6 Qualitätssicherung

Kernpunkte der Arbeiten zur Qualitätssicherung sind das Konfigurations- und Änderungsmanagement sowie das Regressionstesten. Die dazugehörigen Dokumente werden auf den ASTRID/COCOSYS-Websites veröffentlicht, zu denen registrierte COCOSYS Nutzer Zugang haben.

Für die aktuelle COCOSYS-Anwenderversion V2.3 ist ein Änderungsmanagement durchgeführt worden. Zielsetzung des Änderungsmanagements ist es, Nutzer frühzeitig auf mögliche Probleme in COCOSYS hinzuweisen und Änderungen nachvollziehbar zu dokumentieren. Eingehende Fehlermeldungen wurden erfasst und korrigiert. Der aktuelle Status kann in der veröffentlichten Fehlerliste auf der ASTRID/COCOSYS-Website eingesehen werden.

Das Konfigurations- und Änderungsmanagement wurde im laufenden Vorhaben – wie in /SPE 09/ dargelegt – mittels des Werkzeuges CVS /CED 92/ weiter durchgeführt. Alle Änderungen im COCOSYS-Programmsystem sind damit nachvollziehbar. Diese Informationen werden insbesondere für die Übertragung von Änderungen bzw. Ergänzungen nach ASTEC benutzt.

Ziel der Regression-Tests ist es einerseits, Verbesserungen im Programm zu zeigen (verbesserte oder neue Modelle wie AIM3 oder MEDICIS), und andererseits Software-Fehler zu identifizieren, die sich durch die Weiterentwicklung von Modellen im Vergleich zu früheren Versionen eingeschlichen haben können. Diese können in einzelnen

integrierten Modellen, aber auch erst im Zusammenspiel mehrerer Modelle auffällig werden.

Um die Qualität des Codes zu gewährleisten, wird für das Regressionstesten ein Teil der Experimente genutzt, die auch zur Validierung von COCOSYS herangezogen werden. Es handelt sich um Experimente, die gut geeignet sind, den Überblick über das entsprechende Themenfeld darzulegen, sowie ergänzend um Anwendungen auf Reaktorszenarios. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass sich der Modellfortschritt bei Einzel-Modellen in den zugehörigen Experimentnachrechnungen isoliert überprüfen lässt, während mit den Anlagenrechnungen das Zusammenspiel vieler implementierter Modelle untersucht werden kann. Die Güte der Einzelmodelle lässt sich aber nur an den Nachrechnungen zu Experimenten beurteilen, da dort Experimentaldaten vorliegen.

Tab. 5-5 gibt einen Überblick über die Rechenfälle, die derzeit für das Regressions-Testen genutzt werden. Dabei werden die Rechnungen sukzessiv mittels eines Python-Skriptes gestartet und nach Abschluss der Rechnungen werden die Ergebnisplots automatisch erstellt und in ein MS Word Dokument verlinkt. Eine ausführliche Dokumentation zum Regressionstesten wird mit COCOSYS V2.4v0 zusammen ausgeliefert /BAK 12/.

Tab. 5-5 Rechnungen zum Regressions-Testen. Grün beschriftete Experimente sind erstmals im Bericht, gelb hinterlegte Fälle sind neu in die Testmatrix aufgenommen

Themengebiet	Experimente / Anlagen	Status
Thermohydraulik	BMC F2	✓
	HDR T31.5	✓
	HDR E11.4	✓)
	THAI TH7	✓
	THAI TH10	Nodalisierung muss optimiert werden
	THAI TH13	✓
Druckabbausysteme	GKSS M1	✓
	EREC BC V-213 LB LOCA T1	✓
	EREC BC V-213 SLB-G02	✓
Sprühsysteme	HDR E11.1	✓
	MISTRA MASP1	✓
Passive Systeme	PANDA BC4	✓
Aerosolverhalten	BMC VANAM-M3	✓
	Poseidon PA20	✓
	KAEVAR K148	✓
	KAEVAR K187	✓

Iod-Chemie	THAI Iod11	✓
	THAI Iod 9	✓
	ISP41 PHEBUS RTF 1	✓
MCCI	ACE L6	✓
Anlagen Szenarien	KONVOI	in Arbeit
	SWR-72	✓
	WWER-1000	✓
	WWER-440/213	✓
	RBMK-1000	✓

In /BAK 12/ sind die Testfälle ausführlich dargelegt. Zur Beurteilung des Entwicklungsfortschritts wurde die aktuelle COCOSYS-V2.4-Entwicklerversion mit der vorhergehenden Anwenderversion (V2.3v9) verglichen. Zum ersten Mal ist mit Linux ein weiteres Betriebssystem in das Regressionstesten aufgenommen worden, um die Portabilität von COCOSYS zu prüfen. Die Rechnung unter Linux wurde aber erst für eine Anlagenrechnung (Konvoi) auf die Übereinstimmung mit der unter Windows durchgeführten Rechnung hin überprüft.

Im Unterschied zu alten Versionen werden nun in der COCOSYS-Version 2.4 zu Beginn der Rechnungen (d. h. beim Einlesen der Daten) umfangreichere Tests sowie Konsistenzüberprüfungen durchgeführt, ob z. B. Eingabewerte des Datensatzes sinnvoll sind oder ob basierend auf Erfahrungen aus der Anwendung die Wahl von Anfangs- und Randbedingungen sowie Modellparametern im Datensatz zu unrealistischen Ergebnissen führen kann.

So wird z. B. eine „Struktur“ in COCOSYS in mehrere Schichten (Layer) unterteilt. Auf Grund des angewendeten Lösungsverfahrens sind bestimmte Regeln für die Wahl der Schichtdicken einzuhalten, z. B. für die Übergänge zwischen verschiedenen Materialien einer Struktur (abhängig von Eigenschaften wie die Wärmekapazität, die Wärmeleitfähigkeit) oder für die äußeren Schichten, die besonders stark an die thermischen Vorgänge in der Zone gekoppelt sind. Insbesondere die äußersten Schichten dürfen weder zu dünn (numerische Stabilität der Lösung) noch zu dick sein (Genauigkeit der berechneten ersten Schichttemperatur, die zugleich als Oberflächentemperatur verwendet wird). In vielen Rechnungen externer Anwender hat sich gezeigt, dass hier oftmals zu grob nodalisiert wird. Deshalb wird jetzt in COCOSYS-V2.4 auf Basis der Materialeigenschaften die vom Nutzer definierte Schichtdicke überprüft. Weitere neue Überprüfungen betreffen die Einspeisetabellen (z. B. mögliche Enthalpiewerte von Wasser und Dampf). Im Hinblick auf die Konsistenz des Eingabedatensatzes sollte z. B. bei einer

Strömungsverbindung die Fläche, die für den Aerosolslip genutzt wird, nicht größer sein als die Fläche, die dem atmosphärischen Austausch zur Verfügung steht.

Solche Regeln sollen Eingabefehler verhindern und den Nutzer auf den neuesten Erkenntnisstand hinweisen. Sie führen aber auch dazu, dass im Regressionstesten einige der alten Datensätze im unveränderten Zustand zunächst nicht lauffähig waren. Im Fall des Konvoi-Datensatzes musste sogar der gesamte Datensatz gegen eine aktualisierte Version getauscht werden, da der mit COCOSYS-V2.3v9 gut funktionierende Datensatz nach den notwendigen Anpassungen zu numerischen Schwingungen führte.

In einigen Fällen musste zuerst eine aufwendigere Analyse des Datensatzes durchgeführt werden, um einen erfolgreichen Durchlauf mit der neuen COCOSYS Version zu gewährleisten. Hier muss zukünftig noch diskutiert werden, ob diesbezüglich eine Art Update-Guide notwendig ist oder die Ausgabe von Warnungen durch COCOSYS eine befriedigende Lösung wäre.

Nicht alle Probleme, die identifiziert wurden, konnten sich durch Korrekturen im Datensatz lösen lassen. Beispiele sind das Auftreten kritischer Geschwindigkeiten z. B. bei der Simulation von Leckagen (bei erhöhtem Containmentdruck und einem Druckverhältnis Umgebung/Containment kleiner 0,55) und dadurch verursachte kleine Integrationsschrittweiten (d. h. lange Rechenzeiten). Die Probleme der zu hohen Strömungsgeschwindigkeiten in Leckage-Verbindungen können durch die Verwendung des ORIFICE-Modells für die Verbindung umgangen werden.

Der vom Kondensationsmodell berechnete Wärmeübergang wurde in der COCOSYS-Version V2.4 korrigiert. So wird nun für den Wärmeübergang zwischen Film und Wand für größere Kondensationsraten der Übergang zum turbulenten Film berücksichtigt. Dies führt dazu, dass der Wärmeübergang bei hohen Kondensationsraten und hohen Dampfgehalten (> 90 Vol.-%) nun deutlich höher ist. Ebenso wurden die Korrekturen für die Simulation der Rückverdampfung vorgenommen. Dies führt zu Unterschieden in den Ergebnissen, welche im Regressionsbericht dokumentiert und begründet werden. Als Beispiel hierzu aus dem Regressionstesten zeigt der Vergleich, dass die WWER-1000-Rechenergebnisse mit der aktuellen Entwicklungsversion und der Vorgängerversion nahezu identisch sind. Kleine Unterschiede machen sich nur in den Maximalwerten des Drucks und der Temperatur im Bruchraum bemerkbar (Abb. 5-39). Diese können durch die unterschiedlichen Werte der Wärmeübertragungskoeffizienten an den Wärmestrukturen erklärt werden.

