

**Weiterentwicklung von  
Modellen für Stör- oder  
Unfallabläufe im  
Sicherheitsbehälter**

## Weiterentwicklung von Modellen für Stör- oder Unfallabläufe im Sicherheitsbehälter

Abschlussbericht

Claus Spengler  
Siegfried Arndt  
Sara Beck  
Dandy Eschricht  
Walter Klein-Heßling  
Holger Nowack  
Nils Reinke  
Martin Sonnenkalb  
Gunter Weber

Oktober 2017

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1532 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

**Deskriptoren**

Reaktorsicherheit, Rechenprogramm COCOSYS, Containment, Sicherheitsbehälter, Thermohydraulik, Iod- und Aerosolverhalten, Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI)

## Kurzfassung

In diesem Vorhaben ist die Entwicklung von eigenen Modellen der GRS für Vorgänge im Sicherheitsbehälter (SB) für die Rechencodes COCOSYS und ASTEC fortgesetzt worden. Entsprechend der übergeordneten Zielsetzung wurden hierzu wesentliche Modelle für die wichtigsten zurzeit untersuchten Themen gemäß internationalem Stand von Forschung und Entwicklung (F&E) aktualisiert und verbessert. Die Schwerpunkte der Arbeiten für COCOSYS lagen auf folgenden drei Themenkomplexen:

- **Iod- und Spaltprodukte:** Mit zahlreichen Modellverbesserungen wurde zum internationalen Wissensstand bei der Interpretation aktueller Versuche zum Themenkomplex (in der THAI-Anlage sowie bei OECD-BIP und -STEM) beigetragen, u. a. zum Einfluss der Feuchte auf die Reaktion zwischen Iod und Dekontaminations-Anstrichen und zur Wechselwirkung zwischen Iod und Silberaerosol. Die fortgeführte Umstellung auf neue Datenstrukturen für zentralisierte Bilanzen für alle Teilmodelle im Iod- und Spaltproduktmodell erhöht die Konsistenz der Simulation. Die Umstrukturierung ist weit fortgeschritten aber nicht abgeschlossen worden.
- **Thermohydraulik im SB:** Aufgrund von Verbesserungen zur detaillierten Simulation einer Temperaturverteilung in Wasserpools mit dem 3D-Modell CoPool bzw. zum Auffüllen von COCOSYS-Zonen mit Wasser wurde der Anwendungsbereich von COCOSYS auf Unfallabläufe erweitert, bei denen die Gegenwart von beträchtlichen Wasserpools in Raumbereichen Einfluss auf die Thermohydraulik der Atmosphäre hat.
- **Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten:** Die hier erarbeitete Ergänzung eines Modells für den Übertrag von Schmelze und enthaltenen Spaltprodukten zwischen Primärkreis (von ATHLET-CD berechnet) und SB (COCOSYS) zum Zeitpunkt des RDB-Versagens ermöglicht gekoppelte Rechnungen mit ATHLET-CD und COCOSYS für den gesamten Unfallablauf mit Freisetzung von Schmelze in den SB. Dabei wird die Möglichkeit mehrerer Schmelzepools in verschiedenen Räumen der Anlage berücksichtigt. Mit der Zielsetzung, den aktuellen Kenntnisstand zum Eintrag und zur Kühlbarkeit von Schmelze in Wasserpools im SB sowie zu Kernfängersystemen in den Modellstand von COCOSYS zu integrieren, sind erste Grundlagen erarbeitet worden. Die Implementation von entsprechenden Modellen ist für ein Nachfolge-Vorhaben geplant.

Neben diesen fachlichen Schwerpunkten wurden Arbeiten zur Pflege und Konsolidierung des COCOSYS-Quellcodes und der Code-Dokumentation fortgeführt, erfolgte die Beteiligung an internationalen Aktivitäten wie den EU-Projekten CESAM und JASMIN (beide zur Weiterentwicklung von ASTEC) sowie an fachgebietsbezogenen Initiativen der OECD/NEA, und es wurden kontinuierliche Qualitätssicherungsarbeiten wie z. B. die Auswertung von Informationsrückflüssen der Anwender der Rechencodes durchgeführt.

## Abstract

In the frame of this research project GRS continued its development of own models for phenomena and processes in the containment for the simulation codes COCOSYS and ASTEC. With view to the project's superior objective, relevant models of the most important processes which are currently under investigation are updated and improved according to today's international state-of-the-art. Main focus of work on the code COCOSYS was on the following three topics:

- **Iodine and fission products:** With several model improvements in COCOSYS, GRS contributed to the international state of knowledge regarding the interpretation of recent experiments (as e. g. in the THAI-facility or in the OECD-BIP and -STEM projects), e. g. for the impact of absolute humidity on the iodine/paint reactions and for the interaction of gaseous iodine with silver aerosol. By the introduction of centralised balances and data structures for all relevant quantities of interest within all sub-models in the frame of the re-engineering work of the aerosol and fission product module, the consistency of the calculation was considerably increased. Re-engineering work is advanced far but not completed.
- **Thermal hydraulics in the containment:** The application regime of COCOSYS was extended to severe accident scenarios in which the presence of large water pools has a dominant impact on the thermal hydraulics of the atmosphere. This was due to improvements of the detailed simulation of water pools with the 3D model CoPool and its coupling to COCOSYS and of the general capabilities of COCOSYS to simulate the filling of atmospheric zones with water.
- **Ex-vessel corium behaviour:** A model extension was provided which enables to simulate the transfer of melt and fission products between primary circuit (calculated by ATHLET-CD) and containment (COCOSYS) and thus allows conducting coupled calculations with ATHLET-CD and COCOSYS beyond the time of RPV failure for the whole accident sequence in case of melt release to the containment. Following the objective to integrate the recent state of knowledge of melt transfer into deep water pools and of melt coolability as well as of core catcher systems into COCOSYS, basic outlines for future models in COCOSYS have been elaborated. The detailed design of these models and their implementation into the code is scheduled for a follow-up project.

Beside these technical core areas AP1-AP3, dedicated work on the maintenance and the consolidation of source code and documentation has been continued, participations to international collaborations as e. g. to the EU projects CESAM and JASMIN (both for the further development of the ASTEC code) and to topical activities of the OECD/NEA were continued and/or finalised and continuous quality assurance efforts were undertaken, as e. g. the evaluation of individual user feedback on the code application.

# Inhaltsverzeichnis

	<b>Kurzfassung</b> .....	<b>I</b>
	<b>Abstract</b> .....	<b>III</b>
<b>1</b>	<b>Einleitung</b> .....	<b>1</b>
1.1	Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele .....	2
1.2	Stand von Wissenschaft und Technik / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens .....	5
<b>2</b>	<b>Modellentwicklung zum Iod- und Spaltproduktverhalten</b> .....	<b>9</b>
2.1	Erweiterung des Energiedosisleistungsmodells .....	9
2.2	Verhalten von Silber-Partikeln im Sumpf.....	16
2.2.1	Chemisches Modell .....	16
2.2.2	Anwendung auf den Versuch THAI AW-3 .....	22
2.3	Verbesserung des I <sub>2</sub> /Farbe-Modells.....	24
2.3.1	Bisheriges I <sub>2</sub> /Farbe-Modell.....	24
2.3.2	Überarbeitetes I <sub>2</sub> /Farbe-Modell .....	25
2.3.3	Nachrechnung der BIP-Versuche G-4 und G-6.....	31
2.4	Iodübergang zwischen Wasserpool und Atmosphäre .....	35
2.4.1	Modellentwicklung .....	35
2.4.2	Überprüfung des Modells anhand von THAI Iod-23 .....	36
2.5	Implementierung eines Ruthenium-Modells .....	43
2.5.1	Wissensstand zum Ruthenium-Verhalten .....	44
2.5.2	Modellierung des Ruthenium-Verhaltens in COCOSYS-AIM3.....	49
2.5.3	Beispielrechnung .....	50
2.5.4	Schlussfolgerung/Bewertung .....	52
2.6	Chemisorption von I <sub>2</sub> auf Aerosolpartikeln .....	52
2.6.1	Chemisches Modell .....	52
2.6.2	Silber-Iod-Reaktionen in der Atmosphäre .....	53
2.6.3	Silber/Iod-Reaktionen an Oberflächen .....	54



2.6.4	Anwendung auf den Versuch THAI Iod-26 .....	55
2.6.5	Diskussion der Ergebnisse und der Modellierung .....	56
2.7	Abwaschen von unlöslichen Aerosolen.....	57
2.7.1	Modellfortschritt .....	57
2.7.2	Ergebnisse zur Nachrechnung von AW-3 Lab-Tests.....	61
2.8	AFP-Umstrukturierung .....	64
2.8.1	Konzepte in Bezug auf die Modellierung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens .....	64
2.8.2	Modellierung von technischen Systemen.....	67
2.8.3	Implementierung des Restarts im neuen AFP-Modul .....	67
2.9	Sprühen mit kontaminiertem Wasser .....	69
2.9.1	Ergebnisse aus der Nachrechnung des THAI AW-4 Versuchs und der Vorausrechnungen des THAI Iod-31 Versuchs .....	70
2.9.2	Eigenschaften und Konzeption des neuen Sprühmodells .....	70
2.9.3	Modellierung des Aerosolauswaschens .....	72
2.9.4	Durchgeführte Testrechnungen .....	73
2.10	Rückhaltung von I <sub>2</sub> und Organoiod in Wasservorlagen .....	75
<b>3</b>	<b>Modellentwicklung zur Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter und zur H<sub>2</sub>-Verbrennung.....</b>	<b>77</b>
3.1	Modellierung des Flutens von Zonen .....	77
3.1.1	Zielsetzung .....	77
3.1.2	Erzielte Ergebnisse.....	78
3.1.3	Offene Punkte.....	82
3.2	Einbindung des 3D-Poolmodells CoPool .....	82
3.2.1	Ergänzung der Modellierung.....	82
3.2.2	Testbeispiele .....	84
3.2.3	Fazit.....	89
3.3	Verbesserung des Flammenfront-Modells in COCOSYS .....	89
3.3.1	Ertüchtigung des Flammfront-Modells für Gas/Wasser-Verbindungen .....	90
3.3.2	Verbesserung von Zündkriterien und Kriterien zu schnellen Wasserstoffverbrennungen / Detonationen .....	93

<b>4</b>	<b>Modellentwicklung zum Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten .....</b>	<b>95</b>
4.1	Ausgestaltung der Schnittstelle zwischen Primärkreis und Containment im Hinblick auf RDB-Versagen und Austrag von Schmelze .....	95
4.1.1	Schmelzeeintrag in die Reaktorgrube .....	95
4.1.2	Freisetzung von Spaltprodukten .....	98
4.1.3	Evaluierung strukturmechanischer Methoden .....	99
4.2	Anbindung von Modellen für Vorgänge nach Schmelzeaustrag in die mit Wasser gefüllte Reaktorgrube .....	101
4.2.1	Mögliche Szenarien und Bewertung des Modellstandes .....	102
4.2.2	Referenzrechnung für das SERENA-Anlagenszenario .....	109
4.2.3	Einfluss von Hauptparametern auf die Dryout-Leistungsdichte eines Schüttbettes.....	118
4.2.4	Schlussfolgerung .....	122
4.3	Modellerweiterung für Kernfänger .....	122
4.3.1	Merkmale von aktuellen Kernfänger-Konzepten .....	123
4.3.2	Kernfängermodelle in ASTEC, MELCOR und SOCRAT .....	127
4.3.3	Grundzüge eines Modellkonzeptes für COCOSYS .....	131
4.4	Modellerweiterungen für die Ausbreitung von Schmelze aus der Reaktorgrube in angrenzende Raumbereiche mit Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (Modul CCI) .....	133
4.4.1	Grundzüge der Implementation und benötigte Eingabedaten .....	133
4.4.2	Massen- und Leistungsübertrag zwischen Schmelzepools .....	138
4.4.3	Konfiguration der Schmelzepools .....	140
4.4.4	Beispielrechnung .....	142
4.4.5	Fazit.....	144
<b>5</b>	<b>Konsolidierung von Quellcode und Dokumentation .....</b>	<b>147</b>
5.1	Konsolidierung von COCOSYS und Aktualisierung und Vervollständigung der Dokumentation .....	147
5.1.1	Dokumentation des Quellcodes .....	147
5.1.2	Codepflegemaßnahmen .....	148
5.1.3	Vervollständigung von Handbüchern .....	148
5.1.4	Verbesserungen von Schnittstellen für Anwender.....	149

5.2	Aktualisierung und Vervollständigung der Dokumentation für ASTEC/CPA .....	149
<b>6</b>	<b>Internationales .....</b>	<b>151</b>
6.1	Beteiligung am EU-Vorhaben JASMIN.....	151
6.1.1	Zielsetzung .....	151
6.1.2	Freisetzung von Aerosolen aus Natrium-Lachenbränden.....	152
6.1.3	Chemische Alterung der Brandaerosole .....	154
6.1.4	Anwendungsrechnung – Benchmark .....	156
6.2	Beteiligung am EU-Vorhaben CESAM .....	159
6.2.1	Zielsetzung .....	159
6.2.2	Erstellte Berichte.....	160
6.2.3	Durchgeführte Arbeiten.....	161
6.2.4	Pool-Scrubbing .....	166
6.2.5	MOCKA-Versuche zu MCCI .....	168
6.3	Internationale Gremien und Querschnittsaktivitäten.....	170
6.3.1	IRSN-GRS-Kooperation zur ASTEC-Entwicklung und -Validierung .....	170
6.3.2	WGAMA-State-of-the-Art (SOAR)-Bericht zur Schmelze-Beton- Wechselwirkung (MCCI) .....	171
6.3.3	Teilnahme an der CSNI Senior Expert Group (SEG) zu Safety Research Opportunities post-Fukushima (SAREF) .....	173
6.3.4	Teilnahme an Treffen zum Coriumverhalten im Rahmen von NUGENIA	177
<b>7</b>	<b>Nutzerrückflüsse und Qualitätssicherung .....</b>	<b>179</b>
7.1	Benutzerunterstützung und Rückflüsse aus der Anwendung .....	179
7.1.1	Installationsprogramm .....	179
7.1.2	Restart-Fähigkeit .....	180
7.1.3	COCOSYS-CoPool-Kopplung.....	180
7.1.4	Sprüh-Modell .....	180
7.1.5	Rivulet-Modell.....	181
7.1.6	Drainage an die Wand .....	181
7.1.7	I <sub>2</sub> /Farbe-Modell .....	181
7.1.8	Rückflüsse zu CCI .....	182

7.1.9	Rückflüsse zu AFP .....	182
7.2	Qualitätssicherung .....	183
7.2.1	Umstellung der Kommunikationstechnik zwischen Untermodulen in COCOSYS.....	183
7.2.2	Kopplung von ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS.....	184
7.2.3	Regressionstesten .....	185
7.2.4	Kontinuierliche Integration von Modellen in das Codesystem .....	186
7.3	Herausgabe einer neuen COCOSYS Version.....	186
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>189</b>
8.1	Iod- und Spaltprodukte .....	189
8.2	Thermohydraulik im SB.....	190
8.3	Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten .....	191
8.4	Weitere Arbeiten .....	191
8.5	Ausblick .....	192
	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>195</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>203</b>
	<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>209</b>



# 1 Einleitung

Die GRS entwickelt für aktuelle Fragestellungen der Reaktorsicherheitsforschung im In- und Ausland eigene Analysemethoden. Die bereit gestellten Berechnungswerkzeuge der GRS decken dabei ein umfassendes Spektrum der in der Reaktorsicherheitsforschung benötigten Methoden ab. Zu diesem Spektrum gehören auch die Rechencodes COCOSYS und ASTEC als Simulationsprogramme für Stör- und Unfälle im Sicherheitsbehälter bzw. der Gesamtanlage.

COCOSYS (Containment Code System) ist das detaillierte Analysewerkzeug der GRS, das auf der Basis von weitgehend mechanistischen Modellen für Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen im Sicherheitsbehälter von Anlagen mit Leichtwasserreaktoren (LWR) entwickelt wird.

ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) ist ein integrales Analysewerkzeug, das Untersuchungen zu Stör- oder Unfallabläufen bezüglich des gesamten Anlagenverhaltens von LWR erlaubt und von IRSN in einer langjähriger Kooperation mit der GRS entwickelt worden ist. Die GRS hat die Beteiligung an der gemeinsamen Entwicklung im Jahre 2017 beendet.

Grundgedanke des Sicherheitskonzeptes für den Betrieb von Kernkraftwerken ist es, das Eintreten von Stör- oder Unfällen durch eine angemessene Auslegung zu verhindern sowie die Auswirkungen von trotzdem nicht komplett auszuschließenden Unfällen zu minimieren. Daraus resultieren folgende Anforderungen an die genannten Rechencodes:

- Analyse von anlagentypischen Szenarien zur Verbesserung des phänomenologischen Verständnisses zu erwartender Stör- und Unfallabläufe
- Ermittlung möglicher radiologischer Freisetzungen aus dem Sicherheitsbehälter und angrenzender Gebäude in die Umgebung bei Unfallabläufen – dem Quellterm,
- Durchführung von deterministischen Unfallanalysen im Rahmen von probabilistischen Sicherheitsanalysen der Stufe 2 einschließlich von Studien zur Ermittlung von Unsicherheiten
- Untersuchung von präventiven oder mitigativen Maßnahmen des Anlageninternen Notfallschutzes (Sicherheitsebene 4) bei Unfällen in LWR

Das abgeschlossene Vorhaben stellt eine inhaltliche Fortführung des durch das BMWi geförderten Vorhabens RS1508 /SPE 14b/ der GRS zur Codeentwicklung der Rechen-codes COCOSYS und ASTEC dar.