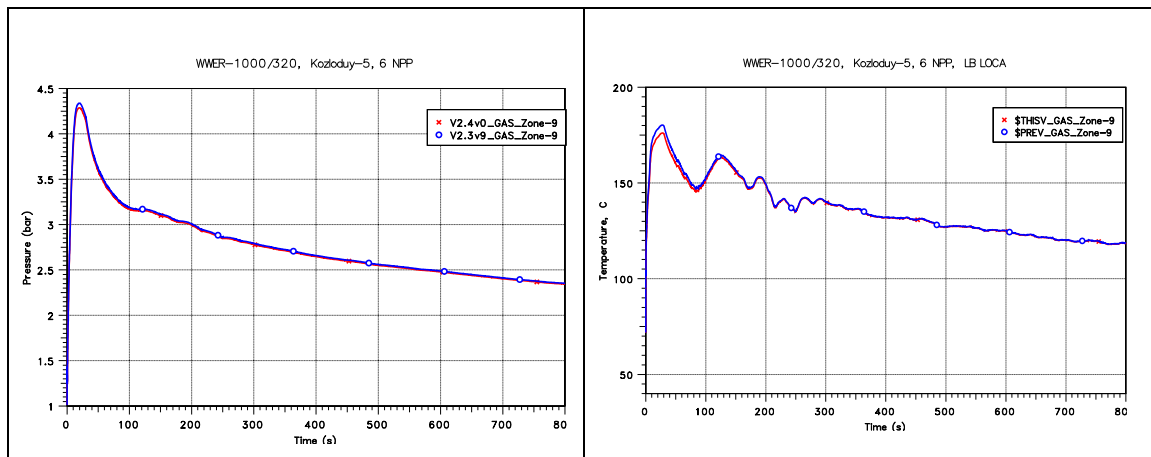


Abb. 5-39 Drücke (links) und Temperaturen (rechts) im Bruchraum der WWER-1000-Anlage

Ein weiteres Beispiel sind die Abweichungen zwischen den beiden COCOSYS-Versionen in Bezug auf die Atmosphären- und Wassertemperatur in der Zone, die die Kondensationskammer des Störfalllokalisierungssystems von RBMK-1000-Anlagen simuliert (im Zeitintervall von 50 s bis 1000 s, Abb. 5-40). Der Grund für die Temperaturunterschiede in dieser Zone war ein Programmierfehler bei der Modellierung der Querströmung durch die SUMP_BAL-Verbindungen in der vorherigen COCOSYS-Version V2.3v9. Deshalb war der Massenstrom durch diese Sumpferbindung wesentlich höher, was zu einer besseren Durchmischung des Wassers in den beiden Teilen des Druckabbausystems führt. Die aktuelle COCOSYS-Entwicklungsversion zeigt eine geringere Durchmischung des Wassers durch die Konvektionsströmung in der Verbindung, was zu höherer Wassertemperatur im linken Teil des Druckabbausystems führt. Dadurch ist die Verdampfungsrate an der Wasseroberfläche des Druckabbausystems jetzt höher mit entsprechenden Auswirkungen auf die Atmosphärentemperatur.

Im Hinblick auf das Aerosolverhalten im Druckabbausystem der RBMK-1000-Anlage zeigt COCOSYS V2.4 eine größere Aerosolmasse im Wasser des Druckabbausystems und somit eine geringere Aerosolkonzentration in der Atmosphäre der Druckabbausystems (**Abb. 5-41**). Grund dafür sind Änderungen im SPARC-Modell (Pools Scrubbing) in der neuen COCOSYS-Version, wodurch jetzt die berechnete Aerosolablagerung im Wasser größer ist (vollständige Rückhaltung von Aerosol/Spaltprodukten im unterkühlten Wasserpool bei reiner Dampfströmung).

RBMK-1000, SNPP3 NPP, PH rupture

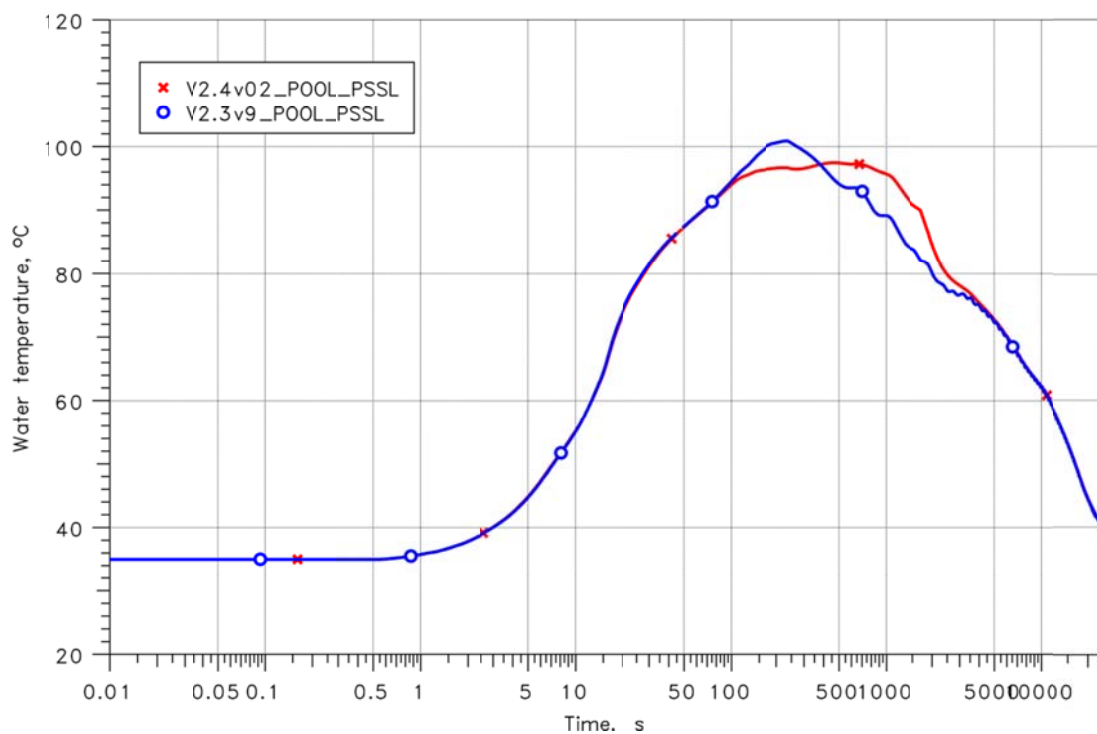


Abb. 5-40 RBMK-1000: Vergleich der berechneten Sumpftemperatur im linken Druckabbausystem

RBMK-1000, SNPP3 NPP, PH rupture

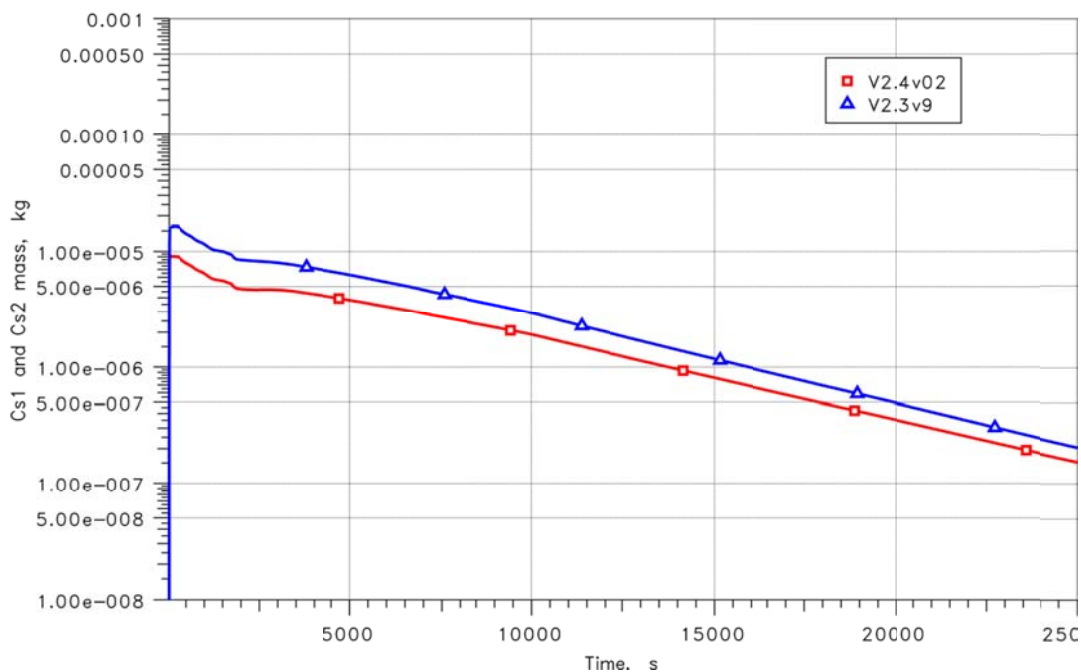


Abb. 5-41 RBMK-1000: Vergleich der Aerosolmassen in der Atmosphäre des Druckabbausystems

Zur Überprüfung der Modellierung von Sprühsystemen des Sicherheitsbehälters wurde der HDR Versuch E11.1 nachgerechnet. Bei diesem Versuch wurde der Einfluss von Innensprühen auf die Verteilung eines Leichtgasgemisches aus H_2 und He untersucht. Im Vergleich zu der älteren COCOSYS-Version V2.3v9 zeigt COCOSYSV2.4 etwas höhere He/H_2 -Konzentrationen im oberen Dombereich für den Zeitraum von 20 bis 24 h. Die neue COCOSYS-Version zeigt hier eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Im unteren Bereich des Sicherheitsbehälters sind die Abweichungen zwischen den beiden COCOSYS-Versionen etwas größer. Hier stimmen die mit der V2.4 berechneten He/H_2 -Konzentrationen ebenfalls besser mit dem Experiment überein (Abb. 5-42).

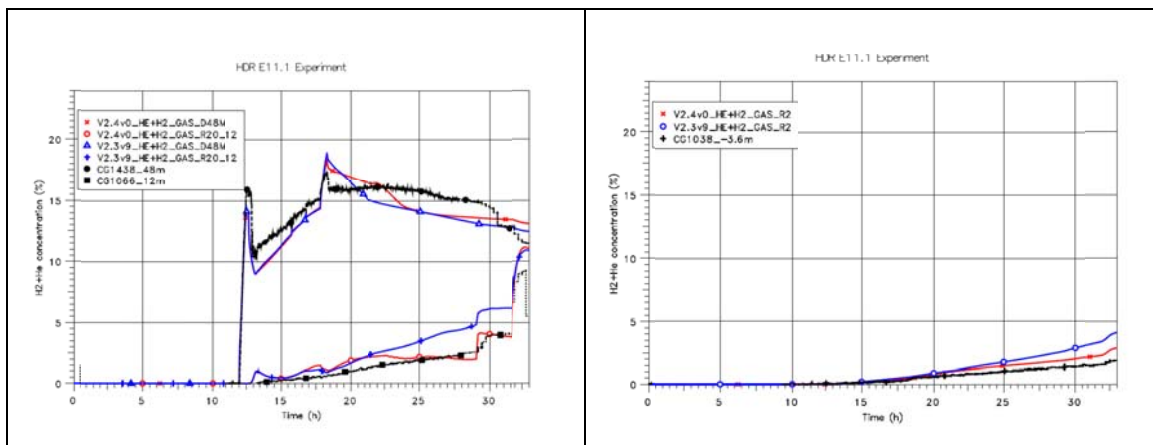


Abb. 5-42 HDR E11.1: H_2/He -Konzentration in verschiedenen Zonen

6 Zusammenfassung

Die im abgeschlossenen Projekt RS1185 durchgeführten Arbeiten stellen eine Fortführung des durch das BMWi geförderten Vorhabens RS 1159 der GRS zur Weiterentwicklung der Rechencodes COCOSYS und ASTEC für die Simulation von Stör- und Unfallabläufen in LWR dar. Beide Codes verzeichnen eine sehr große fachliche Anerkennung und internationale Akzeptanz. Dieser Stand wurde mit dem durchgeführten Arbeiten erhalten und ausgebaut.

In Kapitel 2 des Berichtes wurden die Arbeiten zur Neuformulierung von Modellen im Modul AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten in COCOSYS beschrieben. Die in der Projektbeschreibung definierten Entwicklungsziele wurden erreicht. Auf einzelne Details dieser Modellentwicklung und auch den in Kapitel 3 des Berichtes beschriebenen Arbeiten zur Verbesserungen von Modellen für das Schmelzeverhalten im Sicherheitsbehälter in COCOSYS wird nachfolgend zusammenfassend eingegangen. Darüber hinaus werden nachfolgend wesentliche Erkenntnisse aus den in Kapitel 4 beschriebenen Arbeiten zur Modellentwicklung für ASTEC zusammengefasst.

Ein weiterer wesentlicher Teil der Arbeiten im Vorhaben wurde im Kapitel 5 beschrieben und betrifft Querschnittsaktivitäten, wie z. B. die aktive Beteiligung an internationalen Projekten, wie SARNET2, experimentellen OECD-Vorhaben (THAI, MCCI, BIP, PRISME) und ISTC. Insbesondere durch die Beteiligung an den experimentellen OECD-Vorhaben konnten wertvolle Daten ausgewertet und Erkenntnisse gewonnen werden, die für die Modellentwicklung aber auch die Validierung von großem Interesse sind. Durch die aktive Beteiligung an SARNET2, hier im Arbeitspaket WP4 bezüglich der ASTEC-Weiterentwicklung, wurden auch dort wertvolle Erkenntnisse erzielt, die in die Projektarbeit eingeflossen sind. Ein nicht zu vernachlässigender Aufwand wurde auch in die Qualitätssicherung bei der Modellentwicklung für ASTEC und COCOSYS gesteckt. Dies zeigt sich in sehr guten Ergebnissen beim Regressionstesten mit den Codes (siehe Kapitel 5.6).

6.1 Arbeiten zu COCOSYS

COCOSYS ist in mehrere sogenannte Hauptmodule aufgeteilt (siehe Abb. 2-1 auf Seite 5). Jedes Hauptmodul ist ein eigenständig ausführbares Programm, zuständig für einen bestimmten Bereich der Gesamtproblematik. In dem durchgeführten Vorhaben wurden die nachfolgend beschriebenen wesentlichen Projektziele bezüglich der Wei-

terentwicklung von COCOSYS erreicht. Die Beschreibung erfolgt zugeordnet zu den einzelnen Modulen des Programmes zur Charakterisierung des erreichten Standes von Wissenschaft und Technik.

6.1.1 Modul THY – Simulation der Thermohydraulik

In den Sicherheitsbehältern deutscher Druckwasserreaktoren sowie in der Druckkammer bei SWR der Baulinie 72 wurden im Rahmen von Maßnahmen des Anlageninternen Notfallschutzes **Passive Autokatalytische Rekombinatoren** (PAR) installiert, um bei Ereignisabläufen mit Kernschmelzen den in den Sicherheitsbehälter freigesetzten Wasserstoff katalytisch zu Wasserdampf abzubauen und Verbrennungsvorgänge, die dessen Integrität gefährden, zu verhindern. Neuere Erkenntnisse aus Experimenten an der THAI-Anlage im Vorhaben OECD-THAI sowie aus der Anwendung von Modellen zeigen, dass die Reaktionskinetik innerhalb von Rekombinatoren nicht nach einem Arrhenius-Ansatz verläuft, sondern durch die Diffusion von Wasserstoff an die katalytischen Platten bestimmt wird. Daher wurde die Reaktionskinetik des Rekombinatormodells (AREVA- bzw. AECL-Typ) in COCOSYS von dem ursprünglichen Arrhenius- auf einen Diffusionsansatz umgestellt /NOW 10/. Die Nachrechnung der hierzu aus dem OECD-THAI-Vorhaben (HR-Versuchsserie) vorliegenden Versuche zeigen mit dem geänderten Rekombinatormodell in COCOSYS sehr gute Ergebnisse. Dies gilt auch für die Nachrechnung älterer Versuche, die bisher verwendet wurden /NOW 10/.

Neben diesen Arbeiten erfolgten auch Arbeiten zur Verbesserung der Simulation von **H₂-Verbrennungsvorgängen** bzw. insbesondere der **Flammenausbreitungsvorgänge** zwischen gekoppelten Raumbereichen im Sicherheitsbehälter. Die Entwicklungsarbeiten dazu erfolgten unter der ASTEC-Umgebung und sind im Abschnitt 4.3 beschrieben. Das Modell wurde identisch nach COCOSYS übertragen. Die Tests dazu wurden im Validierungsvorhaben der GRS durchgeführt.

Konventionelle Brände können eine ernsthafte Gefahr der Sicherheit von Reaktoranlagen darstellen. COCOSYS wurde sukzessive für die Simulation derartiger Brände erüchtigt. Die Beteiligung der GRS am experimentellen Vorhaben OECD-PRISME und -PRISME2 Vorhaben gestattet es, weitere experimentelle Daten zur Überprüfung des **Pyrolyse**-Modells in COCOSYS zur Simulation von Phänomenen bei Verbrennungsprozessen zu bekommen und Erfahrungen dabei auszutauschen /KLE 10/. Die Erfahrungen hieraus wurden im Vorhaben genutzt, um das vorhandene COCOSYS-Modell

zur Berechnung der Pyrolyse-Rate im Hinblick auf die Berücksichtigung von Sauerstoffarmut sowie der Rückstrahlung heißer Gasschichten in geschlossenen Räumen zu verbessern. Weitere Entwicklungsarbeiten sind z. Zt. nicht vorgesehen, können sich jedoch aus dem Validierungsvorhaben und der fortgesetzten Beteiligung an OECD-PRISME2 ergeben.