Übergeordnete Zielsetzung des Vorhabens ist es, Modelle für Vorgänge und Phänomene im Sicherheitsbehälter entsprechend des Fortschritts von Wissenschaft und Technik für die Rechen-codes COCOSYS und ASTEC weiterzuentwickeln. Dies ermöglicht der GRS sowie nationalen und internationalen Partnern Sicherheitsanalysen für Stör- und Unfallabläufe für ein breites Spektrum von kerntechnischen Anlagen auf hohem Niveau durchzuführen, unabhängige Sicherheitsaussagen zu treffen, sowie Beiträge zur Erhöhung der Anlagensicherheit zu leisten.

## **1.1 Wissenschaftliche und technische Arbeitsziele**

Neueste Forschungserkenntnisse zu Phänomenen bei Unfallabläufen sollen in einer adäquaten Modellentwicklung umgesetzt und das Spektrum verfügbarer Modelle soll an relevante neue Anforderungen aus zukünftigen Anlagendesigns angepasst werden.

Die konkreten Arbeitsziele lassen sich entsprechend des Arbeitsprogramms in sechs technisch/wissenschaftliche Arbeitspunkte (AP1 - AP6) sowie einen Punkt zum Projektmanagement (AP7) wie folgt gruppieren:

- (AP1) Modellentwicklung zum Iod- und Spaltproduktverhalten
- (AP2) Modellentwicklung zur Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter und zur H<sub>2</sub>-Verbrennung
- (AP3) Modellentwicklung zum Ex-Vessel Schmelze-Verhalten
- (AP4) Konsolidierung von Quellcode und Dokumentation
- (AP5) Internationales
- (AP6) Nutzerrückflüsse und Qualitätssicherung
- (AP7) Projektmanagement und Dokumentation

Nachfolgend werden die generellen Themen in den einzelnen AP aufgelistet.

## **AP1 Modellentwicklung zum Iod- und Spaltproduktverhalten**

Simulationen zur Ermittlung des Quellterms werden von einer Vielzahl von komplexen Vorgängen beeinflusst. In diesem Arbeitspunkt sind folgende Zielsetzungen für das Rechenprogramm COCOSYS zur Verbesserung der Quelltermaussagen geplant:

- Arbeiten zur Erweiterung des Energiedosisleistungsmodells auf Wände/Atmosphäre
- Berücksichtigung des Einflusses von Silber-Partikeln im Sumpf auf die Silber/Iod-Reaktion
- Verwertung der Erkenntnisse aus den OECD-BIP-Vorhaben für die Modellierung der Iod-Wechselwirkung mit Farbanstrichen
- Verbesserte Modellierung des Iodübergangs zwischen Sumpf und Atmosphäre
- Verwertung der Erkenntnisse aus OECD-STEM für die Bereitstellung eines Modells zum Verhalten von Ruthenium
- Modellierung der Chemisorption von Iod auf Aerosolpartikeln
- Einbau des vorhandenen Modells AULA für den Abwaschvorgang von unlöslichen Aerosolen von Wänden und Strukturen
- Fertigstellung der einheitlichen Bilanzierung von Spaltprodukten/Aerosolen in der neuen Struktur des COCOSYS-Moduls AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten
- Umsetzung der Erkenntnisse aus neuen THAI-Versuchen für den Einfluss von kontaminiertem Wasser beim Einsatz in Sprühsystemen
- Ertüchtigung der Modelle für die Rückhaltung von Iod bzw. Organoiod beim Gasdurchgang durch Wasservorlagen

## **AP2 Modellentwicklung zur Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter und zur H<sub>2</sub>-Verbrennung**

Mit speziellen Erweiterungen zur Behandlung tiefer Wasservorlagen soll in diesem Arbeitspunkt das Anwendungsspektrum von COCOSYS auf Unfallabläufe bzw. innovative Anlagendesigns ausgedehnt werden, bei denen Räume im Sicherheitsbehälter vollständig geflutet werden oder bei denen die detaillierte Berechnung der Zustände in Wasservorlagen (z. B. Temperaturverteilung in dem Pool der Kondensationskammer bei SWR)



durch eine Unterteilung dieser in mehrere Zonen von großer Bedeutung für die Thermohydraulik im SB sind.

Darüber hinaus sollen die Arbeiten zur Anbindung des bei ITWM in Kaiserslautern entwickelten dreidimensionalen Poolmodells CoPool fortgeführt werden.

Eine weitere Zielsetzung in diesem Arbeitspunkt ist die realistischere Beschreibung der Flammenfrontbewegung bei einer Wasserstoffverbrennung in Gebäuden von LWR-Anlagen sowie die Aktualisierung von Grenzkriterien für verschiedene Verbrennungsregimes entsprechend des aktuellen Standes von F&E.

### **AP3 Modellentwicklung zum Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten**

Das Modul CCI dient in COCOSYS zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung und basiert auf dem ASTEC-Modul MEDICIS. Der Code LAVA steht zur Verfügung, um die Ausbreitung und Rückhaltung der Schmelze in einem Ausbreitungsraum (wie z. B. beim EPR-Konzept) zu simulieren.

In existierenden LWR-Konzepten ist es denkbar, dass Kernschmelze aus einer Reaktorgrube im weiteren Unfallablauf in einen anderen Raum übertragen wird. Um diesen Vorgang zu beschreiben, ist eine Erweiterung des CCI-Moduls zur Simulation von Unfallabläufen mit mehreren Schmelzepools bzw. mehreren „Reaktorgruben“ vorgesehen. Darüber hinaus soll es zukünftig auch möglich sein, Unfallabläufe zu simulieren, bei denen Kernschmelze aus dem RDB in Wasservorlagen im SB eingetragen wird. Entsprechende Modelle werden vom IKE Stuttgart entwickelt. Die GRS soll eigene Expertise mit diesen Modellen aufbauen und deren Verwendbarkeit für die Simulationskette der GRS auswerten.

In diesem Arbeitspunkt sollen ferner – basierend auf den bereits zur Verfügung stehenden Modellen CCI und LAVA – erste Arbeiten zur Erstellung und Implementation eines universell einsetzbaren Modells zur Beschreibung von Anlagen mit Kernfängersystemen durchgeführt werden.

#### **AP4 Konsolidierung von Quellcode und Dokumentation**

In diesem Arbeitspunkt sind intensive Pflegemaßnahmen für den Quellcode von COCOSYS sowie für die Dokumentation von COCOSYS und ASTEC/CPA geplant. Eine Zielsetzung dabei ist es, die Verständlichkeit des COCOSYS-Quellcodes als wichtigste Voraussetzung zum eigenen Know-how-Erhalt und zur Qualitätssicherung zu verbessern. Auch soll die Benutzerfreundlichkeit beider Rechencodes verbessert werden, um somit auch den Nutzereinfluss auf die Rechenergebnisse weiter zu reduzieren.

#### **AP5 Internationales**

Dieser Arbeitspunkt hat die Fortführung der Einbindung von GRS-Arbeiten in internationale Aktivitäten als Zielsetzung. So werden z. B. die Beteiligungen an den laufenden EU-Vorhaben JASMIN (zur Ertüchtigung von ASTEC für natriumgekühlte, schnelle Reaktoren) und CESAM (zur Verbesserung der ASTEC-Modellbasis und der Anwendbarkeit von ASTEC auf Referenzanlagentypen bzw. Unfallszenarien), sowie an internationalen Arbeitsgruppen des CSNI bzw. der OECD/NEA fortgesetzt.

#### **AP6 Nutzerrückflüsse und Qualitätssicherung**

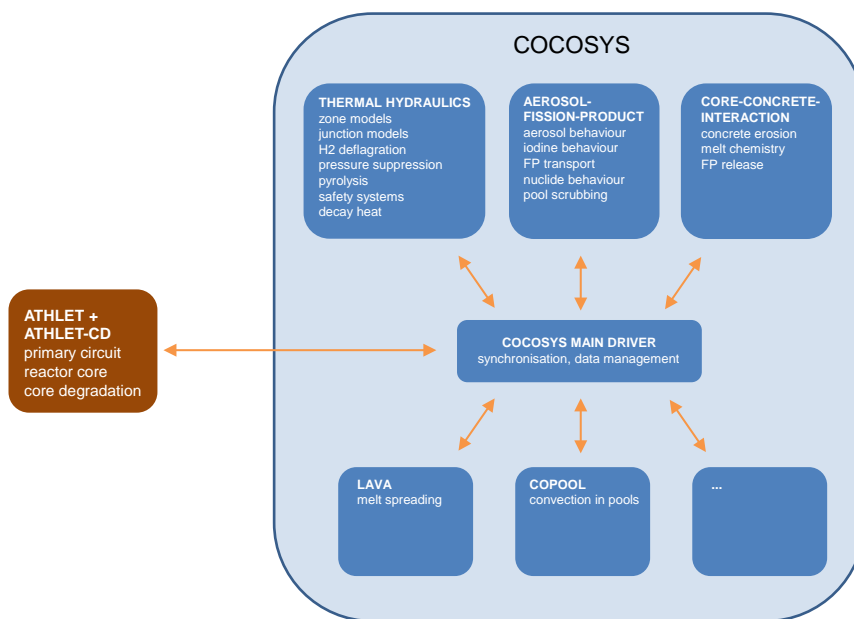
Zielsetzung in diesem Arbeitspunkt ist die zeitnahe Umsetzung von relevanten Rückflüssen aus der Validierung bzw. Anwendung des Rechenprogramms COCOSYS in Form von benötigten Ad-hoc-Modellverbesserungen bzw. -korrekturen sowie die Sicherstellung von Qualitätsstandards. Rückflüsse und Anforderungen aus der externen Anwendung von COCOSYS und ASTEC werden insbesondere im Rahmen einer Experten-Gruppe aus GRS und externen Experten inhaltlich diskutiert und bewertet. Dabei werden auch Prioritäten und Möglichkeiten der Umsetzung von Modellverbesserungen im Vorhaben diskutiert.

### **1.2 Stand von Wissenschaft und Technik / bisherige Arbeiten zu Beginn des Vorhabens**

Aufgrund der intensiven Beteiligung der GRS in internationalen Vorhaben (OECD-THAI, -BIP, -STEM), speziell auch in ausgewählten Benchmark-Aktionen (SARNET) sowie zur Nachrechnung der Ereignisse in Fukushima (OECD-BSAF), haben sowohl der Rechen-code COCOSYS als auch eine erste gekoppelte Version von ATHLET-CD / COCOSYS

kontinuierlich eine steigende internationale Anerkennung erworben und sind für die Untersuchung noch offener Fragestellungen in der nationalen und internationalen Reaktorsicherheitsforschung sowie für die Fortschreibung des internationalen Standes von F&E von großer Bedeutung.

In RS1508 wurden Arbeiten zur Verbesserung von Einzelmodellen und zur Erweiterung des Anwendungsbereiches von COCOSYS durchgeführt. Die Arbeiten lassen sich entsprechend der Modulstruktur (Abb. 1.1) von COCOSYS in die drei Themenbereiche Thermohydraulik, Aerosole/Spaltprodukte sowie Schmelze-Beton-Wechselwirkung untergliedern.



**Abb. 1.1** Modulare Struktur von COCOSYS und Anbindung weiterer Codes

In RS1508 war eine wesentliche Zielsetzung, die Qualität der Thermohydraulik-Simulationen durch eine erweiterte Behandlung von Wasserpools im Containment (Auffüllen von atmosphärischen Zonen mit Wasser, detaillierte Simulation eines Wasserpools mit CoPool) zu verbessern. Für beide Punkte standen nach RS1508 Codeerweiterungen bzw. erste Lösungsansätze zum Einsatz in COCOSYS bereit, für die aber im Hinblick auf deren Anwendung auf komplexe Reaktorfälle Anpassungsarbeiten nötig sind.

In Bezug auf die Verbesserung von direkt quelltermrelevanten Modellen wurde in RS1508 die Umstrukturierung des AFP-Moduls mit der Zielsetzung der konsistenten Bilanzierung von Spaltprodukten und Aerosolen weiter vorangetrieben. Die Umstrukturierung stellte sich aber als komplexer heraus, als erwartet. Um dieses neue, umstrukturierte Modul zukünftig nutzen zu können, fehlen noch Restarbeiten. Aus diesem Grund

musste die Implementierung von bereits erarbeiteten Modellverbesserungen mit Bezug zu Spaltprodukt/Aerosolbilanzen, z. B. zum Abwaschen, zurückgestellt werden.

Mit dem in RS1508 entwickelten Filtermodell für Metallfaser-Ventingfilter konnte eine wichtige Grundlage geschaffen werden, auf welcher weitergehende Diskussionen mit internationalen Experten im CESAM-Projekt zur Wirksamkeit gefilterter Druckentlastungen geführt werden.

Was die Modelle im CCI-Modul angeht, findet international nach Ende des OECD-CCI-Projektes eine Konsolidierungsphase statt, in der Bilanz gezogen wird, was man in der zurückliegenden, internationalen Forschung zu diesem Thema erreicht hatte. Dementsprechend wurden State-of-the-Art-Berichte für SARNET und CSNI angefertigt. Die internationale Einschätzung zu MCCI sieht momentan empirische Ansätze zur Beschreibung des Aufschmelzens von Beton vor; die verfügbaren Daten lassen keine dezidiert mechanistischen Modellverbesserungen in diesem Punkt erwarten, da die Vorgänge als zu komplex angesehen werden. Die bei KIT in Karlsruhe laufenden MOCKA-Versuche sind durch die Verwendung einer geschichteten Schmelzekonfiguration mit Metallschmelze und Oxidschmelze, einer Entbindung chemischer Wärme in beiden Schichten (Oxide und Metalle) sowie einer möglicher Armierung im Beton charakterisiert. Die experimentellen Daten der MOCKA-Versuche zeigen zum einen eine Reproduzierbarkeit von Einzelexperimenten, andererseits jedoch bei Variation der Hauptparameter wie Betonsorte (silikatisch/LCS) und Armierung (ohne/mit) eine komplexe, noch nicht verstandene Datenlage. Auch hier konnte vorerst keine mechanistisch angelegte Modellverbesserung in Betracht gezogen werden.

Für die Schließung der Modellkette bei RDB-Versagen (Kopplung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS für den Austrag von Schmelze) wurden in RS1508 Vorarbeiten eingeleitet. Dieser Punkt ist ein wesentliches Ziel dieses Vorhabens.

Die Arbeiten für die ASTEC-Weiterentwicklung sind in RS1508 fortgesetzt worden. Es konnte die Expertise der GRS in Einzelpunkten (Einbau eines DCH-Modells in ASTEC mit Nachrechnung eines Experimentes hierzu, Identifikation von Entwicklungsbedarf für natriumgekühlte, schnelle Brutreaktoren im Projekt JASMIN, Bewertung des Entwicklungsstandes in ASTEC zu MCCI, Filtersystemen, Rekombinatoren, Pool-Scrubbing im Forschungsvorhaben CESAM) erfolgreich eingebracht werden. Die Erfahrungen zeigen aber, dass stärkere Fortschritte bei der ASTEC-Codeentwicklung durch die GRS wegen

der parallelen Bearbeitung zweier Entwicklungsstränge (COCOSYS und ASTEC) zukünftig nicht mit den verfügbaren Ressourcen möglich sind, u. a. deswegen, weil sich die Modellbasis immer weiter voneinander entfernt. Daher steht in diesem Forschungsvorhaben prioritär die Weiterentwicklung von COCOSYS (speziell auch in der Anbindung an ATHLET-CD) im Mittelpunkt und die Arbeiten der GRS zu ASTEC wurden mit dem Ende des EU-Vorhabens CESAM beendet.

Aus den Arbeiten zum Pool-Scrubbing wurde geschlossen, neue Modellierungsansätze erst auf der Basis von neuen verbesserten Experimenten zu erarbeiten. Sowohl die geplanten Experimente der RWTH Aachen als auch die Gründung einer internationalen Kooperation zum Pool-Scrubbing oder möglicherweise Daten aus PASSAM lassen den Zugriff auf neue Experimentaldaten durch die GRS in naher Zukunft erwarten.

Für die Zufriedenheit von externen Partnern bei der COCOSYS-Nutzung und nicht zuletzt auch als bedeutsames Mittel der Qualitätssicherung wurden in diesem Vorhaben entsprechende Arbeiten zur Nutzerunterstützung/Auswertung von Rückflüssen aus der Anwendung durchgeführt.

Für die Sicherstellung der internationalen Akzeptanz und der Kontinuität oder gar Ausweitung der Nutzung bei externen Partnern ist es zukünftig nötig, den Code COCOSYS in den Punkten Programmcode, Dokumentation, Anwenderfreundlichkeit zu konsolidieren.