Zur Simulation der Vorgänge beim **Schmelzeaustrag unter hohem Druck im RDB in die Reaktorgrube und die angrenzenden Raumbereiche (Direct Containment Heating – DCH)** steht in COCOSYS aus vorlaufenden Entwicklungsarbeiten eine spezielle Modellerweiterung zur Verfügung /SPE 06/. Ein zentraler Parameter für den Einfluss von DCH-Phänomenen auf die Thermohydraulik im SB ist die Frage der Intensität der Rückhaltung ausgetragener Schmelze in der Reaktorgrube bzw. im Umkehrschluss des Austrages von Schmelze aus der Reaktorgrube in angrenzende große Raumbereiche des SB mit der Gefährdung von dessen Integrität. In diesem Vorhaben wurde eine Korrelation entwickelt, mit Hilfe derer der Austrag von Schmelze aus der Reaktorgrube in andere Bereiche des SB mit dem DCH-Modell in COCOSYS berechnet werden kann. Das Modell wurde anhand von Experimenten in der DISCO-Anlage beim Karlsruher Institut für Technologie erfolgreich überprüft /SPE 10/. In ASTEC ist begonnen worden, DCH-Modelle in Anlehnung an COCOSYS zu erweitern. Diese Arbeiten werden im Nachfolgevorhaben fortgesetzt.

6.1.2 Modul AFP - Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens

In diesem Vorhaben wurde das Konzept für eine **Umstrukturierung des Moduls für die Simulation des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens AFP in COCOSYS** weiterentwickelt und eine detaillierte Spezifikation dazu dokumentiert. Es wurde begonnen, dieses Konzept technisch umzusetzen. Es ist in Form von Programmkodierung und Algorithmen weit fortgeschritten, aber noch nicht abgeschlossen. Eine wesentliche Zielsetzung dieser Arbeit ist die konsistente Bilanzierung von Aerosolen und Spaltprodukten in einer zukünftigen COCOSYS-Version, deren Verhalten innerhalb des SB durch unterschiedlichste Vorgänge, wie z. B. Ablagerungsprozesse (Sedimentation, Diffusiophorese und Thermophorese), Transportprozesse wie Abwaschen (Transport im Wasserfilm, Ablagerung in Wasservorlagen, Transport in Zusammenhang mit Drainage) und Transport in atmosphärischen Verbindungen bestimmt wird. Aus diesem Grund kommen unterschiedlichste Teilmodelle für die Simulation des Gesamtverhaltens zum Einsatz, wobei die Bilanzierung jedoch zentralisiert, d. h. nicht in den Teilmo-

dellen, vorgenommen werden muss. Im neuen Konzept werden sämtliche Spezies in einer sogenannten Baumstruktur dargestellt und zentralisiert verwaltet. Dieses Konzept ist ausführlich in einem separaten Fachbericht dargelegt /KLE 12a/. Die Programmkodierung muss für noch fehlende Unterprogramme entsprechend des vorliegenden Konzeptes im Nachfolgevorhaben vervollständigt werden.

Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt lag auf den **Modellverbesserungen von quellterm-relevanten Phänomenen**. Ein Großteil der in den Sicherheitsbehälter freigesetzten aerosol- und gasförmigen Spaltprodukte wird durch natürliche Prozesse auf Boden- und Wandflächen abgelagert. Kondensiert Dampf an Wänden oder sammelt sich Wasser auf den Böden an, so kann ein größerer Teil der abgelagerten Spaltprodukte von der Oberfläche abgewaschen und mit dem ablaufenden Kondensat in tieferliegende Wasservorlagen (z. B. Sumpf beim DWR) transportiert werden. Dieser „**Abwaschprozess**“ hat Einfluss auf die Verteilung/Umverteilung der Nachzerfallswärme der radioaktiven Aerosole im Sicherheitsbehälter und somit auf die Konzentration der Spaltprodukte in Wasservorlagen. Der Einfluss auf den Spaltprodukt-Quellterm ist z. B. über die Konzentration der Spaltprodukte in Wasservorlagen gegeben, wenn dieses Wasser bei SB-Versagen in die Umgebung freigesetzt werden kann. Wesentlich ist auch, ob der Sumpf im SB durch den verstärkten Eintrag von Aerosolen früher zum Sieden kommt. Neuere Hinweise dazu hat der Unfallablauf in den Kraftwerken am Standort Fukushima erbracht. In diesem Vorhaben wurde das neue Abwaschmodell AULA für COCOSYS entwickelt. Dieses beschreibt das Abwaschen der Aerosolpartikel in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit des Kondensats (Wasserfilm oder Rinnsal), der Orientierung der Strukturen und der Löslichkeit der Aerosole. Lösliche Aerosole und Iod werden i. d. R. gut abgewaschen. Unlösliche Aerosole werden tendenziell wesentlich schlechter abgewaschen. Weitere geplante Experimente an der THAI-Anlage werden den Wissensstand hierzu noch verbessern und für die Modellweiterentwicklung und Validierung genutzt. Für lösliche Aerosole wird im Modell angesetzt, dass sie sich schnell und vollständig im Kondensat auflösen. Weitere Verbesserungen, insbesondere auch bezüglich des Modells für nicht-lösliche Aerosole, sind nötig. Die drei Teilm Modelle („Abwaschen“ für unlösliche Aerosole, lösliche Aerosole und Iod) sollen im anschließenden Entwicklungsvorhaben unter Berücksichtigung von möglichen unterschiedlichen Strömungsformen in allen drei Modellen verbessert und zusammengeführt werden. Die neuen Bilanzierungsstrukturen im umstrukturierten Modul AFP sollen dabei zur Anwendung kommen.

Zur Beschreibung des **Iodverhaltens** wurde das Modell für die Ablagerung von Iod auf trockenen Stahlflächen überarbeitet sowie ein Modell für die Ablagerung von Iod auf Farbanstrichen unter nassen Bedingungen ergänzt. Neue Erkenntnisse zu diesem Thema werden aus dem Projekt OECD-BIP2 („Behaviour of Iodine Project“) erwartet, an dem die GRS beteiligt ist, und sollen zukünftig in die Modellierung einfließen.

6.1.3 Modul CCI – Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung

In COCOSYS steht das Modell MEDICIS für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der Reaktorgrube zur Verfügung. Der aktuelle internationale Forschungsschwerpunkt hierzu liegt auf der Beschreibung von **MCCI in 2D** (Erosion der Reaktorgrube in axialer und radialer Richtung) sowie auf Phänomenen im Zusammenhang mit der möglichen Abfolge von Schichtungsvorgängen in der Schmelze. Zur Interpretation der aktuellen Versuche (OECD-MCCI2, VULCANO) wurden verschiedene Modelloptionen getestet und Erkenntnisse mit internationalen Experten diskutiert. Mangels eindeutiger experimenteller Hinweise zur Erklärung der beobachteten Anisotropie bei der Betonerosion im Falle eines silikatischen Betons verlagert sich die internationale Modellierungsstrategie, wie von der GRS vorgeschlagen, stärker auf eine empirische Beschreibung von Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Schmelze und Beton. Die von der GRS in diesem Kontext aus den Experimenten ermittelten Wärmeübergangszahlen für den Wärmeübergang zwischen Schmelze und Beton ergeben in Nachrechnungen mit MEDICIS akzeptable Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen. Ähnliche Wärmeübergangszahlen werden auch von anderen Instituten (IRSN, VTT) in ihren Analysen mit gutem Erfolg verwendet, was den von der GRS eingeschlagenen Weg bestätigt. Die Arbeiten dazu werden fortgesetzt. Als Schlussfolgerung des Abschlussseminars zum Projekt OECD-MCCI2 wurde der CSNI-Sitzung empfohlen, einen State-of-the-Art-Bericht zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung zu verfassen. Die Aktivität wird von der WGAMA aufgegriffen und die GRS wird sich daran im Anschlussvorhaben aktiv beteiligen und ihre Erfahrungen aus der Modellentwicklung einbringen.

Für die **Freisetzung von Spaltprodukten** aus der Schmelze im Reaktorkern gibt es in ASTEC bereits das Modul ELSA /PLU 03/. Die Methodik von ELSA für die Freisetzung aus einem Schmelzpool wurde kürzlich von VEIKI, Ungarn, auf die Freisetzung während der Schmelze-Beton-Wechselwirkung erweitert, da ein derartiges Modell in MEDICIS fehlte und lediglich die Erosion mit dem ASTEC-Modul MEDICIS gerechnet

wird. Dieses Modell ist in diesem Vorhaben ebenfalls in COCOSYS-MEDICIS übernommen worden.

Zielsetzung von Maßnahmen des Anlageninternen Notfallschutzes ist u. a. die langfristige Kühlung der Schmelze im SB. Dazu wird u. a. ein Fluten der Schmelze in der Reaktorgrube erwogen. Zur Simulation des Wärmeübergangs zwischen Schmelze und Wasser im Falle einer möglichen **Flutung der Schmelze von oben** ist in Analogie zum U.S. Rechenprogramm CORCON ein Verdampfungsmodell basierend auf der Siedekurve von Wasser in MEDICIS eingebaut und getestet worden. Das Modell berücksichtigt auch das Anwachsen einer Kruste und ist erfolgreich auf Experimente mit Flutung einer Schmelze von oben angewandt worden.

In allen Punkten zum CCI-Modul sind Rückwirkungen aus den noch laufenden Experimentalprogrammen sowie aus dem parallel laufenden bzw. geplanten Validierungsvorhaben zu erwarten. Es ist vorgesehen, diese Rückwirkungen im Anschlussvorhaben aufzugreifen.

6.2 Arbeiten zu ASTEC

ASTEC liegt aktuell in der Version ASTEC V2.0 Revision 2 vor und besteht aus mehreren Modulen (siehe Abb. 4-1, Seite 108). Bezüglich der Entwicklung/Bereitstellung von Modellen für ASTEC wurden von der GRS in diesem Vorhaben Arbeiten zu folgenden Themen durchgeführt:

- Ertüchtigung/Erweiterung der ASTEC-Modelle für SWR (Module CESAR/ICARE)
- Erstellung eines Flammenfrontmodells für die H₂-Verbrennung (Modul CPA-FRONT)
- Einbau eines DCH-Modells basierend auf COCOSYS (Module CPA, RUPUICUV)
- Bereitstellung einer Methodik für die Prognose des Versagens der Hauptkühlmittelleitungen (Modul CESAR)
- Verbesserung der Anbindung des Analysesimulators ATLAS

Nachfolgend werden die durchgeführten Arbeiten zu den genannten Themen zusammengefasst.

6.2.1 Modul CPA – Thermohydraulik im Containment

Das COCOSYS-Modell zu **DCH (Direct Containment Heating)** ist erfolgreich – teils sogar in blinden Rechnungen – an den DCH-Experimenten in der Karlsruher DISCO-Anlage überprüft worden. Mit IRSN ist vereinbart worden, dass die GRS das Modell nach ASTEC überträgt und die im Vergleich zu COCOSYS noch fehlenden physikalischen Modelle, die für die Darstellung von DCH-Effekten in DWR-Anlagen erforderlich sind, in ASTEC ergänzt. Mit diesen Arbeiten ist begonnen worden. Der Entwicklungsstand erlaubt bereits jetzt die erfolgreiche Simulation eines Experimentes zur Schmelzedispersion aus der Reaktorgrube mit einer kalten Schmelzesimulation (Wasser), durchgeführt an der Karlsruher DISCO-Anlage. Modelle zur Wechselwirkung zwischen heißer Schmelze und Atmosphäre sowie Arbeiten, die speziell die Schnittstelle zwischen RDB und Reaktorgrube betreffen, also speziell den Austrag von Schmelze und Gas aus dem RDB in die Reaktorgrube, sollen im nachfolgenden Vorhaben ergänzt werden.

Das Verbrennungsmodell COMB im Thermohydraulik-Modul CPA von ASTEC berechnet die **Wasserstoff-Verbrennung** in CPA-Zonen unter Berücksichtigung von Massen- und Energiebilanz. Dazu müssen der Zündzeitpunkt und die Brenndauer vom Anwender im Eingabedatensatz vorgegeben und Annahmen hinsichtlich der Ausbreitungsrichtung und der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront getroffen werden. Dies ist für die Anwendung auf die Nachrechnung bekannter Experimente tolerabel, für die Anwendung auf die reale Anlage jedoch nicht brauchbar. In diesem Vorhaben ist daher das **Flammenfrontmodell FRONT** für ASTEC entwickelt worden, das diese aufwändige Eingaben vom Nutzer nicht benötigt. Dabei wird, ausgehend von einem Zündort und ggf. Zündzeitpunkt oder bei Vorliegen eines zündfähigen Atmosphäremisches (gemäß Dreistoffdiagramm) die Ausbreitung der Flammenfront aus diesem in die angrenzenden Räume berechnet und direkt ins COMB-Modell eingespeist, so dass sich die Verbrennungsfront sukzessive durch angrenzende Räume fortpflanzen kann. Bei der Flammenausbreitung wird gemäß des Dreistoffdiagrammes geprüft, ob zündfähige Gasgemische vorliegen. Die Flammenausbreitungsrichtung spielt dabei auch eine Rolle. Weiterhin wurden wiederholte Verbrennungsvorgänge modelliert, wenn z. B. infolge anhaltender Einspeisevorgänge von Wasserstoff aus dem Reaktorkreislauf die Konzentration lokal wieder angestiegen ist. Das FRONT-Modell wurde erfolgreich für die Nachrechnung verschiedener Wasserstoffverbrennungsexperimente angewandt und aus ASTEC auch in die aktuelle Version (2.4) von COCOSYS übertragen. Nach Diskussionen mit dem französischen Partner IRSN für die ASTEC-Entwicklung werden im

Nachfolgevorhaben noch kleinere Korrekturen/Verbesserungen in das Modell eingebaut (zusätzliche Korrelation für die laminare und die turbulente Flammenfrontgeschwindigkeit). Darüber hinaus ist kein weiterer Entwicklungsbedarf identifiziert worden. Dieser kann sich dann ergeben, wenn im laufenden Vorhaben OECD-THAI2-Experimente zur Wasserstoffverbrennung in Kombination mit einem Sprühsystem durchgeführt worden sind und die Nachrechnung nicht erfolgreich verläuft.

6.2.2 Module CESAR/ICARE – Verhalten in Reaktorkreislauf und -kern

Der Hauptanteil der Entwicklung von CESAR und ICARE liegt bei IRSN und betrifft zurzeit die Neugestaltung bzw. die Vereinheitlichung der Thermohydraulikmodelle für Reaktorkreislauf und -kern. Diese ist z. Zt. für Ende 2012 angekündigt. Auch Erweiterungen an ICARE für SWR werden durchgeführt. Die im Vorgängervorhaben durchgeführten Arbeiten bei der GRS konzentrierten sich im Wesentlichen auf die Untersuchung der Anwendbarkeit von ASTEC auf die frühe Phase eines Störfalls in **SWR** bis vor Beginn der Kernaufheizung. Mit den ASTEC-Modulen CESAR für den Kühlkreislauf und CPA für den Sicherheitsbehälter wurden erste Testrechnungen am Beispiel eines SWR der Baulinie 69 durchgeführt. Dabei zeigte sich einerseits die prinzipielle Anwendbarkeit beider Module auch in gekoppelter Fahrweise, andererseits konnte durch Verzögerung bei IRSN bei der Weiterentwicklung von CESAR und insbesondere ICARE für SWR kein Fortschritt bei der Erweiterung und Verifikation von ASTEC auf die Kernzerstörungsphase bei SWR erzielt werden.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde die vereinfachte Methodik ASTOR (Approximated Structural Time of Rupture), die für quasistatische Belastungen bei Stör- und Unfallabläufen insbesondere unter hohen Druck- und Temperaturbelastungen eine vereinfachte **Integritätsbewertung von Rohrleitungsbereichen** ermöglicht, weiterentwickelt. Für die vereinfachte Integritätsbewertung der Hauptkühlmittelleitung (HKL) und der Volumenausgleichsleitung (VAL) eines DWR vom Typ Konvoi wurde jeweils ein Berechnungsverfahren erstellt. Die beiden Berechnungsverfahren für HKL und VAL sollen in dem Nachfolgevorhaben an ASTEC angebunden werden.

6.2.3 Analysesimulator ATLAS – Visualisierung der Ergebnisse

Neben der intuitiven Bedienbarkeit, insbesondere bei der Erstellung einfacher Diagramme auch während einer laufenden ASTEC-Rechnung, besteht der große Vorteil

des GRS-Programms **ATLAS** in der Möglichkeit der Erstellung detaillierter Graphiken der Anlage zur Visualisierung der Rechenergebnisse. Diese eignen sich sowohl zur übersichtlichen Darstellung komplexer Anlagenzustände als auch zur Ausweitung und Analyse bestehender Datensätze. So lassen sich z. B. Nodalierungsfehler leichter identifizieren.

Von IRSN wurde eine neue Prozedur für die Bereitstellung von benötigten Rechnerdaten erstellt. In diesem Vorhaben wurde die Weiterverarbeitung der Daten für die Nutzung in ATLAS von der GRS technisch implementiert. Gemeinsam mit IRSN wurde die Kopplung auf den Stand gebracht, dass eine sinnvolle Anzahl an Parametern aus der kompletten ASTEC-Datenbasis gefiltert und in eine für ATLAS bearbeitbare Struktur umgesetzt wird. Parallel dazu wurden die 2D-Grafiken, mit deren Hilfe der komplexe Ablauf des Unfalls in den verschiedenen Anlagenbereichen aufbereitet und übersichtlich dargestellt werden kann, angepasst und am Beispiel eines DWR (Konvoi-Anlage) getestet.

Für eine Anlage russischer Bauart vom Typ WWER-1000/W-320 liegen ähnliche Grafiken für ATLAS vor. Die Entwicklung befindet sich damit in einem Zustand, der es gestattet, die Kopplung von ATLAS an ASTEC in der nächsten Version von ASTEC auch interessierten externen Anwendern offiziell verfügbar zu machen. Dazu ist dann im Rahmen des nachfolgenden Entwicklungsvorhabens die aktuelle ATLAS-Version einschließlich einer an ASTEC angepassten Dokumentation mit Beispielen und insbesondere ein entsprechender Support bereit zu stellen. Des Weiteren muss zukünftig die Kopplung jeweils an den aktuellen Stand der Entwicklung von ASTEC bzw. ATLAS angepasst werden. Dazu zählt insbesondere die neue Kopplung der Module ICARE und CESAR in ASTEC V2.1, die mit einer Änderung der Datenbasis verbunden sein wird.