## **2 Modellentwicklung zum Iod- und Spaltproduktverhalten**

### **2.1 Erweiterung des Energiedosisleistungsmodells**

Unter Unfallbedingungen können radioaktive Stoffe aus dem Reaktorkreislauf in den Sicherheitsbehälter freigesetzt werden. Eine Berechnung der örtlichen Energiedosisleistung ist z. B. für die Modellierung der Iodchemie, die Beurteilung der Situation im Hinblick auf die Durchführbarkeit von Notfallmaßnahmen in Räumen der Anlage und zur Bewertung des Versagens von sicherheitsrelevanten Komponenten im langzeitigen Bereich von großem Interesse.

Im Rahmen eines früheren COCOSYS-Entwicklungsvorhabens war ein erster Ansatz zur Berechnung der Energiedosisleistung im Sumpf des Containments in COCOSYS implementiert worden. Demnach wird die Energiedosisleistung im Sumpf analog zur Absorption der Gammastrahlung in Wandstrukturen berechnet. Der Ansatz ist für flache Sümpfe anwendbar und es wird zwischen abgelagerten und gelösten Spaltprodukten unterschieden, basierend auf einem festgelegten typischen DWR-Kerninventar mit einem Abbrand von 30 GWD/TSM. Eine Berechnung der Energiedosisleistung in der Atmosphäre und damit in verschiedenen Raumbereichen in denen die radioaktiven Stoffe luftgetragen oder auf Wänden und Strukturen abgelagert vorliegen können, ist bisher nicht möglich.

Um realistischere Prognosen zu den Auswirkungen z. B. auf die Iodchemie sowie auf sicherheitsrelevante Komponenten zu ermöglichen, ist eine Erweiterung der bestehenden Ansätze in COCOSYS wünschenswert. Als Zielsetzung sollte die Energiedosisleistung für alle atmosphärische Zonen und für alle Strukturen im Sicherheitsbehälter in diesen berechnet werden können sowie der Einfluss von Wasser, z. B. in möglichen Wasserfilmen auf Strukturen oder Wasservorlagen berücksichtigt werden.

Zu diesem Zwecke sind im Rahmen dieses Vorhabens Grundlagen für zweckmäßige Berechnungsverfahren zur Ermittlung der Energiedosisleistung in atmosphärischen Raumbereichen und in Strukturen ausführlich recherchiert und erprobt worden. Diese Arbeiten sind in einer detaillierten technischen Notiz dokumentiert worden /CHA 16/.

Im Rahmen dieser Grundlagen-Untersuchungen ist auch das in ASTEC verfügbare Dosisleistungsmodell untersucht worden. Das ASTEC-Modell erlaubt eine rudimentär vereinfachte Berechnung der Dosisleistung im Sicherheitsbehälter unter folgenden Einschränkungen:

- Das Modell berücksichtigt nur Beiträge der  $\beta$ - und  $\gamma$ -Strahlung von Iod und Ruthenium.
- Für die Berechnung der Energiedosisleistung auf einer Wand werden Vereinfachungen getroffen, deren Einflüsse noch unklar sind. Z. B. wird eine wandnahe Zone mit einer Schichtdicke von 10 cm definiert, innerhalb welcher die Absorption von Beta-Strahlung, ausgehend von einer Quelle auf der Wand oder von einer Volumenquelle innerhalb dieser an die Wand angrenzenden Schicht, auf die Dosisleistung an der Wand angerechnet wird. Die Definition der hierbei verwendeten Schichtdicke (10 cm) ist nicht diskutiert. Auch der verwendete empirische Koeffizient für die Anrechnung von  $\gamma$ -Strahlung, ausgehend von einer Quelle auf der Wand, auf die Dosisleistung an der Wand ist unklar.
- Das Modell weist Inkonsistenzen bei der Anrechnung von  $\beta$ - und  $\gamma$ -Strahlungsbeiträgen aus Flächen bzw. Volumenquellen auf die Dosisleistung an der Wand bzw. im Zonenvolumen auf.

Ohne Vergleich mit genaueren Methoden ist eine Einschätzung der Rechenergebnisse von vereinfachten Methoden, wie z. B. in ASTEC, nicht möglich. Als Grundlage für die Konzipierung eines zukünftigen, verbesserten Modells in COCOSYS wurden daher folgende weitergehende Untersuchungen durchgeführt:

- Zusammenstellung der wichtigsten Grundlagen und Parameter für Dosisleistungsberechnungen
- Identifikation offener Probleme bei der Verwendung des in COCOSYS vorhandenen Modells GAMPOW zur Absorption von  $\gamma$ -Strahlung
- Diskussion eines möglichen Modellansatzes basierend auf Sichtfaktoren (nicht empfohlen)
- Berechnung von  $\gamma$ -Spektren mithilfe des GRS-Modells NGSRC
- Systematische Studie von Strahlungstransportrechnungen mit dem 3D-Monte-Carlo-Rechencode MONACO bei grundlegenden Geometrien von Strahlungsquellen (Punktquelle/Flächenquelle/Volumenquelle)

- Strahlungstransportrechnungen im Sicherheitsbehälter (unter Variation der Komplexität der vorgegebenen Geometrie) mit dem 3D-Monte-Carlo-Rechencode MONACO

Sofern das in COCOSYS verfügbare Modell GAMPOW zukünftig zur Berechnung der Absorption von  $\gamma$ -Strahlung in erweitertem Kontext zum Einsatz kommen soll, müsste es auf die Verwendung verschiedener Materialien (Beton, Stahl, Wasser etc.) und auf die Berücksichtigung von tatsächlichen, zeitgenau vorgegebenen  $\gamma$ -Spektren auf Basis der von COCOSYS berechneten Spaltproduktverteilung erweitert werden.

Mit dem GRS-Rechenprogramm NGSRC wurde hierfür eine  $\gamma$ -Bibliothek mit den Spektren von jeweils 1 g Masse für eine COCOSYS-typische Isotopenliste erstellt. Ein zukünftiges Dosisleistungsmodell in COCOSYS könnte auf dieser Basis mithilfe der tatsächlichen, von COCOSYS übergebenen Isotopenmassen durch Skalierung das zeitgenaue  $\gamma$ -Spektrum einer lokalen Spaltproduktbeladung (Strahlungsquelle) berechnen.

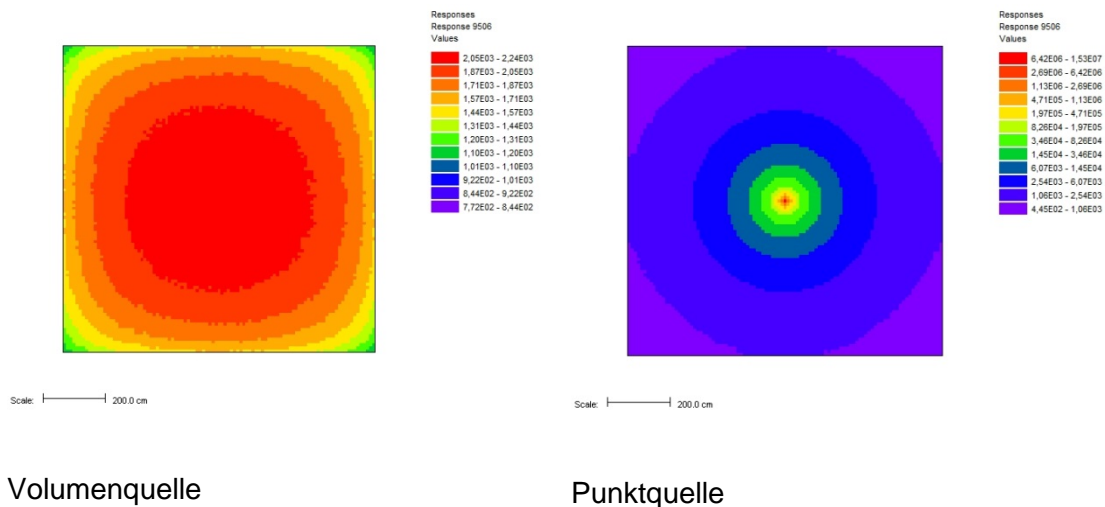
Das Modell müsste darüber hinaus für den Strahlungstransport und für die Absorption in einer weitaus komplexeren Anordnung von geometrischen Strukturen ertüchtigt werden. Bislang existiert nur eine eindimensionale Kombination einer Struktur, die an einen Gasraum angrenzt und die im Modell GAMPOW vorgesehen ist.

Die Vorgehensweise, diesen komplexen Strahlungstransport und die Absorption mittels des Konzepts der Sichtfaktoren anzunähern, wird nicht empfohlen, da es in diesem Konzept keine entlang der Lauflänge abnehmende Strahlungsintensität aufgrund von Absorption im Material gibt und die Geometrie der Strahlungsquelle komplexere Einflüsse hat, als im Konzept der Sichtfaktoren beschreibbar ist.

Eine durchgeführte systematische Studie von Strahlungstransportrechnungen mit dem 3D-Monte-Carlo-Rechencode MONACO für grundlegende Geometrien von Strahlungsquellen (Punktquelle/Flächenquelle/Volumenquelle) erlaubt Schlussfolgerungen für die Modellbildung zu der Fragestellung, unter welchen Bedingungen die Annäherung tatsächlicher Strahlungsquellen mit einfachen geometrischen Formen wie Punkt, Fläche oder Volumen zulässig und sinnvoll ist. In dieser Studie wurde die Energiedosisleistung für einen würfelförmigen Raum von 10 m x 10 m x 10 m mit 1 m dicken Seitenwänden, ausgehend von einer I-131 Strahlungsquelle, deren Energiespektrum zuvor mit NGSRC berechnet worden ist, mit dem Rechencode MONACO ausgewertet. In systematischen

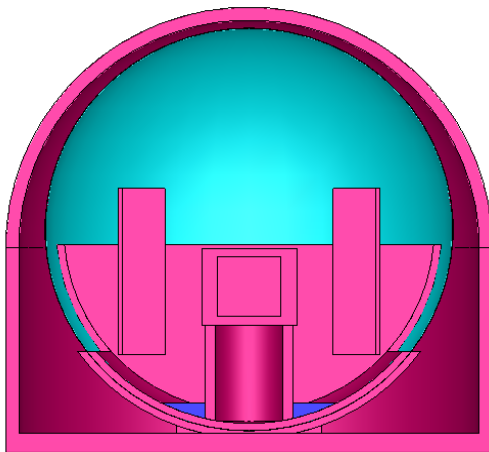


Variationsrechnungen wurden die Lokalisierung der Strahlungsquelle (Volumen oder Flächenquelle) und die Gegenwart eines Sumpfes (der Tiefe 1 m) in dem Raum variiert. Dabei wurde eine Volumenquelle auch immer alternativ durch eine Punktquelle abgebildet, siehe Abb. 2.1. Die hieraus gewonnenen Erkenntnisse wurden im Anschluss für die Aufbereitung von COCOSYS/ATHLET-CD-Rechnungen benutzt, um aus der mit COCOSYS berechneten Spaltproduktverteilung sinnvolle Randbedingungen für die darauf aufbauende Abschirmungsrechnung mit MONACO abzuleiten. Für detaillierte Ergebnisse hierzu wird auf die ausführliche technische Notiz verwiesen /CHA 16/.

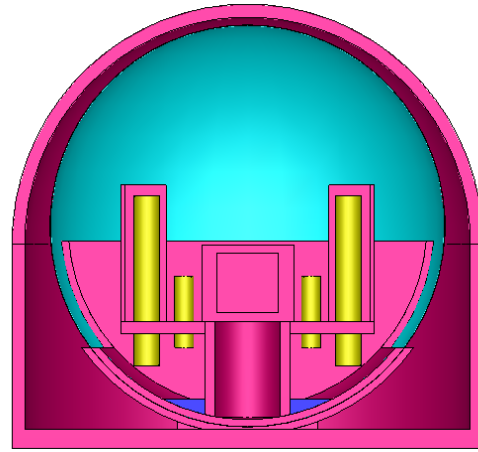


**Abb. 2.1** Vergleich der Kerma-Werte (KERMA = Kinetic Energy Relased per Unit Mass) von Sekundärpartikeln in Luft (Gy/h) für die Annahme einer volumetrisch gleich verteilten Strahlungsquelle (links) oder einer Punktquelle (rechts) innerhalb eines kubischen Raums /CHA 16/

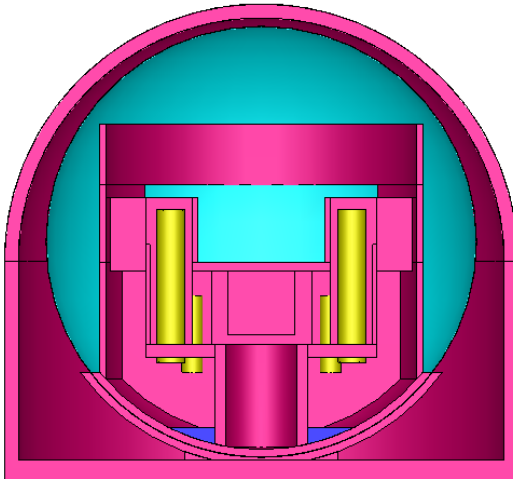
In weiterführenden Untersuchungen wurden gekoppelte Rechnungen mit ATHLET-CD und COCOSYS im Hinblick auf die berechnete Spaltproduktverteilung im Containment unter Berücksichtigung der oben gewonnenen Erkenntnisse ausgewertet und es wurden – basierend auf diesen Ergebnissen – Strahlungstransport- bzw. Abschirmungsrechnungen mit dem 3D-Rechencode MONACO unter Berücksichtigung der wichtigsten geometrischen Strukturen im Sicherheitsbehälter (vgl. Abb. 2.2) durchgeführt. Diese Rechnungen können zukünftig als Referenz für vereinfachte Modelle, wie dem für COCOSYS geplanten Dosisleistungsmodell, dienen. Basis ist ein Kühlwasserverlust-Störfall in einem DWR des Typs KONVOI mit einem 50 cm<sup>2</sup> großen Leck im heißseitigen Strang im Druckhalter-Kreislauf.



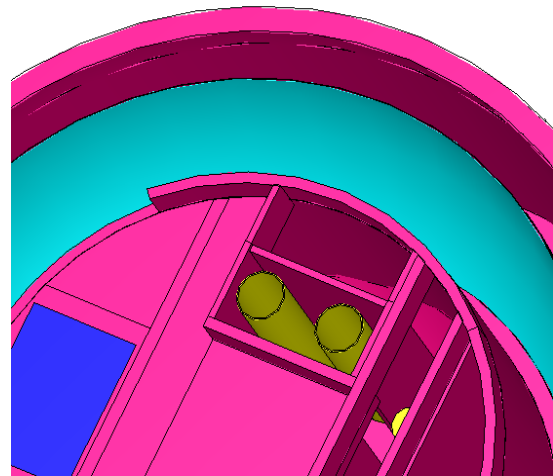
Geometrie-Modell 1



Geometrie-Modell 2



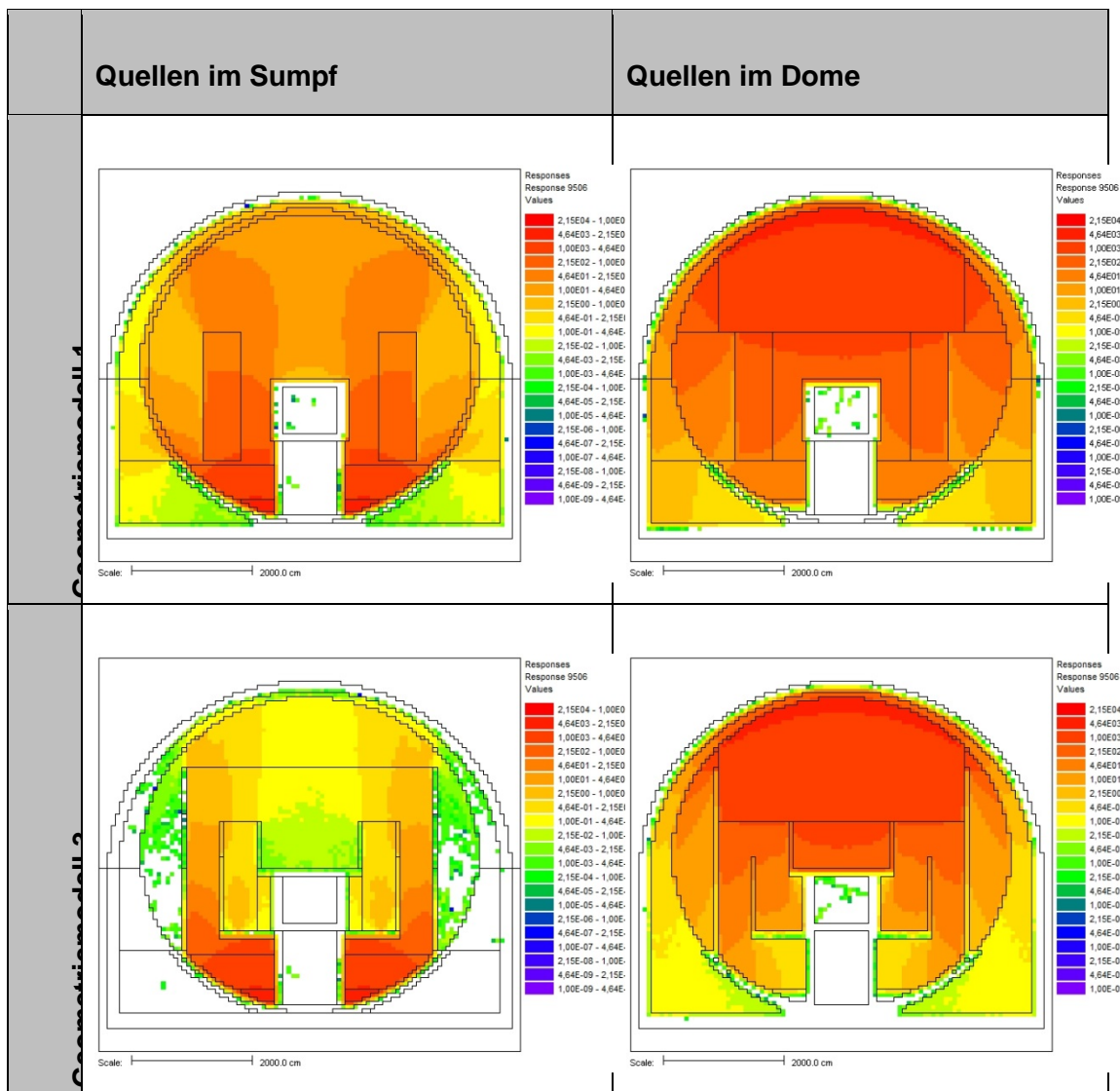
Geometrie-Modell 3



Geometrie Modell 3 (Schrägansicht)