7 Literatur

- /ADI 10/ ADINA (Automatic Dynamic Incremental Nonlinear Analysis), Version 8.7, Theory and Modeling Guide, ADINA R&D Inc., September 2010
- /ALB 08/ Albiol, T, Van Dorsselaere, J. P., Reinke, N.
SARNET, a Success Story. Survey of Major Achievements on Severe Accidents and of Knowledge Capitalization within the ASTEC Code EUROSAFE 2008, <http://www.eurosafe-forum.org/2008-seminar-1>, Paris, 2008
- /ALS 04/ Alsmeyer, H. et al.
Test Report of the Melt Spreading Tests ECOKATS-V1 and ECOKATS-1 ECOSTAR-Project, 5th EU-Framework Programme, SAM-ECOSTAR-D15, Forschungszentrum Karlsruhe, 2004
- /ARN 07/ Arndt, S.
Implementation of a Fast Running Model for the Simulation of Vent Pipes into ASTEC
IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project reference ASTEC-V2/MEM/07-27; December 2007
- /ARN 11/ Arndt, J., Sievers, J.
Failure Assessment Methodology for Piping under Severe accident Loading TS II6A.2, SMiRT 21, New Delhi, November 6-11, 2011
- /ARN 12/ Arndt, J., Eisert, P., Sievers, J.
Vereinfachte Analysemethoden zur Integritätsbewertung von Rohrleitungen unter Belastungen infolge von Kernschmelzszenarien
GRS-V-RS-1185 – 3/2012
- /ARN 12a/ Arndt S.
Erweiterung des COCOSYS Sprühmodells
GRS - V – RS 1185 - 4/2012
GRS mbH Berlin, April 2012

- /AUD 09/ Audouin, L., et al.
 The PRISME OECD Fire Research Project: Experimental Results About
 Mass Loss Rate and Soot Concentration in Confined and Mechanically
 Ventilated Compartment
 Proceedings of SMiRT 20, 11th Post Conference Seminar on Fire Safety in
 Nuclear Power Plants and Installations, Helsinki/ Finland, August 17-19,
 2009
- /BAK 12/ Bakalov, I., Band, S.
 Status of COCOSYS Regression Testing V2.4
 Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, in progress,
 2012, GRS-V-RS1185-2/2012 (in Arbeit)
- /BEA 91/ Beahm, E. C.
 Iodine Chemical Forms in LWR Severe Accidents
 NUREG/CR-5732, ORNL/TM-11861, 1991
- /BEN 01/ Bengtsson, L.
 Enclosure Fires
 Swedish Rescue Services Agency, NRS Tryckeri Huskvarna, 2001
- /BIR 60/ Bird, R. B., et al.
 Transport Phenomena
 Wiley and Sons, Inc., New York, 1960
- /BÖH 06/ Böhm, J.
 Modellierung der Prozesse in katalytischen Rekombinatoren
 Schriften des Forschungszentrum Jülich, Band 61, 2006
- /BOS 12/ Bosland, L., Weber, G., Klein-Hessling, W., Girault, N., Clement, B.
 Modelling and Interpretation of Iodine Behaviour in PHEBUS FPT-1 Con-
 tainment with ASTEC and COCOSYS Codes
 Nuclear Technology (177), pp. 36 – 62, January 2012
- /BRA 03/ Babrauskas, V.
 Estimating Large Pool Fire Burning Rates
 Fire Technology 19, 251-261, 1983

- /BUN 92/ Bunz, H., Koyro, M., Propheter, B., Schöck, W., Wagner-Ambis, W.
Resuspension of Fission Products from Sump Water
CEC, JRC, EUR 14635 EN, November 1992
- /CED 92/ Cederqvist, P. et al.
Version Management with CVS
Signum Support AB, 1992
- /CHA 10/ Chatelard, P., Reinke, N. et al.
Status of ASTEC V2 Development – Focus on the Models of the V2.0 Version
4th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2010) Bologna, Italy, May 11-12, 2010
- /CHA 10b/ Chatelard, P. et al.
First Periodic Progress Report on ASTEC Topic
SARNET2-ASTEC-D4.1, IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project Reference ASTEC-V2/DOC/10-08, Cadarache, July 2010
- /CHA 11/ Chatelard, P., Reinke, N., Seropian, C., Arndt, S.
ASTEC Quality Assurance
IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project Reference
ASTEC/QA/11-03, Cadarache, 2011
- /CHA 11b/ Chatelard, P., Reinke, N. et al.
Evolution of the Integral Code ASTEC V2.0-rev2 with Respect to the V2.0 Version,
IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project Reference ASTEC-V1/DOC/11-07, Cadarache, 2011
- /CHA 11c/ Chatelard, P., Reinke, N. et al.
Progress Report on ASTEC Adaptation to BWR and CANDU
SARNET2-ASTEC-D4.2, IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project Reference ASTEC-V2/DOC/10-11, IRSN/DPAM-SEMCA-2010-291, Cadarache, March 2011

- /CHA 11d/ Chatelard, P. et al.
Synthesis of ASTEC V2.0 Assessment
SARNET2-ASTEC-D4.3, IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project
Reference ASTEC-V2/VAL/11-01, IRSN/DPAM-SEMCA-2011-024, Ca-
darache, January 2011
- /CHA 11e/ Chatelard, P. et al.
Second Periodic Progress Report on ASTEC Topic
SARNET2-ASTEC-D4.4, IRSN-GRS Common Frame of Reference,
ASTEC-V2/DOC/11-13, Cadarache, December 2011
- /CRU 95/ Crutel, V., Maro, D.
Methodology for the pH Prediction in a PWR Sump Water under Severe
Accident Conditions
ACE Extension Task 5; Draft of Final Report, November 1995
- /DAP 09/ Dapper, M., Wagner, H.-J., Koch, M. K.
Einfluss von Resuspensionsprozessen auf den Quellterm und Beitrag zur
an COCOSYS angepassten Modellierung von Wasservorlagen
Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben BMWi 1501300, Ruhr-
Universität Bochum, 2009
- /DOR 06/ Van Dorsselaere, J. P., Allelein, H.-J., Neu, K.
Progress and Perspectives of ASTEC Applications in the European Net-
work SARNET
Eurosaf 2006, Paris 2006
- /DOR 08/ Van Dorsselaere, J. P., Reinke, N. et al.
Evolution of the Integral Code ASTEC V1.3rev3 with Respect to the
V1.3rev0 Version Rev.0
IRSN-GRS Common Frame of Reference, Project Reference ASTEC-
V1/DOC/08-06, Cadarache, 2008
- /DOR 09/ Van Dorsselaere, J. P., et al.
The ASTEC Integral Code for Severe Accident Simulation
Nuclear Technology, Vol. 165, pp. 293-307, 2009

- /DRI 06/ Drinovac, P.
 Experimentelle Untersuchungen zu Katalytischen Wasserstoffrekombinatoren für Leichtwasserreaktoren
 Dissertation RWTH Aachen, 2006
- /ECK 11a/ Eckel, J., Erdmann, W.
 The ASTEC Flame FRONT Module Model Description and Parameter Studies
 ASTECV2/DOC/11-05, 2011
- /ECK 11b/ Eckel, J., Weber G.
 Einbau des pH-Modells von AREVA in COCOSYS/AIM
 GRS-V-RS 1185-2/2011
- /EIS 03/ Eisert, P., Bachmann, H.-P., Sievers, J.
 Weiterentwicklung der strukturmechanischen Analysemethodik zur Bestimmung des Kriechverhaltens von Komponenten
 Abschlussbericht zum Vorhaben RS 1115, GRS-A-3104, März 2003
- /EIS 93/ Eisert, P., Gruner, P., Kuntze, W.
 Estimation of PWR Lower Head Failure Times using the Method ASTOR
 Beitrag L 10/4 zur SMIRT 12, Stuttgart, August 16-20, 1993
- /ESM 06/ „Erosion and Sedimentation Manual“
 U.S. Department of the Interior, Bureau of Reclamation, Denver, Colorado, Nov. 2006
- /FAR 04/ Farmer, M. T., Lomperski, S., Kilsdonk, D. J., Aeschlimann, R. W.
 OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: CCI-2
 Test Data Report-Thermalhydraulic Results
 OECD/MCCI-2004-TR05, 2004
- /FAR 05/ Farmer, M. T., Lomperski, S., Kilsdonk, D. J., Aeschlimann, R. W.
 OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: CCI-3
 Test Data Report-Thermalhydraulic Results
 OECD/MCCI-2005-TR04, 2005