**Abb. 2.2** Detaillierungsgrad des Modells in den drei untersuchten Geometriemodellen /CHA 16/

Im einfachsten geometrischen Modell 1 für die MONACO-Rechnungen sind der biologische Schild, der Reaktorraum, einige innere Wände von Betriebsräumen, die Dampferzeuger-Türme, die Stahlschale des Containments, das Reaktor-Gebäude, die Containment-Stützkonstruktion sowie der Wasserpool im Sumpf modelliert (Abb. 2.2). In den Modellen 2 und 3 sind zusätzlich die Systemkomponenten Dampferzeuger, Kühlpumpen und Druckhalter sowie der Boden in den Anlagenräumen modelliert (Modell 2) bzw. zusätzlich der Trümmerschutzzylinder, das Brennelementlagerbecken und eine Zwischendecke auf der Höhe des Brennelementlagerbeckens (Modell 3).



**Abb. 2.3** Rechenergebnisse mit MONACO für die kinetische Energie von Sekundärpartikeln (Kerma) in Luft (Gy/h)

Die Rechenergebnisse in Abb. 2.3 wurden auf der Basis der mit COCOSYS und ATHLET-CD berechneten und mit dem 5-Host-Konzept aufgearbeiteten Spaltproduktbelastung und angenommener volumetrischer Strahlungsquelle erstellt. In diesen Rechnungen wurde eine Strahlenquelle ausschließlich im Sumpf (link Spalte der Abb. 2.3) bzw. ausschließlich im Dome des Sicherheitsbehälters (rechts) unter Verwendung des Geometriemodells 1 (obere Zeile) bzw. 3 (untere Zeile) angenommen /CHA 16/. Sie zeigen exemplarisch den Unterschied zwischen der Verwendung von Geometriemodell 1 und 3 und damit welchen großen Einfluss die Berücksichtigung von Betonstrukturen im SB auf die Abschirmung von Strahlung hat.

Aufgrund der Erkenntnisse in den durchgeführten Arbeiten wird folgende Vorgehensweise bei der Best-Estimate-Ermittlung von Dosisleistungen im Sicherheitsbehälter mit den besten bei der GRS verfügbaren Methoden empfohlen:

1. Durchführung einer ersten COCOSYS-ATHLET-CD-Rechnung (Run 1) zur Ermittlung der Elemente bzw. Isotope, die die größten Beiträge zur Nachzerfallsleistung liefern (> 95 %, Ausgabevariable FIPHOST-FPBDMA-DECAY).
2. Aktivierung der detaillierten Ausgabe-Option im Modell FIPISO für die in Schritt 1 ausgewählten Hauptbeitragsleistenden zur Nachzerfallsleistung, um detaillierte Informationen zu Hosts und Zonen in einem wiederholten COCOSYS-Lauf (Run 2) zu erhalten.
3. Ermittlung der Zonen mit den größten Isotopenmassen im Run 2.
4. Berechnung eines  $\gamma$ -Spektrums der ausgewählten Isotope in den ausgewählten Zonen (entweder mit dem Modell FISPACT-2007 oder NGSRC).
5. Bau eines Geometriemodells für die Abschirmungsrechnung mit MONACO im Sicherheitsbehälter.
6. Zuweisung von COCOSYS-Hosts mit Spaltprodukten zu geometrischen Objekten in MONACO.
7. Durchführung der MONACO-Rechnung.

Die beschriebenen Arbeiten waren nötig, um eine Referenzrechnung für die Dosisleistung mit den besten, bei der GRS verfügbaren Methoden zu erhalten. Auf der Basis dieses Referenzfalls können vereinfachende Annahmen zur Erstellung eines vereinfachten Modells diskutiert werden.

Basierend auf den bisherigen Arbeitsergebnissen konnte allerdings kein Modellkonzept für eine vereinfachte Ermittlung der Energiedosisleistung in verschiedenen Raumbereichen im Sicherheitsbehälter abgeleitet werden, welches im Hinblick auf den Genauigkeitsanspruch und auf die dazu benötigte Rechenleistung ausgewogen für den Einsatz in COCOSYS erscheint. Die ursprünglich geplante Neu-Entwicklung eines Modells für COCOSYS konnte mit den in RS1532 eingeplanten Mitteln nicht realisiert werden und muss ggf. in einem späteren Vorhaben fortgeführt werden.

## 2.2 Verhalten von Silber-Partikeln im Sumpf

Das in diesem Abschnitt behandelte „Verhalten von Silber-Partikeln im Sumpf“ wird weitgehend einheitlich behandelt zu dem Thema „Chemisorption von  $I_2$  auf Aerosolpartikeln“ in Abschnitt 2.6, da die betrachteten chemischen Reaktionen bei beiden Teilaufgaben dieselben sind. Von entscheidender Bedeutung ist jeweils die vorhandene reaktive Oberfläche von aerosolförmigen Silberpartikeln im Sumpf oder in der Atmosphäre. Für beide Fälle wird die reaktive Oberfläche anhand der Partikelgrößenverteilung des Silbers berechnet, was zu einer schnelleren Reaktion auf kleineren Partikeln führt, da das Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis für kleinere Partikel größer ist. Entsprechende von der Größenverteilung abhängige heterogene Reaktionen wurden auch für die in der Atmosphäre und im Sumpf abgelagerten Silberaerosole implementiert. Die dargestellte Modellentwicklung erfolgte in neu strukturierten AFP-Modul „NEWAFP“ (vgl. Abschnitt 2.8).

### 2.2.1 Chemisches Modell

Die hier betrachtete chemische Reaktion ist die Bildung von aerosolförmigem Silberiodid aus der Reaktion von aerosolförmigen Silberpartikeln mit gasförmigem Iod ( $I_2$ ) in der Atmosphäre bzw. gelöstem  $I_2$  im Sumpf. In beiden Fällen ist die verfügbare Silberoberfläche auf den Aerosolpartikeln von entscheidender Bedeutung. Zunächst wird allgemein auf die Berechnung der reaktiven Silberoberflächen in einem Misch aerosol eingegangen. Danach werden die chemischen Reaktionen der Silber-Iod-Reaktion im Sumpf und an Wandoberflächen unter Wasser beschrieben. Die Beschreibung der Modellierung der Silber-Iod-Reaktion in der Atmosphäre erfolgt in Abschnitt 2.6.

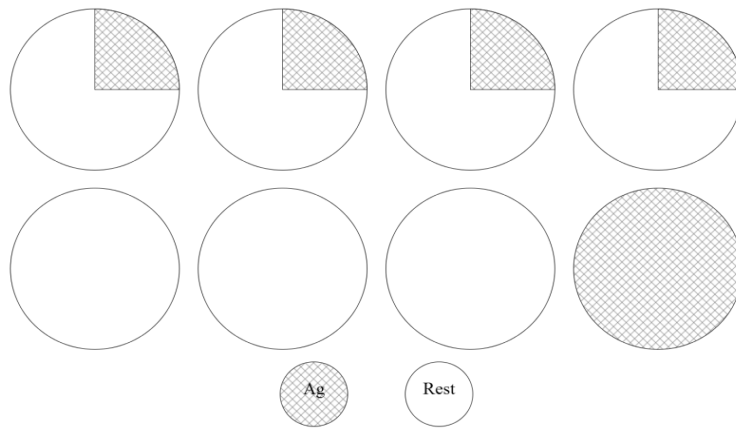
#### 2.2.1.1 Berechnung der Silberoberfläche auf Mehrkomponentenaerosol

Die Berechnung der Silberoberfläche erfolgt anhand der vorhandenen Partikelgrößenverteilung mit den Größenklassen  $j$  mit Durchmessern  $d_j$  über die spezifische Oberfläche  $S_{surf}$  [ $m^2/kg$ ] (Variable ‚ssurf‘ im Code) der einzelnen Aerosolkomponenten. Die Masse  $m_j$  steht für die Masse der betrachteten Komponente in der Größenklasse  $j$ ,  $N_j$  für die Anzahl von ganzen Partikeln der betrachteten Komponente,  $V_j$  für das Volumen  $N_j \frac{\pi}{6} d_j^3$  und  $\rho$  für die Dichte der Partikel (= als konstant angenommene Dichte des Misch aerosols):

$$\begin{aligned}
S_{surf} &= \frac{\sum_j N_j \pi d_j^2}{\sum_j m_j} = \frac{\sum_j \frac{6}{d_j} N_j \frac{\pi d_j^3}{6}}{\sum_j m_j} = \frac{\sum_j \frac{6}{d_j} V_j}{\sum_j m_j} = \frac{\sum_j \frac{6}{d_j} \frac{m_j}{\rho}}{\sum_j m_j} \\
&= \frac{6 \sum_j \frac{m_j}{d_j}}{\rho \sum_j m_j}
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Dabei wird die Silberkomponente als unabhängig von dem Rest des Mischerosols angenommen, d. h. in Gl. (2.1) wird angenommen, die gesamte Partikelverteilung bestehe nur aus Partikeln  $N_j$  der betrachteten Komponente. Weiterhin ist einschränkend zu beachten, dass im Aerosolmodell z. B. immer nur mit einer einzelnen Dichte für das gesamte Aerosol gerechnet wird und die Grundannahme besteht, dass ein Partikel immer eine Kugel ist, was durch einen einzelnen Formfaktor ggf. korrigiert wird.

Abb. 2.4 soll die Rechtfertigung dieser Annahme anhand einer einzelnen Partikelgrößenklasse verdeutlichen. In der oberen Reihe ist ein Mischerosol bestehend aus 1/4 Silber und 3/4 für andere Aerosolkomponenten (Rest) dargestellt. Unter der Annahme, dass das Silber nicht im Inneren der Partikel konzentriert ist, entfällt in der schematischen Zeichnung 1/4 der Oberfläche eines Partikels auf Silber, was zu insgesamt einer kompletten Partikeloberfläche führt. In der zweiten Reihe sind drei Restpartikel und ein Silberpartikel separat aufgeführt (d. h.  $N_j = 1$ , wenn Silber betrachtet wird). Es wird deutlich, dass die zu erwartende Oberfläche dieselbe ist wie im ersten Fall.  $S_{surf}$  wird über die bereits in NEWAFP (vgl. Überarbeitung des Aerosolmodells in der COCOSYS Entwicklerversion, Kap. 2.8) vorhandene Routine „Calc\_Median\_Diameters“ über den Sauterdurchmesser ( $= \sum_j m_j / (\sum_j m_j / d_j)$ ) berechnet.



**Abb. 2.4:** Silberoberfläche in Mehrkomponentenaerosol

Da die beschriebene Reaktion zwischen der Silberoberfläche der Partikel und dem umgebenen Medium stattfindet, liegt die Annahme nahe, dass sich das Silberiodid vor allem auf der Oberfläche der Partikel bildet, nicht im Volumen. Daher wird für die Betrachtung der Reaktion in der Atmosphäre (vgl. Abschnitt 2.6) die verfügbare Silberoberfläche der Partikel um die berechnete Oberfläche des gebildeten Silberiodids korrigiert. Eine Einschränkung besteht für den Sumpf: Die Verringerung der reaktiven Ag-Oberfläche durch gebildetes AgI wird für die Reaktion im Sumpf zurzeit nicht betrachtet. Dadurch wird die gesamte Reaktionsdauer im Sumpf tendenziell eher überschätzt. Dennoch wird ein wichtiger Effekt der Partikelverteilung simuliert: Die Silberaerosole mit kleinem Partikeldurchmesser werden auf Grund des größeren Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnisses schneller konsumiert als die großen, was insgesamt eine dynamische Abnahme der spezifischen Silberoberfläche  $S_{surf}$  zur Folge hat. Weitere Untersuchungen mit diesem Modell könnten es in der Zukunft notwendig machen, eine Korrektur der verfügbaren Silber-Oberfläche im Sumpf zu berücksichtigen. Dabei sollte überlegt werden, ob die verringerte Oberfläche für jede Größenklasse berechnet wird, statt wie bisher in der Atmosphärenreaktion über die gesamte Oberfläche der Partikelverteilung.

Das erzeugte Silberiodid wird entsprechend der Partikelgrößenverteilung des vorhandenen Silbers auf die Größenklassen folgenderweise verteilt: Innerhalb der gekapselten Datenstrukturen des AIM-Moduls (Datei „aim\_module.f90“) wird in den homogenen Reaktionen „AIM\_I2\_silver\_reac\_fw“ im Sumpf und „AIM\_I2\_silver\_reac\_atm\_fw“ in der Atmosphäre eine reaktionsabhängige Verteilung von Distributionsfaktoren für die Größenklassen in dem Feld „reac%dis%disfac“ gespeichert. Diese Verteilung legt fest, dass die umgesetzten chemischen Massen entsprechend der relativen Oberflächenanteile des

Silbers auf die Größenklassen verteilt werden. Die Berechnung der relativen Oberflächengrößenverteilung  $O(d_i)$  aus der Massenverteilung  $M(d_i)$  erfolgt mithilfe der Beziehung von Oberfläche-zu-Volumen einer Kugel ( $\pi d^2 / \frac{\pi d^3}{6} = 6/d$ ) mit der Gleichung:

$$O(d_i) = \frac{M(d_i)}{d_i} \frac{1}{\sum \frac{M(d_i)}{d_i}} \quad (2.2)$$

Der zweite Bruch auf der rechten Seite ist die Normierung der Oberflächenverteilung auf 1, daher müssen bei der Umrechnung von Massen auf Oberflächen auch keine Vorfaktoren berücksichtigt werden. Ein Wachstum der Partikel mit Verschiebung eines Anteils in die größere Größenklasse wird nicht berücksichtigt.

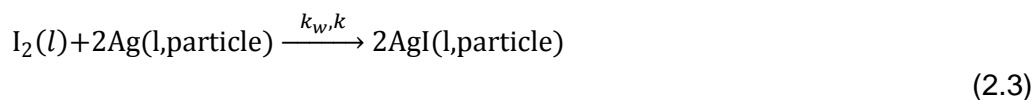
Bei den heterogenen Funktionen für die Reaktion zwischen Sumpfvolumen und Oberfläche „AIM\_I2\_silver\_reac\_het\_fw“ und zwischen Sumpfvolumen und Atmosphäre „AIM\_I2\_silver\_dep\_atm\_fw“ wird zwar die Partikelgrößenverteilung des Ag, also des Ausgangsstoffes berücksichtigt, die Verteilung des gebildeten AgI erfolgt zurzeit vereinfachend gleichmäßig über alle Größenklassen. Die Modellierung einer größenklassen-abhängigen Reaktion hat eine Begrenzung darin, dass in dem COCOSYS-Aerosolmodell mit derselben Dichte für Silber und dem übrigen Aerosolmaterial gerechnet wird, was in der Realität nicht der Fall ist. Dieses ist allerdings auch eine vereinfachende Grundannahme in dem COCOSYS-Aerosolmodell AERIKA.

Weiter existieren auch andere Modellüberlegungen, die auf der Basis der Diffusion von  $I_2$  in das poröse Aerosolmaterial beruhen, wie sie für das Verhalten von Natriumaerosolen in schnellen, natriumgekühlten Reaktoren diskutiert werden. Da diese Modellbetrachtungen im Detail weit über den belegbaren Kenntnisstand aus Experimenten hinausgehen, ist an dieser Stelle zunächst eine möglichst einfache Modellierung gewählt worden. Die Berechnung der spezifischen Partikeloberfläche kann bei vorhandenen genaueren Erkenntnissen geändert werden.

### 2.2.1.2 Silber-Iod Reaktion im Sumpf

Die Silberiodid-Bildung im Sumpfvolumen erfolgt nach folgender chemischen Reaktionsgleichung:





Sie ist abhängig von der Konzentration des gelösten  $I_2$  und der Konzentration von Silber, das sich im Wasser in Aerosolpartikeln gebunden befindet. Die chemische Abnahme von  $I_2$  wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{dI_2}{dt} = \frac{1}{\frac{1}{k_w} + \frac{1}{k Ag}} I_2 Ag S_{Ag} M_{Ag}, \quad (2.4)$$

mit dem wasserseitigen Transferkoeffizienten  $k_w$  und dem Reaktionskoeffizienten  $k$ .

Die spezifische Silberoberfläche  $S_{Ag}$  in  $m^2/kg$  hängt ab von der vorhandenen Partikelgrößenverteilung, da kleinere Partikel ein größeres Oberfläche-zu-Volumen-Verhältnis haben als große Partikel. Die Annahme ist, dass nur Partikel auf der Oberfläche eines Misch-aerosols reagieren können. Die Reaktionskonstante wird aus dem wasserseitigen Massentransferkoeffizienten  $k_w$  und dem Wert  $k$  berechnet. Die Bedeutung der einzelnen Parameter ist wie folgt:

$Ag$  Ag-Konzentration in  $kmol/m^3$

$I_2$   $I_2$  Konzentration in  $kmol/m^3$

$k_w$  Wasserseitige Massentransfer Konstante in  $m/s$

$k$  BAS =  $0,2 \frac{m}{s} \frac{m^3}{kmol}$ ; EAKT = 0

$S_{Ag}$  Spezifische Fläche aller Silberpartikel  $m^2/kg$ , d. h. die Gesamtsilberoberfläche geteilt durch deren Masse. Diese wird abhängig von der Partikelgrößenverteilung berechnet.

$M_{Ag}$  Molare Silbermasse in kg/kmol

$t$  Zeit in s

### 2.2.1.3 Silber-Iod Reaktion an Oberflächen im Sumpf

Die heterogene Silber-Iod Reaktion abgelagerter Silberpartikel auf Oberflächen im Sumpf unterscheidet sich nicht von der Silber-Iod-Reaktion im Sumpfvolumen, außer dass die Reaktion zwischen im Wasser gelöstem  $I_2$  und abgelagerten Ag-Partikeln auf der Oberfläche erfolgt und abgelagertes AgI erzeugt wird:



Es handelt sich also um eine heterogene Reaktion mit den abgelagerten Silberpartikeln auf wasserbedeckten Oberflächen. Die Reaktion läuft nach derselben Ratengleichung ab:

$$\frac{dI_2}{dt} = \frac{1}{\frac{1}{k_w} + \frac{1}{k Ag}} I_2 Ag S_{Ag} M_{Ag}. \quad (2.6)$$

Die Parameter haben dieselbe Bedeutung wie für die Reaktion im Sumpfvolumen. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass das auf den Oberflächen abgelagerte Silber mit dem im Wasserpool gelösten  $I_2$  reagiert. Für die Silberkonzentration im betrachteten Sumpfvolumen  $Ag$  gilt daher

$$Ag = Ag_S \frac{A_S}{V_S} \quad (2.7)$$

$Ag_S$  Ag-Oberflächenkonzentration in kmol/m<sup>2</sup>

$A_S$  Sumpfoberfläche in m<sup>2</sup>

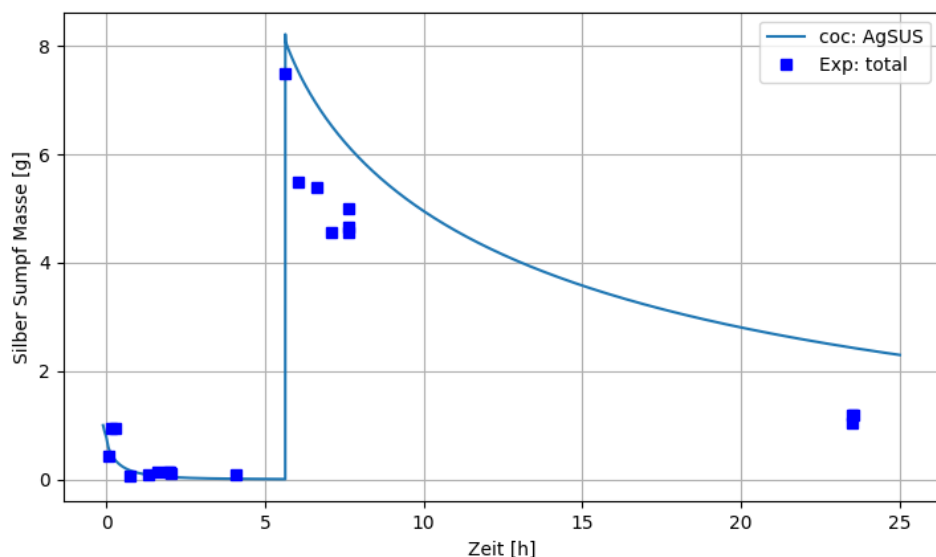
$V_S$  Sumpfvolumen in m<sup>3</sup>

$$k_{\text{BAS}} = 0,2 \frac{\text{m}}{\text{s}} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol}}; \text{EAKT} = 0$$

Zusätzlich erfolgt eine Limitierung auf die Gesamtoberfläche der Struktur, da oben liegende Partikel weiter unten liegende verdecken.

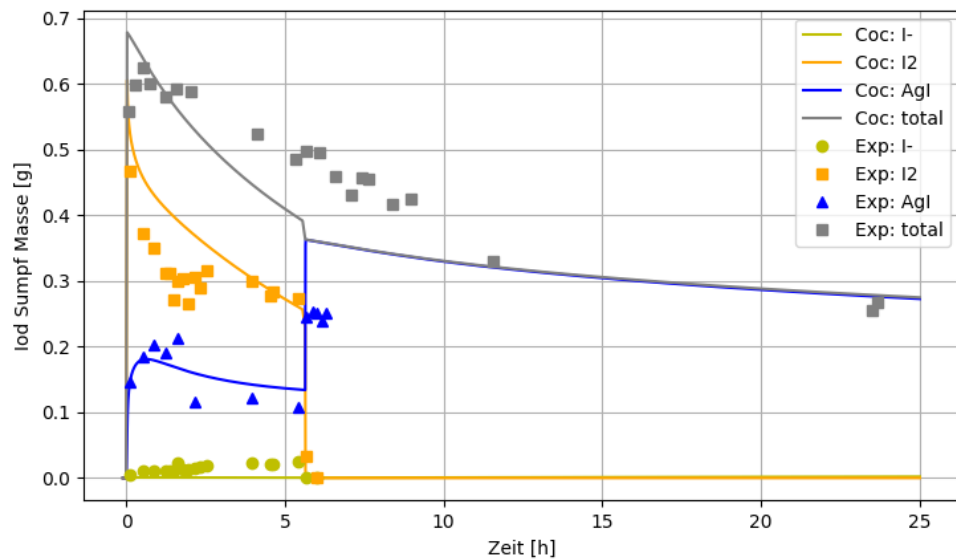
### 2.2.2 Anwendung auf den Versuch THAI AW-3

Der THAI-Versuch AW-3 (2. Teil) /FUN 16/ ist durchgeführt worden, um die Reaktion von im Sumpfungstragenen Silberpartikeln mit gelöstem  $\text{I}_2$  zu untersuchen. In dem Versuch ist zunächst Silber auf den Oberflächen im Sumpf abgelagert worden, bevor zum Zeitpunkt  $t = 0$   $\text{I}_2$  in das Wasser geleitet worden ist. Da zu diesem Zeitpunkt ein großer Teil Silber auf den Oberflächen abgelagert ist und nicht im Sumpf verteilt vorliegt, verlief die  $\text{I}_2$ -Abnahme zunächst recht langsam. Aufgrund von Aufwirbelung während der  $\text{I}_2$ -Einspeisung wird etwa 1 g Silbermaterial von der Oberfläche in die Wasserphase transportiert. Dieses Verhalten wird in COCOSYS mit einer Anfangsmasse von 1 g Silber mit einer bimodalen Verteilung im Sumpf modelliert. In einem zweiten Schritt nach etwa 5,6 h ist das Silber aufgewirbelt und auch weiteres Silber eingespeist worden. Die gemessene Silbermasse im Sumpfwasser wird in Abb. 2.5 mit der COCOSYS-Rechnung verglichen.



**Abb. 2.5** Vergleich der berechneten und gemessenen Silbermenge im Sumpfwasser, THAI AW-3

Die Nachrechnung dieses Versuchs bezüglich des Iodverhaltens ist in Abb. 2.6 dargestellt. Die Kurven mit Symbolen zeigen die Messwerte, während die Kurven ohne Symbole die COCOSYS-Ergebnisse zeigen. Orange kennzeichnet die I<sub>2</sub>-Masse, blau die AgI-Masse und grünelb die I-Masse, wobei nur der Iodanteil bei der Massenbestimmung des AgI berücksichtigt ist, um die Werte direkt mit den reinen Iodspezies vergleichen zu können. Die graue Kurve zeigt die berechnete Iodmasse im Sumpf, die aufgrund der Verluste an der Oberfläche abnimmt. Diese wird mit experimentellen Messungen der gesamten Iodmasse, die mittels Iod-123-Tracer gewonnen worden sind, verglichen. Die I<sub>2</sub>-Abnahme während der Phase mit nur abgelagertem Ag wird gut von COCOSYS berechnet mit einer Abnahme von 0,68 g auf 0,28 g nach 5,6 h. Die im Wasser getragene AgI-Masse nimmt bis auf etwa 0,2 g zu. Im zweiten Teil nach 5,6 h werden weitere 8,6 g und damit eine über-stöchiometrische Menge Silber in den Sumpf eingebracht. Dadurch wird eine beinahe vollständige Abnahme der I<sub>2</sub>-Konzentration erzielt. Dieses Verhalten wird mit COCOSYS korrekt wiedergegeben.



**Abb. 2.6** Vergleich der berechneten und gemessenen Iodkonzentrationen, THAI AW-3

Eine weitergehende Diskussion der gesamten Thematik in Sumpf und Atmosphäre erfolgt in Abschnitt 2.6.5.

## 2.3 Verbesserung des I<sub>2</sub>/Farbe-Modells

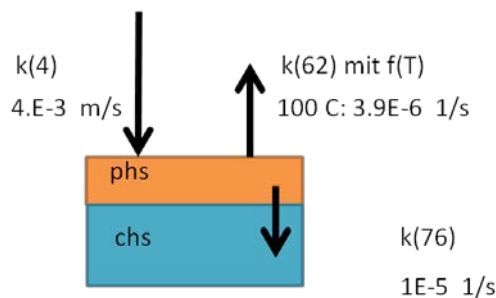
Die Reaktion von molekularem Iod (I<sub>2</sub>) mit der Dekontaminationsfarbe auf den Oberflächen im Containment hat auf das Iodverhalten in einem Unfall mit Freisetzung radioaktiver Stoffe ins Containment großen Einfluss. Wegen des starken Adsorptionsvermögens der Farbe für I<sub>2</sub> und der großen Oberflächen ist die I<sub>2</sub>/Farbe-Reaktion die größte I<sub>2</sub>-Senke für die Gasphase des Containments. Das auf der Farbe abgelagerte Iod wird schnell und chemisch gebunden (chemisorbiert). Es bildet thermisch und unter Einfluss von radioaktiver Strahlung Organoiod, u. a. (CH<sub>3</sub>I), das wieder in die Gasphase freigesetzt wird. Die Farboberflächen stellen daher die stärkste Organoiodquelle im Containment dar.

Die I<sub>2</sub>/Farbe-Reaktion war bzw. ist in einigen Projekten (OECD-BIP /BIP 14/, THAI-Iod-Experimente /FUN 15/ und OECD-STEM /STE 14/) Gegenstand intensiver experimenteller Untersuchungen. Die gewonnenen Daten dienen der Weiterentwicklung und Validierung der Modelle.

Das Iodmodell AIM und damit auch das I<sub>2</sub>/Farbe-Modell sind semi-empirisch angelegt. Die wesentlichen Reaktionen und Abhängigkeiten von Randbedingungen (thermohydraulische Größen, Farbalter etc.) werden vereinfacht abgebildet. Mit dem bisherigen I<sub>2</sub>/Farbe-Modell konnten vor allem neuere Iodversuche aus den BIP- und THAI-Projekten nur sehr ungenau nachgerechnet werden. Die Abweichungen waren vor allem bei geringer Feuchte (< ca. 60 %) und niedriger Temperatur (< ca. 60 °C) sehr groß.

### 2.3.1 Bisheriges I<sub>2</sub>/Farbe-Modell

Das bisherige Zweistufenmodell ist schematisch in Abb. 2.7 dargestellt /WEB 09/. In der ersten Stufe wird I<sub>2</sub> (g) aus der Atmosphäre mit der Geschwindigkeit k(4) auf der Farboberfläche abgelagert. Dieses physisorbierte I<sub>2</sub> ist wiederfreisetzbar. Eine Wiederfreisetzung (Resuspension) erfolgt bei Temperaturerhöhung der Farbe oder einer Absenkung von I<sub>2</sub> (g). Die Desorption verläuft mit der temperaturabhängigen Rate k(62). Aus dem physisorbierten I<sub>2</sub> entsteht durch Reaktion mit der Farbe und der Rate k(76) chemisorbiertes, also fest gebundenes Iod.



**Abb. 2.7** Bisheriges I<sub>2</sub>/Farbe-Modell für trockene Wände (schematisch)

Die problematischen Punkte im bisherigen I<sub>2</sub>/Farbe-Modell in AIM-3 betreffen:

- Die Konzentration von physisorbiertem Iod auf Farbe wird stark überschätzt (betrifft alle THAI-Iod-Versuche, alle BIP-Versuche und alle Anwendungen). Das physisorbierte Iod wird in COCOSYS-AIM-Unfallrechnungen bei einem Temperaturanstieg in erheblichen Mengen wieder in die Containmentatmosphäre freigesetzt /SCH 14/.
- Das Modell enthält keine Feuchte-Abhängigkeit der Chemisorption auf Farbe. Diese wurde in den THAI-Versuchen Iod-27a, Iod-28 und Iod-30 sowie den BIP-Adsorptionsversuchen eindeutig gemessen /BEC 14/.
- Das Modell enthält keine Temperatur-Abhängigkeit für Chemisorption auf Farbe. Diese wurde in den BIP-Versuchen gemessen und ist auch aus chemischen Gründen zu erwarten /FUN 14/.
- Die Beladung von physisorbiertem und chemisorbiertem Iod ist im Modell eng gekoppelt. Eine Reduktion der chemisorbierten Konzentration (Beladung) bewirkt einen Anstieg der physisorbierten Beladung. Die Summe aus beiden ergibt die gesamte Iodbeladung und bleibt konstant. Dies entspricht nicht der Realität. In Messungen variiert – je nach Bedingung – die Gesamtbeladung stark /BEC 14/.

### 2.3.2 Überarbeitetes I<sub>2</sub>/Farbe-Modell

Das I<sub>2</sub>/Farbe-Modell wurde grundlegend überarbeitet. So sind im neuen Modell die Physisorption und Chemisorption von Iod entkoppelt und es werden die Abhängigkeiten von relativer Feuchte (rh) und Temperatur (T) der Chemisorption durch eine neue Funktion, die von der absoluten Feuchte in der Atmosphäre abhängt, berücksichtigt.

Der Zusammenhang zwischen absoluter und relativer Feuchte ist:

$$\rho_{st} = \frac{rh \cdot \rho_{st,sat}(T)}{100} \quad (2.8)$$

$\rho_{st}$  absolute Feuchte bzw. Dampfdichte, kg/m<sup>3</sup>

$\rho_{st,sat}$  Dampfdichte bei Sättigung, kg/m<sup>3</sup>

rh relative Feuchte, %

Die Ergebnisse aus Messungen der adsorbierten Iodmenge bei veränderter Temperatur und veränderter Feuchte im OECD-BIP schienen bisher weitgehend unabhängig voneinander zu sein. Mit der Dampfdichte als neuer Variablen lassen sich nun die Iodmessungen einheitlich darstellen (Abb. 2.9).

Die wesentlichen Modell-Änderungen sind im Einzelnen:

- Die Chemisorptionsrate ist nicht mehr von der physisorbierten I<sub>2</sub>-Menge abhängig. Vielmehr ist die Physisorptionsrate ein bestimmter, konstanter Teil der Chemisorptionsrate. Die Physisorptionsreaktion k(4) im bisherigen Modell (s. Abb. 2.7) wurde stillgelegt.
- Die Chemisorptionsrate nimmt mit kleiner werdender Dampfdichte (absolute Feuchte) stark ab. Damit ist auch indirekt die gemessene Temperaturabhängigkeit der Chemisorptionsgeschwindigkeit bei konstanter Dampfdichte erfasst.
- Die Speicherkapazität für chemisorbiertes Iod ist beschränkt. Nach Ausschöpfen der Kapazität wird kein Iod mehr adsorbiert.
- Organoiod kann thermisch und radiolytisch nur aus chemisorbiertem Iod gebildet werden. Die im alten Modell angenommene Bildung aus physisorbiertem Iod wurde eliminiert.