- /FAR 06/ Farmer, M. T., Lomperski, S., Kilsdonk, D. J., Aeschlimann, R. W.
 OECD MCCI Project 2-D Core Concrete Interaction (CCI) Tests: Final Report
 OECD/MCCI-2005-TR05, 2006
- /FIS 95/ Fischer, K.
 Qualification of Passive Catalytic Module for Hydrogen Mitigation
 Nuclear Technology, Vol. 112, p. 58, October 1995
- /FIS 98/ Fischer, K.
 Modellierung von Abscheidevorgängen in Wasservorlagen
 Battelle Ingenieurtechnik GmbH, BF-R68.411-1, Dezember 1998
- /FIS 02/ Fischer, K. et al.
 Scaling of containment experiments (SCACEX)
 5th EURATOM Framework Programme, Key Action: Nuclear Fission
 Contract N° FIR1-CT2001-20127, Final Project Report
 December 2002
- /FRE 12/ Freitag, M., Fischer, K.
 Unterstützende Arbeiten zur Entwicklung eines mehrdimensionalen Poolmodells, Test- und Validierungsrechnungen zur Qualifikation des numerischen Lösers CoPool anhand strömungsdynamisch und thermisch relevanter Vorgänge in Wasservorlagen
 Bericht BT-70148-1, Becker Technologies GmbH, Februar 2012
- /FUN 07/ Funke, F.
 Model to Predict the pH of PWR Sumps in Severe Accidents
 AREVA Work report NTR-G/2006/en/0118, Erlangen, October 2007 (restricted)
- /FUN 11/ Funke, F., Langrock, G.
 Laboratory Tests on the Interaction of I₂ with Aerosol Particles THAI-OECD-2, Kick-off meeting, Paris, September 15, 2011

- /GAU 05/ Gauntt, R. O., et al.
 MELCOR Computer Code Manuals
 Vol. 2: Reference Manual, Version 18.6 September 2005
 NUREG-/CR-6119, Vol. 2, Rev. 3, 2005
- /GLO 09/ Glowa, G.
 Behaviour of Iodine Project: Data Report for Iodine Adsorption Studies
 (Year 2)
 R & D Report 153-126530-440-011, AECL Mississauga, Oktober 2009
 (Draft)
- /GLO 11/ Glowa, G., Moore, C., Ball, J.
 Behaviour of Iodine Project Final Report on Iodine Adsorption Studies
 AECL report 153-126530-440-013, December 2011
- /GRE 01/ Grebner, H., Eisert, P., Sievers, J.
 Grenzbelastbarkeit einer DWR-Kühlkreislaufschleife bei einem Kern-
 schmelzszenario mit hoher Temperatur und hohem Druck
 Abschlussbericht zum Vorhaben SR 2306, GRS-A- 2912, März 2001
- /GRS 09/ GRS
 Sicherheitskriterien für Kernkraftwerke
 REVISION D, <http://regelwerk.grs.de>, April 2009
- /GRS 90/ GRS
 Deutsche Risikostudie Kernkraftwerke Phase B
 Verlag TÜV Rheinland, 1990
- /GUO 02/ Guo, J.
 Hunter Rouse and Shields Diagram
 Advances in Hydraulics and Water Engineering, Proc. 13th IAHR-APD Con-
 gress, Vol. 2, Singapore, 2002
- /GUP 09/ Gupta, S., Langer, G.
 Aerosol Wash-down Test (AW)
 Technical Report, Becker Technologies 1501326-AW-QLR, December
 2009

- /GUP 11/ Gupta, S.
THAI Test AW-2, Test Preparation Sheet – Draft
Becker Technologies, May 2011
- /GUP 12/ Gupta, S., et al.
Quick Look Report, Deposition of Molecular Iodine on Aerosol Particles,
Iod-25
Becker Technologies 150 1420-Iod-25-QLR, January 2012
- /HEI 95/ Heitsch, M.
Das Verbrennungsmodell DECOR für das Programmsystem RALOC
mod4.0
GRS-A-2292, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH,
Köln, 1995
- /HEL 96/ Hellmann, S., Funke, F., Greger, G.-U., Bleier, A., Morell, W.
The Reaction between Iodine and Organic Coatings under Severe PWR
Accident Conditions - an Experimental Parameter Study
OECD Workshop on the Chemistry of Iodine in Reactor Safety, PSI,
Würenlingen, Switzerland, June 10 - 12, 1996
- /HEL 11/ Hellmann, S., Langrock, G.
Versuche zur Untersuchung der Gesetzmäßigkeiten bei der Wechselwir-
kung von Kernschmelze (Oxid- und Metall-Mischschmelze) mit Beton wäh-
rend eines postulierten schweren Störfalls in einem KKW
Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung Vorhabens-Nr. 1501317,
AREVA NP GmbH, Erlangen, 2011
- /HOE 10/ Höhne, M., Weber, G.
Interpretation of the OECD THAI Csl Aerosol Wash Down Test AW by
COCOSYS Analyses
OECD THAI Seminar, Paris, October 6-7, 2010
- /HOE 10a/ Hoehne M., Weber, G.
COCOSYS AIM-3 Validierung- RTF Experiment Phase 9 Test 1(RTF P9
T1)
GRS-TN, November 2010

- /JAH 75/ Jahn, M.
Holographische Untersuchungen der freien Konvektion in einer Kernschmelze
BMFT - Forschungsvorhaben RS 48/1, Hannover, 1975
- /JOU 12/ Jorneau, C.
A SARNET Benchmark on Two VULCANO Molten Core Concrete Interaction Tests
5th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR), Köln, 2012
- /JOU 12b/ Journeau, C., Piluso, P., Ferry, L.
VBS(Steel) Tests with Siliceous Concrete – a Focus on Steel Repartition,
5th Progress Meeting on SARNET2 WP6 Corium, CEA, Lanzarote, 2012
- /JUF 84/ Ju, F. D., Buttler, T. A.
Review of Proposed Failure Criteria for Ductile Materials
NUREG/CR-3644, April 1984
- /KAN 07/ Kanzleiter, T., et al.
Versuchsanlage und Programm zur Untersuchung offener Fragen zum Spaltproduktverhalten im Sicherheitsbehälter, THAI Phase II
Abschlussbericht Vorhaben RS 150 1272
Becker Technologies, 180 1272-S1, 2007
- /KLE 08/ Klein-Hessling, W.
COCOSYS Validation PHEBUS FPT1
GRS-TN, February 14, 2008
- /KLE 09/ Klein-Hessling, W., Hoehne, M.
Uncertainty and Sensitivity Study on PRISME Pool Fires Experiment PRS-SI-D1 inside the DIVA Facility
SMIRT 20 Post Conference Seminar on Fire Safety in Nuclear Power Plants and Installations, Helsinki, Finland, 2009

- /KLE 10/ Klein-Hessling, W., Hoehne, M.
Simulation und Analyse der OECD PRISME-Brandversuche in einer geschlossenen Mehrraumgeometrie der DIVA-Anlage mit dem Rechenprogramm COOSYS
GRS-A-3573, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, Oktober 2010
- /KLE 10a/ Klein-Hessling, W., et al.
Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie generische Anwendungsrechnungen mit diesen Rechenprogrammen
Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung RS1170, GRS-A-3489, Juli 2010
- /KLE 12/ Klein-Hessling, W., et al.
COCOSYS V2.4 User's Manual
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln, März 2012
- /KLE 12a/ Klein-Hessling, W.
COCOSYS V3.0: New Structure of AFP Main Module
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3648, Februar 2012
- /KLE 12b/ Klein-Hessling, W.
COCOSYS V3.0 User Manual & COCOSYS V3.0 Reference Manual
in Bearbeitung
- /KOS 07/ Kósa, P.
Development and Assessment of Fission Product Release Model for MEDICIS (ASTEC)
VEIKI – Institute for Electric Power Research Co., Budapest
Technical Report VEIKI 21.51-726, 2007
- /LAN 09/ Langrock, G., et al.
Results of the THAI Test Iod-21
Technical Report, AREVA NP NTCR-G/2009/de/0207A, März 2009

- /LUD 08/ Ludwig, S.
Konsistente Modellierung der Iod/Stahl- und Iod/Dekontanstrich-
Wechselwirkungen in den THAI Versuchen
Diplomarbeit (Lehrstuhl für Prozessmaschinen und Anlagentechnik),
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen, März 2008
- /LUT 09/ Luther, W.
The Flame Front Model in the Containment Module CPA
ASTEC-V2/DOC/09-17-CPA, 2009
- /MAL 06/ Malet J., E. Porcheron, J. Vendel, L. Blumenfeld, I. Tkatschenko
SARNET Spray Benchmarks: TOSQAN and MISTRA: Specification Report,
Rev. 1, Specification of the SARNET Spray Benchmark
DSU/SERAC/LEMAC – 06-11
- /MCQ 75/ Mc Quaid J
Proc. Inst. Eng.
Vol. 189, 1975
- /MEY 06/ Meyer, L., et al.
Low Pressure Corium Dispersion Experiments in the DISCO Test Facility
with Cold Simulant Fluids
Wissenschaftliche Berichte FZKA 6591, FZ Karlsruhe, 2006
- /MEY 11/ Meyer, L., Albrecht, G., Kirstahler, M., Schwall, M., Wachter, E., Xiaoyang
Gaus-Liu
Melt Dispersion and Direct Containment Heating (DCH) Experiments for
KONVOI reactors
KIT Scientific Reports; 7567, 2011
- /MEY 11b/ Meyer, L., Albrecht, G.
Experimental Study of Hydrogen Combustion During DCH Events in Two
Different Scales
14th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics
NURETH-14-019, 2011