Die Änderungsschritte sind im Folgenden näher erläutert:

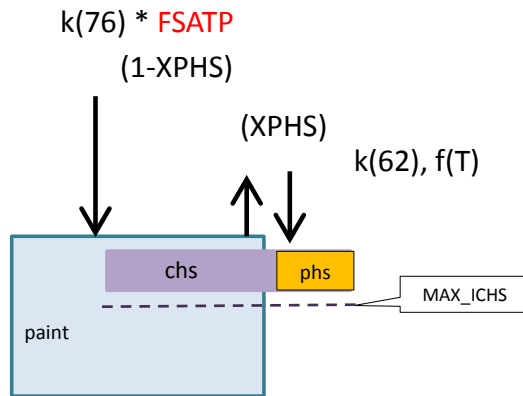
- Das bisher eingesetzte Zweistufenmodell wird durch ein Einstufenmodell ersetzt. Das größte Problem mit dem Zweistufenmodell war die Abhängigkeit der Chemisorptionsrate von der physisorbierten I<sub>2</sub>-Menge. Die Gegenläufigkeit der Tempera-

tur-Abhängigkeit von Physi- und Chemisorption führte auch zu erheblichen Schwierigkeiten. Auch wurde die physisorbierte  $I_2$ -Menge, die bei einer Temperaturerhöhung der Wand oder einer  $I_2$ -Konzentrationsabsenkung im Gas wieder freigesetzt wird, drastisch überschätzt.

- Die Feuchte in der Atmosphäre hat einen maßgeblichen Einfluss auf die Chemisorptionsgeschwindigkeit. Nicht die relative Feuchte ist, wie früher allgemein angenommen, der relevante Parameter, sondern die absolute Feuchte, also die Dampfdichte (= Dampfmasse / Volumen). Als Feuchtefunktion (FSATP) wird eine aus den BIP- und den THAI-Iod-Versuchen abgeleitete Korrelation angesetzt. Generell nimmt die Chemisorptionsrate mit der absoluten Feuchte zu. Für Farbe hat sich eine exponentielle Funktion bewährt. Einzelheiten dazu sind weiter unten beschrieben.
- Wie die BIP-Versuche zeigen, nimmt die Chemisorptionsrate von  $I_2$  auf Farbe bei größerer Iodbelastung ab, da die Plätze für chemisorbiertes Iod an der Oberfläche und in den Poren der Farbe limitiert sind. Gut zu erkennen ist das Abweichen vom linearen Beladeverhalten in BIP-Messungen, wie z. B. in Abb. 2.10. Im Modell muss die maximal chemisorbierbare Iodmenge in der Eingabe vorgegeben werden. Es ist zu erwarten aber noch nicht bestätigt, dass die Speicherkapazität unter anderem vom Farbalter abhängt.
- Im alten Modell war neben der thermischen und radiolytischen Bildung von Organoiod aus chemisorbiertem Iod auch die Bildung aus physisorbiertem Iod möglich (Reaktionen 14 und 7). Diese Reaktionen wurden wegen der zu gering berechneten chemisorbierten Iodmenge benötigt. Dies ist nicht mehr der Fall. Die Reaktionen 14 und 7 sind auch chemisch schwer zu rechtfertigen und werden daher eliminiert.

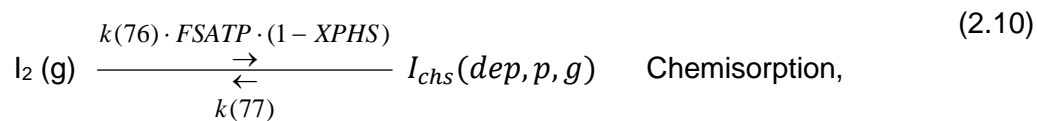
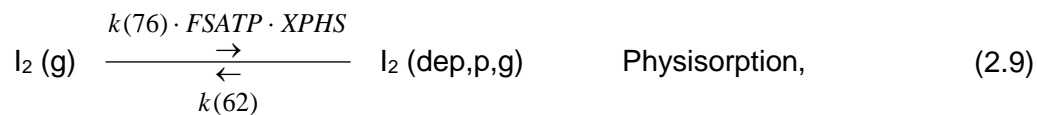
In Abb. 2.8 ist das verbesserte  $I_2$ /Farbe-Modell schematisch dargestellt.





**Abb. 2.8** Neues I<sub>2</sub>/Farbe-Modell für trockene Wände (schematisch)

Die chemische Formulierung in AIM ist:



$I_2(g)$  molekulares Iod in der Gasphase, (mol/l)

$I_2(dep,p,g)$  physisorbiertes I<sub>2</sub> auf Farboberflächen mit Kontakt zur Gasphase, (mol/m<sup>2</sup>)

$I_{chs}(dep,p,g)$  chemisorbiertes I<sub>2</sub> auf Farboberflächen mit Kontakt zur Gasphase, (mol/m<sup>2</sup>)

FSATP dimensionslose Funktion der Dampfdichte zur Beschreibung des Einflusses der Feuchte und der Temperatur auf die Chemisorptionsreaktion

k(76) Chemisorptionsreaktions-Konstante; BAS (76), EAKT (76) = 0

XPHS Aufteilungsfaktor: Anteil physisorbierten I<sub>2</sub> an der gesamten I<sub>2</sub> Adsorptionsrate

Die in COCOSYS-AIM verwendeten  $BAS_i$ -Werte sind die Reaktionskonstanten bei einer Temperatur von  $T = 25 \text{ °C}$ . Der Arrhenius-Ansatz wird verwendet, um die Reaktionsgeschwindigkeiten von chemischen Reaktionen bei höheren Temperaturen zu berechnen. Bei  $T = 25 \text{ °C}$  ist  $k_i = BAS_i$ .

$$k_i = BAS_i \cdot \exp \left[ \frac{EAKT_i}{T \cdot R \cdot 298.15} \right] \quad (2.11)$$

$k_i$  Geschwindigkeitskonstante einer Reaktion

Die kinetischen Gleichungen für die betroffenen Spezies molekulares Iod in der Gasphase sowie physisorbiertes (Gl. 2.8) und chemisorbiertes (Gl. 2.9) Iod auf Farbe sind:

$$\begin{aligned} \frac{dI_2(g)}{dt} = & -k(76) \cdot I_2(g) \cdot FSATP \\ & \cdot \left( XPHS + (1 - XPHS) \left( 1 - \frac{I_{chs}(dep, p, g)}{I_{chs,max}} \right) \right) \\ & \cdot \frac{S_{PAINT,G}}{V_G} + k(62) \cdot I_2(dep, p, g) \cdot \frac{S_{PAINT,G}}{1000 V_G} \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{dI_2(dep, p, g)}{dt} = & +k(76) \cdot I_2(g) \cdot FSATP \cdot XPHS \cdot 1000 - k(62) \\ & \cdot I_2(dep, p, g) \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dI_{chs}(dep, p, g)}{dt} = & +k(76) \cdot I_2(g) \cdot (1 - XPHS) \cdot FSATP \\ & \cdot \left( 1 - \frac{I_{chs}(dep, p, g)}{I_{chs,max}} \right) \cdot 2 \cdot 1000 \end{aligned} \quad (2.14)$$

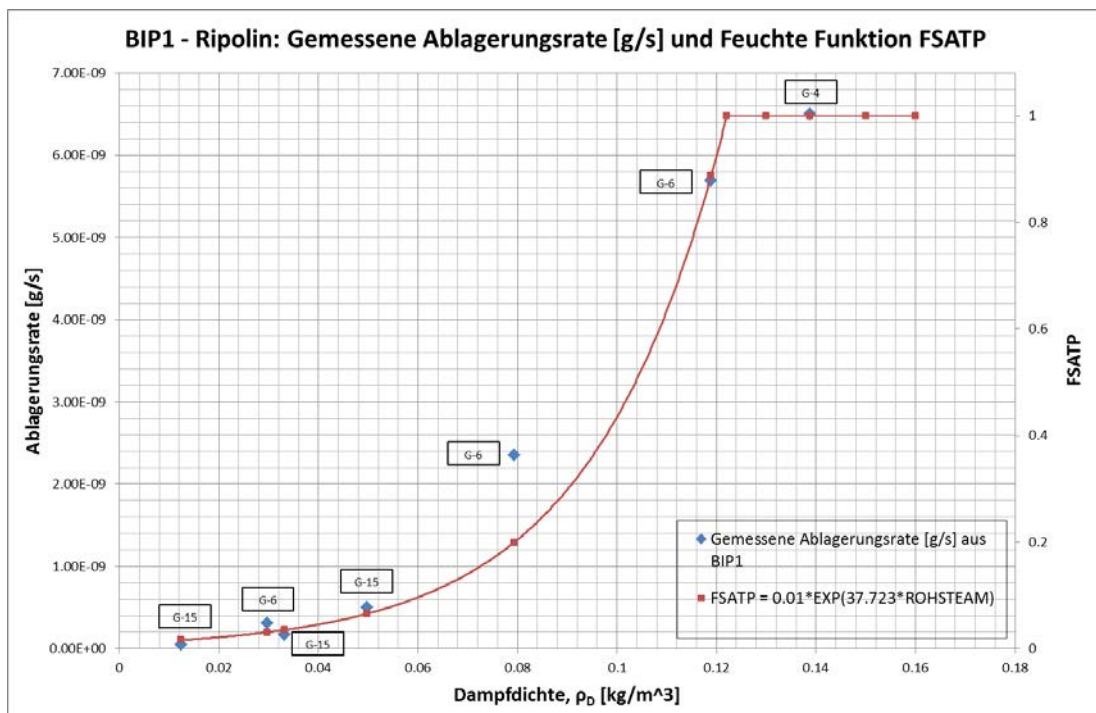
$I_{chs,max}$  maximale chemisorbierte  $I_2$ -Masse auf der Farboberfläche, ( $\text{mol/m}^2$ ).  
Masse kann vom Alter der Farbe abhängen.

$S_{PAINT,G}$  Fläche der Farboberfläche, ( $\text{m}^2$ )

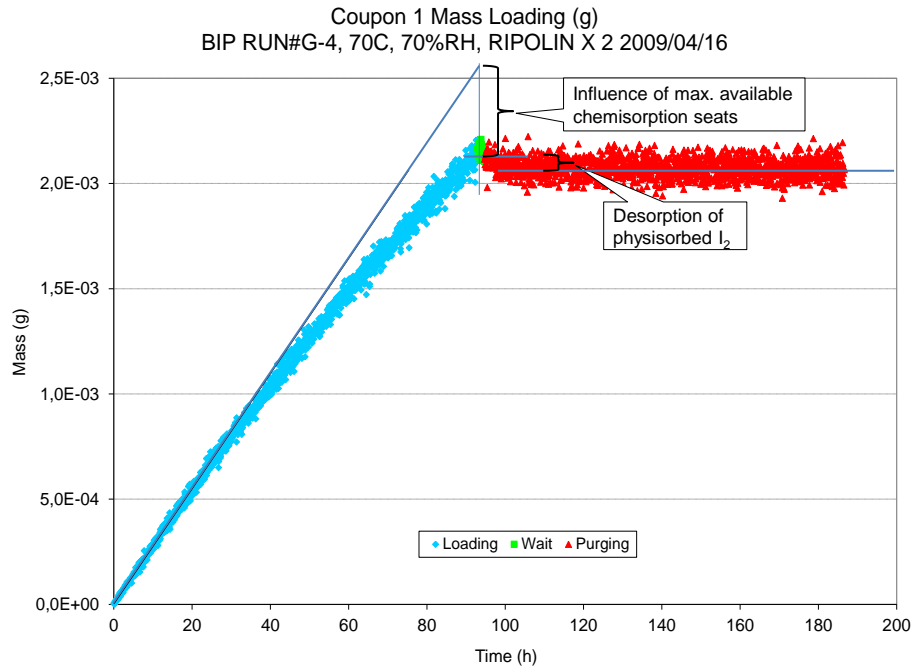
$V_G$  Volumen der Gasphase, (m<sup>3</sup>).

Die Differentialgleichungen (Gl. 2.11 – 2.13) werden nur ausgeführt, wenn die Menge des chemisorbierten Iods kleiner bzw. gleich der Speicherkapazität für chemisorbiertes Iod auf Farbe ist ( $I_{chs}(dep, p, g) \leq I_{chs,max}$ ). Vermutlich hängt die Speicherkapazität vom Farbalter ab. Entsprechende Untersuchungen an GEHOPON-Farbe sind aber nicht verfügbar.

Für das neue I<sub>2</sub>/Farbe-Modell in COCOSYS wird aus den in OECD-BIP gemessenen Ablagerungsraten in Abhängigkeit der Dampfdichte,  $\rho_D$  (absoluten Feuchte), eine Feuchtefunktion (FSATP) abgeleitet, die auf 1 normiert wurde (siehe Abb. 2.9). Mithilfe dieser Feuchtefunktion wird in COCOSYS die Chemisorptionsrate sowie die Physisorptionsrate und damit letztendlich die gesamte Ablagerungsrate auf der Farbe berechnet. Die Speicherkapazität  $I_{chs,max}$  und der Splittingfaktor XPHS wurden anhand von BIP-Messungen mit RIPOLIN-Farbe abgeschätzt (Abb. 2.10).



**Abb. 2.9** Gemessene I<sub>2</sub>-Ablagerungsraten auf Ripolin-Farbe als Funktion der absoluten Atmosphärenfeuchte und Näherung durch die experimentelle FSATP-Funktion für Chemisorption in AIM



**Abb. 2.10** Bestimmung der maximalen Beladung mit chemisorbiertem Iod ( $I_{chs,max}$ ) und des Splittingfaktors XPHS

### 2.3.3 Nachrechnung der BIP-Versuche G-4 und G-6

Das neue I<sub>2</sub>/Farbe-Modell wurde zuerst an BIP-Versuchen überprüft. Aktuelle Experimente im Rahmen des OECD-BIP-Programms („Behaviour of Iodine Project“) und im THAI-Programm haben gezeigt, dass die Feuchte auf die Iodablagerung auf Farboberflächen einen deutlichen Einfluss hat. Im OECD-BIP-Programm /BEC 14/ wurden dazu Labortests durchgeführt, bei denen das Ablagerungs- und Resuspensionsverhalten von gasförmigem molekularem Iod (I<sub>2</sub>(g)) auf mit Amerlock und Ripolin beschichteten Coupon-Farboberflächen untersucht wurde.

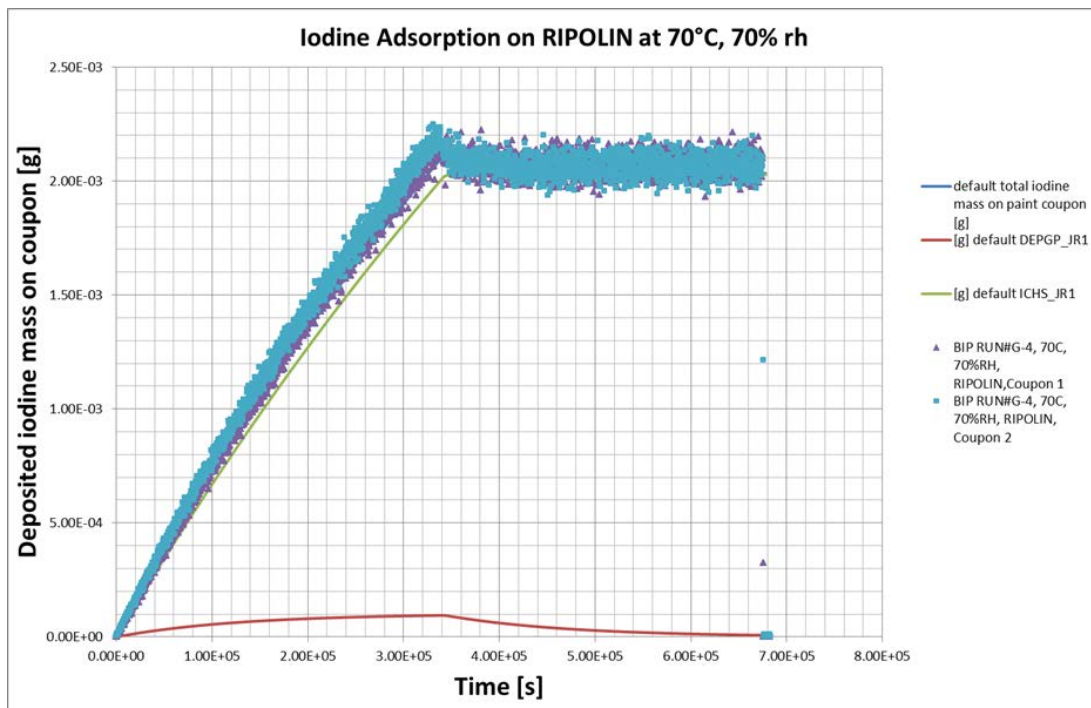
Die Validierungsrechnungen zum neuen I<sub>2</sub>/Farbe-Modell wurden zuerst an den BIP-Versuchen mit Ripolin-Farbe G-4 und G-6 durchgeführt. In dem Versuch G-6 wird die Feuchte im Verlauf variiert.

Die Reaktionskonstanten des neuen I<sub>2</sub>/Farbe-Modells werden im ersten Schritt auf diese Versuche mit Ripolin abgestimmt. In einem nächsten Schritt werden die Reaktionskonstanten dann auf die deutsche GEHOPON-Farbe angepasst und anhand ausgewählter THAI-Versuche validiert.

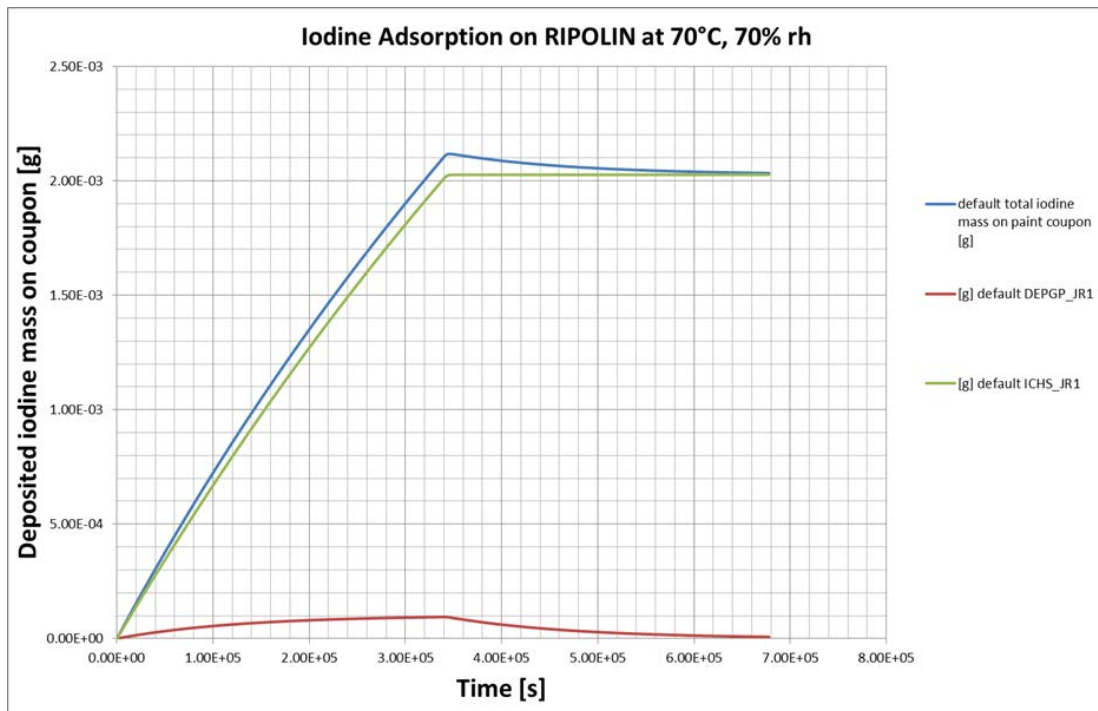
### 2.3.3.1 Nachrechnung des BIP-Versuches G-4

In Abb. 2.11 und Abb. 2.12 sind die Simulationsergebnisse für den Versuch G-4 mit und ohne Messergebnisse dargestellt. Der Versuch G-4 mit einer relativen Feuchte von 70 % und einer Temperatur von 70 °C wird in guter Übereinstimmung nachgerechnet. Anhand der experimentellen Ergebnisse ist ab ca. 100 000 s zu erkennen, dass die Steigung der Beladungskurve kleiner wird, d. h., zu diesem Zeitpunkt ( $t = 100\,000\text{ s}$ ) wird die Chemisorptionsgeschwindigkeit bzw. -rate reduziert, d. h. die Chemisorption wird schwächer.

Nach  $\sim 330\,000\text{ s}$  ist die erste Versuchsphase, die „Beladungsphase“, zu Ende und die „Wartephase“ beginnt. Nach ca.  $6\,500\text{ s}$  beginnt die „Spülphase“, in der der Farbcoupon von reiner Luft überströmt wird. Bereits in der „Wartephase“ und zu Beginn der „Spülphase“ wird die auf dem Coupon physisorbierte Menge wieder in die Atmosphäre freigesetzt. Das auf dem Farbcoupon verbleibende Iod ist chemisorbiertes Iod und wird nicht mehr von der Oberfläche freigesetzt. Mit dem neue  $I_2$ /Farbe-Modell wird auch der Anteil an physisorbiertem Iod zutreffend berechnet.



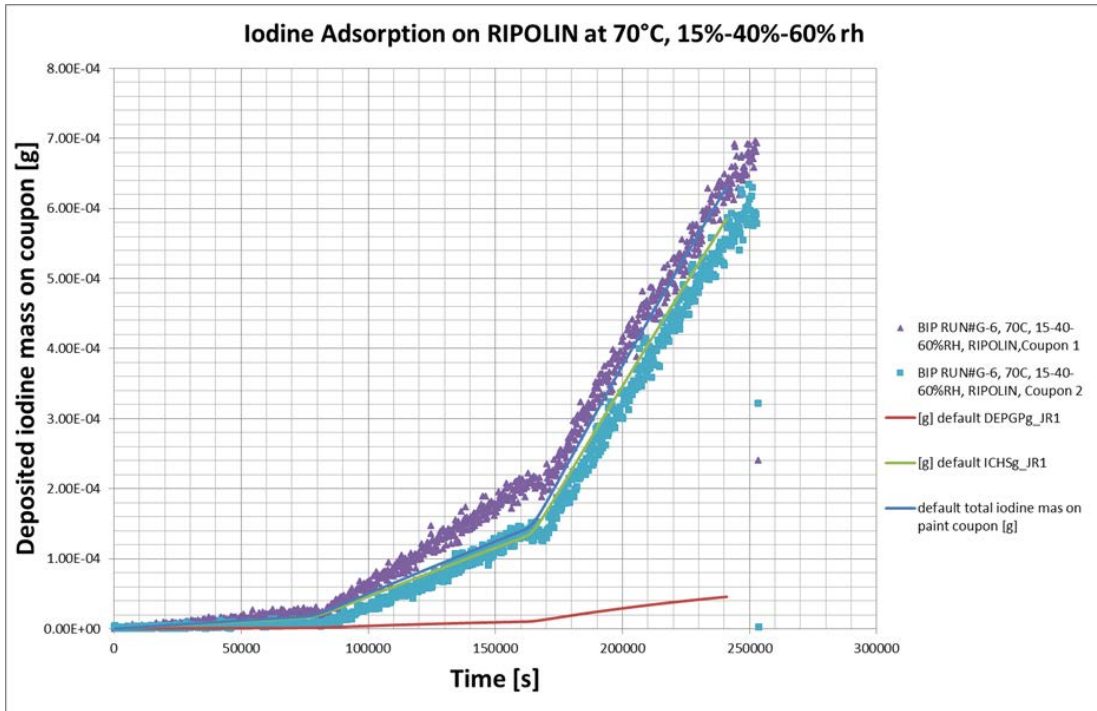
**Abb. 2.11** Gemessene und mit COCOSYS berechnete Iodmasse abgelagert auf dem Farbcoupon (RIPOLIN, gealtert), BIP-Versuch G-4



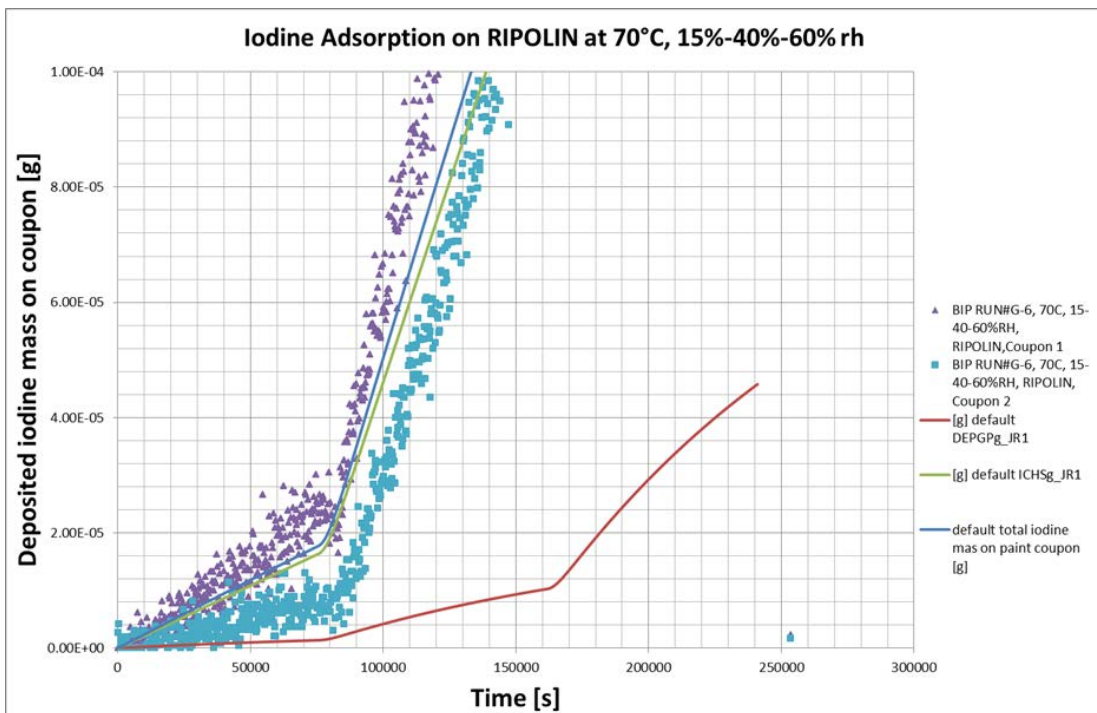
**Abb. 2.12** Mit COCOSYS berechnete abgelagerte Iodmasse aufgeteilt in gesamt Iodmasse (total iodine mass), physisorbierte (DEPGP) und chemisorbierte Iodmenge (ICHS), BIP-Versuch G-4

### 2.3.3.2 Nachrechnung des BIP-Versuches G-6

Der Versuch G-6 ist in drei Versuchsphasen, die von „Spülphasen“ voneinander getrennt sind, unterteilt. G-6 wird bei 70 °C durchgeführt, und in jeder Versuchsphase wird die relative Feuchte stufenweise angehoben. Der Versuch startet mit einer relativen Feuchte von 15 %, die auf 40 % erhöht wird und erreicht in der dritten Versuchsphase eine relative Feuchte von 60 %. Die Nachrechnung (Abb. 2.13, Abb. 2.14) ergibt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Versuchsergebnissen. Mit der neuen Feuchtefunktion FSATP im I<sub>2</sub>/Farbe-Modell ist es erstmals möglich, die unterschiedlichen Steigungen in den Beladungskurven abzubilden. Die Versuchsergebnisse sowie die Rechenergebnisse zeigen, dass sich mit steigender relativer und somit auch absoluter Feuchte die abgelagerte Iodmenge auf der Farbe erhöht.



**Abb. 2.13** Gemessene und mit COCOSYS berechnete Iodmasse abgelagert auf dem Farbcoupon (RIPOLIN, gealtert), BIP-Versuch G6



**Abb. 2.14** Ausschnitt aus Abb. 2.13

## 2.4 Iodübergang zwischen Wasserpool und Atmosphäre

Unter Unfallbedingungen werden in Wasservorlagen im Containment durch radiolytische Reaktionen gasförmige Iodspezies (elementares Iod und Organoiod) gebildet, die über die Sumpfoberfläche in den darüber liegenden Gasraum austreten. Die Geschwindigkeit, mit der dieser Massentransfer stattfindet, hängt stark vom Bewegungszustand des Wassers an der Sumpfoberfläche ab. Bei ruhendem Wasserpool hat der Iod-Massentransfer ein Minimum und erhöht sich deutlich, wenn der Wasserpool stark durchmischt wird. Im bisherigen Iod-Modell AIM von COCOSYS kann nur ein konstanter Wert für den Massentransferkoeffizienten (MTK) vorgegeben werden.

### 2.4.1 Modellentwicklung

Im Rahmen der Umstrukturierung des AFP-Moduls wurden die Modellgleichungen zum Massentransfer aus AIM in das neue AFP-Modul übernommen. Die Gleichung zum Massenaustausch lautet:

$$\frac{d[I_2(g)]}{dt} = k \cdot \frac{S_{W/G}}{V_G} \cdot ([I_2(w)] - [I_2(g)] \cdot P(I_2)) \quad (2.15)$$

mit der Sumpfoberfläche  $S_{W/G}$  und dem Gasvolumen  $V_G$ . Der Partitionskoeffizient hängt von der Temperatur ab. Der Koeffizient  $k$  bestimmt sich nach dem Zweifilmmodell aus den gas- und wasserseitigen Massentransferkoeffizienten:

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{k_W} + \frac{P(I_2)}{k_G} \quad (2.16)$$

Beide Massentransferkoeffizienten  $k_W$  und  $k_G$  werden in der COCOSYS-Eingabe vorgegeben. Empfohlene Werte sind:  $k_G = 1,4 \cdot 10^{-3}$  m/s und  $k_W = 1,0 \cdot 10^{-5}$  m/s. Für die Gesamtrate ist insbesondere  $k_W$  von Bedeutung. Dieser hängt aber, wie oben bereits erläutert, vom Strömungszustand (bzw. von der Strömungsgeschwindigkeit) an der Sumpfoberfläche ab.

Nach dem Filmerneuerungsmodell kann  $k_W$  durch



$$k_w = 2\sqrt{\frac{D}{\pi t_c}} \quad (2.17)$$

berechnet werden, wobei  $t_c$  die Verweilzeit eines kleinen Sumpfvolumens an der Sumpfoberfläche ist.  $D$  bezeichnet die Diffusionskonstante von  $I_2$  in Wasser. Nimmt man Strömungsverhältnisse wie im Versuch THAI Iod-23 mit einer radialen Geschwindigkeit  $v$  an der Sumpfoberfläche an, berechnet sich die Verweilzeit  $t_c$  aus

$$t_c = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R \frac{R-r}{v} 2\pi r \, dr = \frac{R}{3v} = \sqrt{\frac{A}{3\pi}} \quad (2.18)$$

mit der Sumpfoberfläche  $A$  und der Geschwindigkeit  $v$ . Die Möglichkeiten des Modells wurden bereits anhand THAI Iod-23 überprüft und in /FIS 12/ dargestellt. Daher wurde dieses Modell ausgewählt und ebenfalls anhand von Iod-23 überprüft.

Der Massentransfer von organischem Iod, den organischen Resten sowie Sauerstoff erfolgt in ähnlicher Form. Näheres dazu ist im COCOSYS-User-Manual beschrieben. Auch für diese Stoffe wird nun ein geschwindigkeitsabhängiger Massentransferkoeffizient berechnet. Für den Massentransfer an Filmoberflächen wird die berechnete Filmgeschwindigkeit verwendet.

Da COCOSYS keine Geschwindigkeit an der Sumpfoberfläche berechnet, wurde das THY-Modul erweitert, so dass nun eine zeitabhängige Geschwindigkeit per Eingabe vorgegeben werden kann. Diese kann z. B. mit dem mehrdimensionalen Poolmodell Co-Pool (vergleiche Abschnitt 3.2) berechnet werden und wurde hier in einem zweiten Schritt übernommen und damit eine gekoppelte Rechnung durchgeführt.

#### 2.4.2 Überprüfung des Modells anhand von THAI Iod-23

Für die Untersuchung des Iod-Massentransfers wird im Versuch THAI Iod-23 /LAN 12/ nur der Sumpfbereich verwendet. Dazu wurde dieser mit einer Glasplatte abgedeckt. Dieser Sumpfbereich wurde weitgehend gefüllt, so dass nur ein geringes Gasvolumen verblieb. Ein pH-Wert von 2 wurde eingestellt, um die Hydrolyse von  $I_2$  weitgehend zu

unterbinden. Im Sumpfvolumen wurden zu Beginn 71 g I<sub>2</sub> eingespeist (Phase A). Insgesamt wurden 2 Ruhephasen ohne Sumpfzirkulation (Phase B und D) sowie zwei Phasen (C und E) mit einer Zirkulation von 12 m<sup>3</sup>/h eingestellt. Um den Massentransfer zu untersuchen, wurde die Atmosphäre zirkuliert und das I<sub>2</sub> gefiltert. Sowohl die I<sub>2</sub>-Konzentration in der Gasphase als auch die gefilterte I<sub>2</sub>-Menge im Filter wurden online gemessen. Der Versuchsaufbau ist in Abb. 2.15 dargestellt.

Die verwendete COCOSYS-Nodalisierung entspricht weitgehend derjenigen aus den bereits durchgeführten Nachrechnungen mit AIM-3 /KLE 12/. Diese ist in Abb. 2.16 dargestellt.