- /MEY 11c/ Meynet, N., Engelhardt, S., Bentaib, A.
Investigation on the Influence of Pressure and Temperature on the Ignition Limits of Hydrogen inside Recombiners
The 14th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics, NURETH-14, Toronto, Ontario, Canada, September 25-30, 2011
- /MPA 88/ Forschungsbericht zum Forschungsvorhaben 1500 771 2
Versuche zum Versagen einer Hauptkühlmitteleitung infolge Kriechbruch unter hohem Systemdruck
MPA-Stuttgart, März 1988
- /NAS 12/ Nasr, A., Suard, S., et al.
Fuel Mass-Loss Rate Determination in a Confined and Mechanically-ventilated Compartment Fire using a Global Approach
Combustion and Science Technology, to be published
- /NOW 07/ Nowack, H., Arndt, S.
Post-calculation of the GKSS M1 Test with COCOSYS
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
GRS-A-3390, Oktober 2007
- /NOW 10/ Nowack, H.
Umstellung des COCOSYS-Rekombinatormodells auf eine diffusionskontrollierte Reaktionskinetik
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3542, Mai 2010
- /NOW 11/ COCOSYS-Ergebnisse zu den THAI-Wasseraufwurfexperimenten
Technische Notiz, 2011
- /PEA 97/ Peatross, M. J., Beyler, C. L.
Ventilation Effects on Compartment Fire Characterization
International Association for Fire Safety Science (Ed.)
International Symposium on Fire Science, Vol. 5., pp. 403-414, 1997

- /PEL 11/ Pelzer, M., Klein-Hessling, W.
A Predictive Pyrolysis Model for Liquid Pool Fires including Radiation
Feedback from Hot Soot Layer in COCOSYS
Proceedings of SMiRT 21, 12th International Seminar on Fire Safety in Nu-
clear Power Plants and Installations, Munich, Germany, September 13-15,
2011
- /PEL 12/ Pelzer, M., Klein-Hessling, W.
Validation of COCOSYS Pyrolysis Models on OECD PRISME Experiments
Fire Safety Journal, Elsevier, to be published 2012
- /PIL 96/ Pilch, M. M.
Hydrogen Combustion During Direct Containment Heating Events
Nuclear Engineering and Design 164 (1996), pp. 117-136, 1996
- /PRE 10/ Pretel, H., Boioli, G.
PRISME INTEGRAL Program – PRS_INT_4 Test Report
SERC-2010-246 –DR, PRISME 41, Institute de Radioprotection et de
Sûreté Nucléaire, 2010
- /REI 10/ Reinke, N.
Private Mitteilung zu Lastannahmen, Februar 2010
- /REI 11/ Reinke, N., Nowack, H., Sonnenkalb, M.
ASTEC V2 – Overview of Code Development and Application at GRS
Annual Meeting on Nuclear Technology 2011, Berlin, 2011
- /RIC 61/ Ricou F. P., D. B. Spalding
Measurements of Entrainment by Axisymmetrical Turbulent Jets
Mechanical Engineering Department, Imperial College of Science and
Technology, London
Journal of Fluid Mechanics, 11, pp 21 – 32, Cambridge University Press,
1961

- /RIS 12/ Risken, T. (RUB)
"NEU: Re: Erweiterungsterm für die Bewegungsgleichung" mit Anhang
Ric61.pdf
E-Mail vom 3. April 2012 an Arndt S., GRS mbH
- /SCH 84/ Schwinges, B.
Theoretische Untersuchungen zum Verhalten eines Druckabbausystems
bei Störfällen
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-969,
Juni 1984
- /SCH 90/ Schulz, H., Gruner, P.
Questions on Safety Margins of Components at Load Beyond Design –
Failure Modes of the Primary System of PWRs
Nuclear Engineering and Design 124 (pp. 143-152), 1990
- /SCH 04/ Schwarz, S.
COCOSYS Hints and Recommendations: "Simulation of Free Jets and
Buoyant Plumes"
GRS mbH, Juli 2004
- /SDO 06/ Sdouz, G., Mayrhofer, R., Alsmeyer, H., Cron, T., et al.
The COMET-L2 Experiment on Long-Term MCCI with Steel Melt
FZKA 7214, SAM_LACOMERA-D15, Forschungszentrum Karlsruhe, 2006
- /SER 05/ Seropian, C., Pailheries, P., Van Dorsselaere, J. P.
Simplified ASTEC Modelling of Hydrogen and Carbon Monoxide Combustion
in Containment
SEMIC-2005-0169, ASTEC-V1/DOC/04-22, Institute de Radioprotection et
de Sûreté Nucléaire (IRSN), June 2005
- /SHI 36/ Shields, A.
Anwendung der Ähnlichkeitsmechanik und der Turbulenzforschung auf die
Geschiebebewegung
Mitt. Preuss. Versuchsanst. Wasserbau u. Schiffbau, Berlin, 26, 26, 1936

- /SPE 06/ Spengler, C.
Freisetzung von Kernschmelze in den Sicherheitsbehälter
Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung RS 1152, GRS – A – 3349,
GRS, Köln, 2006
- /SPE 09/ Spengler, C., Arndt, S., Nowack, H., Klein-Hessling, W.,
Luther, W., Reinke, N., Schwarz, S., Schramm, B., Schwinges, B.,
Weber, G.
Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC
Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung RS 1159, GRS-A-3441,
GRS, 2009
- /SPE 10/ Spengler, C.
Direct Containment Heating (DCH) in European PWR – COCOSYS
Model Development for Melt Entrainment and Application to DISCO-
Experiments
ICAPP 2010, San Diego, USA, 2010
- /SPE 10a/ Spengler, C., Schramm, B.
Numerical Studies on Natural Convection During Initial Phase in CCI-5
MCCI Seminar 2010, Cadarache, France, sponsored by the Committee on
the Safety of Nuclear Installations (CSNI), November 2010
- /SPE 10b/ Spengler, C.
Approximation of the Heat Transfer Between Melt and Concrete Based on
an Empirical Evaluation of MCCI Experiments and Application in ASTEC-
MEDICIS
MCCI Seminar 2010, Cadarache, France, sponsored by the Committee on
the Safety of Nuclear Installations (CSNI), November 2010
- /SPE 10c/ Spengler, C.
A Fast Running Method for Predicting the Efficiency of Core Melt Spreading
for Application in ASTEC
Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 2010

- /SPE 11/ Spengler, C.
Adoption of a Fission Product Release Model for MEDICIS
GRS - V – RS 1185 - 4/2011, GRS, Köln, 2011
- /SPE 12/ Spengler, C.
Analysis of Top Flooding during Molten Corium Concrete Interaction
(MCCI) with the Code MEDICIS Using a Simplified Approach for the Com-
bined Effect of Crust Formation and Boiling
Jahrestagung Kerntechnik Stuttgart, 2012
- /VDI 88/ VDI Wärmeatlas, 5. Auflage 1988, VDI-Verlag, Düsseldorf, 1988
- /WEB 08/ Weber, G.
Vergleich von pH-Wert-Modellen für den Reaktorsumpf
GRS-TN (Entwurf), November 2008
- /WEB 09/ Weber, G., Funke, F.
Description of the Iodine Model AIM-3 in COCOSYS
GRS-A-3508, Abschlussbericht RS1189, November 2009
- /WEB 10/ Weber, G.
Einbau eines pH-Modells in COCOSYS-ASTEC
Präsentation auf Projektbesprechung zu COCOSYS/ASTEC-Entwicklung,
GRS, Köln, März 2010
- /WEB 11/ Weber, G.
Ein neues Abwaschmodell für unlösliche Aerosol (AULA)
GRS-TN, Köln, August 2011
- /WEB 11b/ Weber, G.
I2/Aerosol-Versuch: Abschätzung der I2-Verteilung und Empfehlungen zur
Versuchsführung und Instrumentierung
GRS-TN, Köln, September 2011
- /WEB 12/ Weber, G.
Auslegungsrechnung zu den nassen Resuspensionsversuchen mit unlösli-

chem Aerosol in der THAI-Anlage
GRS-V-RS 1185 -1/2012, März 2012

/WIL 96/ Williams, D. C., Griffith, R. O.
Assessment of Cavity Dispersal Correlations for Possible Implementation in
the CONTAIN Code
SAND94-0015, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico,
1996

/WRE 01/ Wren, J. C., Glowa, G. A.
Kinetics of Gaseous Iodine Uptake onto Stainless Steel during Iodine-
Assisted Corrosion
Nucl. Technology 133 (2001) 33-49, 2001

8 Verteiler

		Exemplare: gedruckt	Exemplare: pdf	CD- ROM
BMWi				
Referat III B 4		1 x		
GRS-PT/B				
Internationale Verteilung	(FIZ)	10 x		30 x
Projektbegleiter	(dre)	2 x	1 x	1 x
GRS				
Geschäftsführung	(wfp, stj)		je 1 x	
Bereichsleiter	(erv, paa, prg, rot, stc, ver, zir)		je 1 x	
Abteilungsleiter	(luw, poi, som, vek)		je 1 x	
Projektleitung	(spc)	1 x	1 x	
Projektbetreuung	(wal, bna)		je 1 x	
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x	
Bibliothek	(Köln)	1 x		
Autoren	(arn, bak, bas, eck, klh, noh, pel, ren, siv, weg)	je 1 x	je 1 x	
Gesamtauflage	Exemplare	25		31

**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