Dem Experiment entsprechend wurde die Zirkulationsleitung ergänzt, so dass nun der Dampf auskondensiert wird (durch eine große kalte Wand) und das Gas wieder auf die gewünschte Temperatur von 67 °C aufgeheizt wird (durch die Option „thermischer Rekombinator“ im Gebläsesystem). Das Gasvolumen oberhalb des Sumpfes wurde wie in der Nachrechnung auch in 2 Schichten sowie die obere Schicht in 4 Zonen aufgeteilt. Damit wird versucht, eine inhomogene Verteilung der I<sub>2</sub>-Konzentration in der Gasphase zu simulieren.

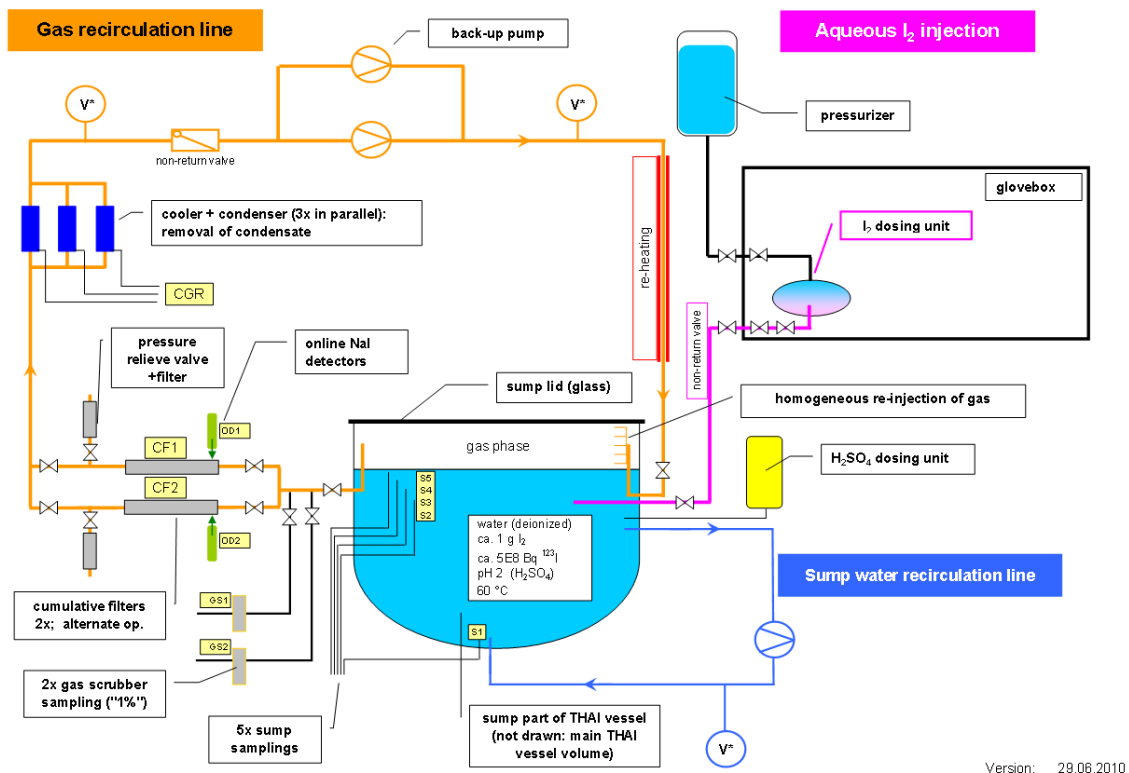
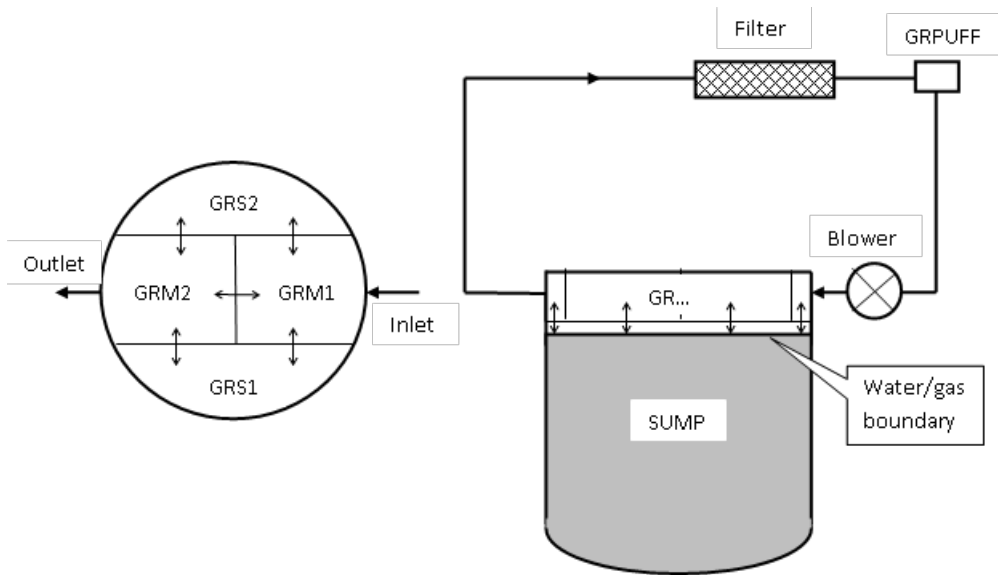


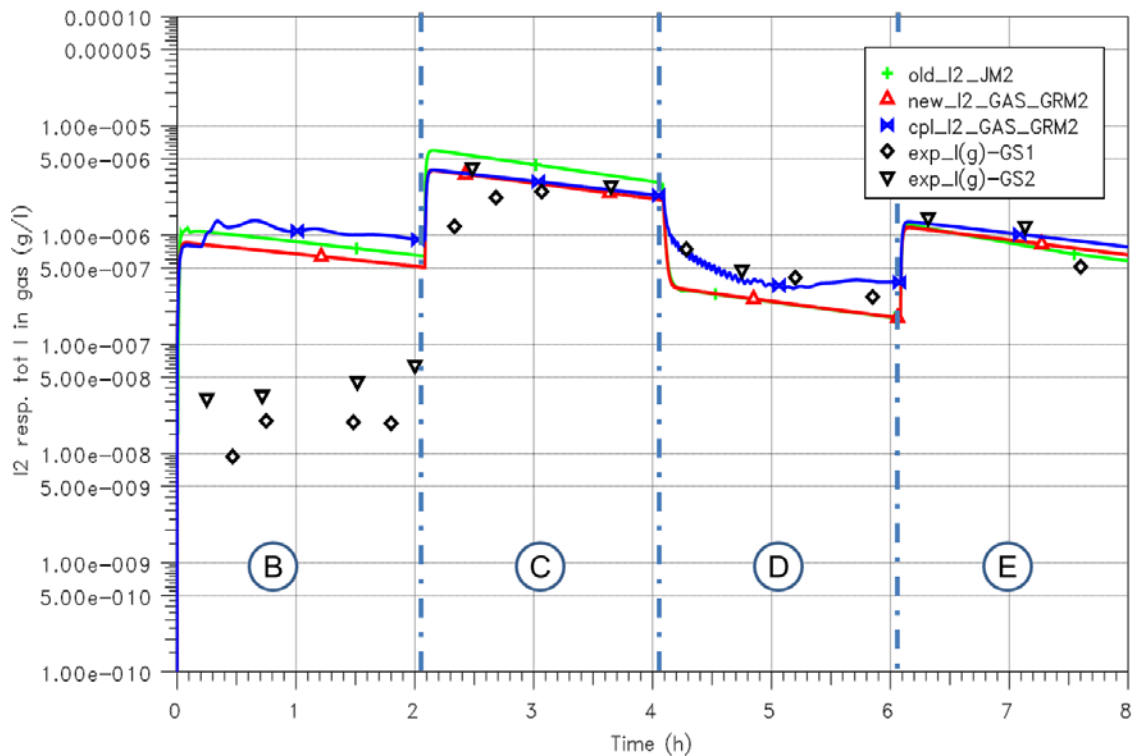
Abb. 2.15 Versuchsaufbau im Versuch THAI Iod-23 /LAN 12/



**Abb. 2.16** COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Sumpfbereichs in der Konfiguration für Iod-23

In den folgenden Abbildungen werden die experimentellen Daten schwarz, die Nachrechnung im AIM-3 grün, die neue COCOSYS-Rechnung rot und die mit CoPool gekoppelte COCOSYS-Rechnung blau dargestellt.

In Abb. 2.17 ist der Vergleich der  $I_2$ -Konzentrationen in der Gasphase dargestellt. Deutlich zu erkennen sind die unterschiedlichen Phasen mit und ohne Sumpfzirkulation. In den beiden Phasen mit Zirkulation erhöht sich der Massentransfer, so dass die Gaskonzentrationen steigen. In den durchgeführten Rechnungen wird dieses Verhalten gut nachvollzogen. In der ersten Ruhephase B sind die gemessenen  $I_2$ -Konzentrationen deutlich niedriger als die Rechnung. Laut /LAN 12/ ist die Verwendung neuer Stahlröhrchen bei der Probenahme eine mögliche Ursache. Der langfristige Abfall ist durch die Reaktion von  $I_2$  mit den Stahloberflächen im Sumpf begründet. Wie in den Nachrechnungen in AIM-3 wurde die Reaktionsrate um den Faktor 3,8 erhöht. Eine Begründung ist auch hier die neuen Stahlrohre für die Sumpfumwälzung. Die Ergebnisse der verschiedenen Rechnungen sind vergleichbar. Unterschiede lassen sich auf die unterschiedlich berechneten Geschwindigkeiten bzw. Massentransferkoeffizienten zurückführen.



**Abb. 2.17** Vergleich der  $I_2$ -Konzentration in der Gasphase, THAI Iod-23

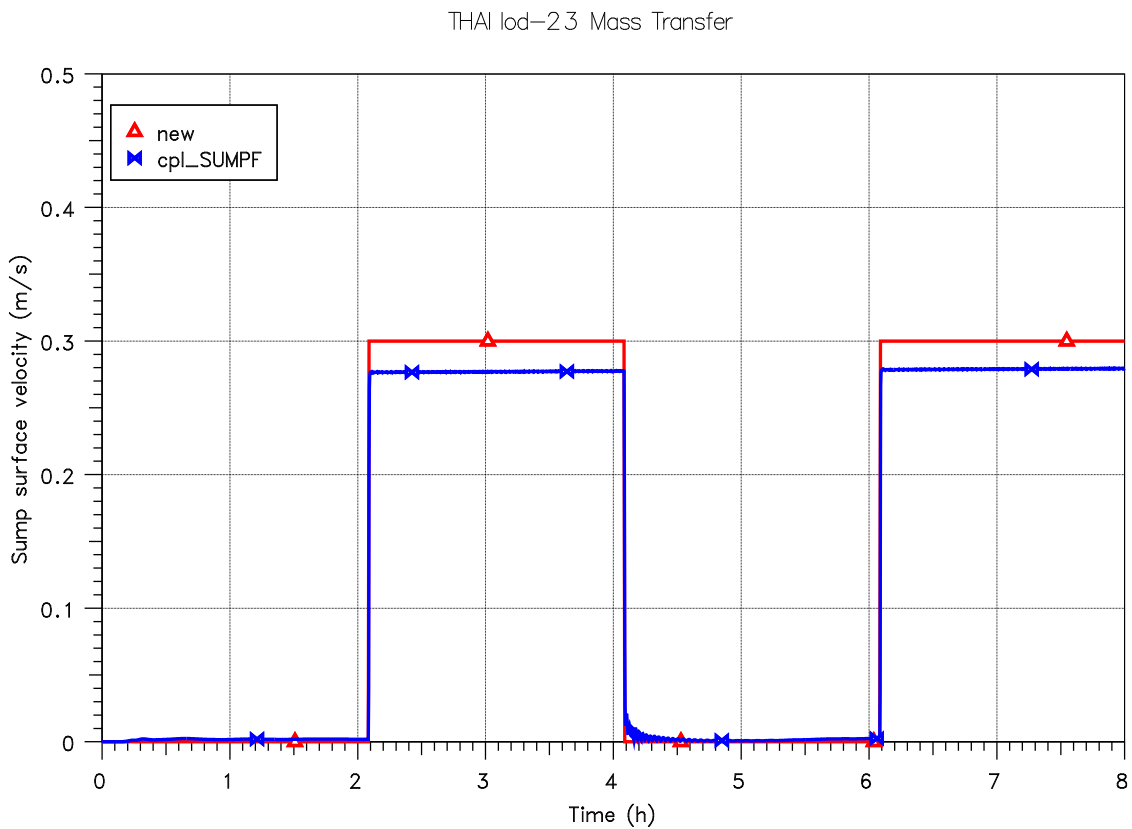
In der Phase B wird trotz der abgeschalteten Umwälzung mit CoPool eine geringe Konvektion im Sumpf berechnet. Diese ist durch die Abkühlung der Sumpfoberfläche aufgrund der Verdunstung an der Sumpfoberfläche bedingt. Dadurch steigt der Massentransferkoeffizient etwas und somit der  $I_2$ -Eintrag in die Gasphase.

In den Phasen C und E mit Umwälzung ist in CoPool die berechnete Oberflächengeschwindigkeit etwas geringer, als die vorgegebene Geschwindigkeit von 0,3 m/s in der COCOSYS-Rechnung (Abb. 2.18). Hier ist aber zu erwähnen, dass der Impulseintrag um den Faktor 20 erhöht wurde, um mit der derzeitigen CoPool-Version eine entsprechende Oberflächengeschwindigkeit zu erhalten. Ursache dafür, dass in CoPool nur niedrige Geschwindigkeiten an der Oberfläche berechnet werden, sind die Modellgleichungen, die eine flache Sumpfoberfläche unterstellen. Hier sind in CoPool ggf. noch Verbesserungen bzw. Erweiterungen notwendig.

In der Umwälzphase sind die berechneten Massentransferkoeffizienten deutlich niedriger ( $0,68 \cdot 10^{-4}$  m/s), als die vorgegebenen Koeffizienten ( $2,5 \cdot 10^{-4}$  m/s) in der Nachrechnung (Abb. 2.19). Trotzdem sind die berechneten Konzentrationen vergleichbar.

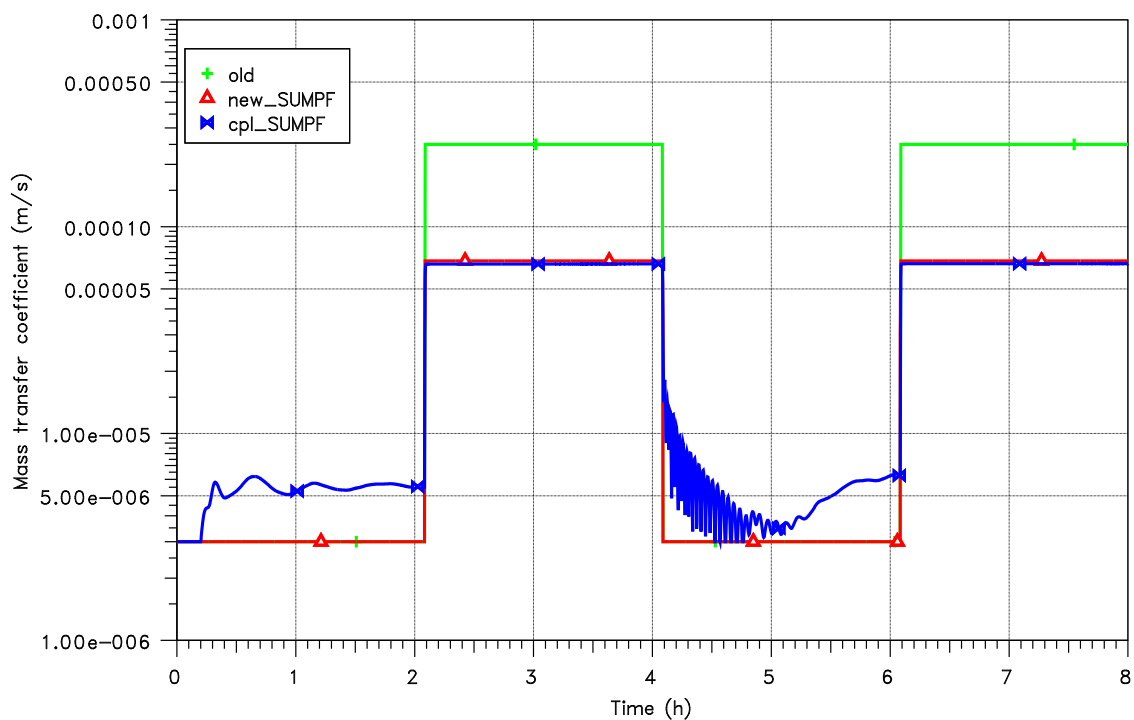
In der Abb. 2.20 ist der Vergleich der gefilterten I<sub>2</sub>-Masse dargestellt. Auch hier liegen alle Rechnungen nahe an den gemessenen Werten. In der gekoppelten Rechnung wird in den Stagnationsphasen B und C der Iodmassentransfer etwas überschätzt. Der starke Anstieg in den Messungen ist möglicherweise durch höhere lokale Iodkonzentrationen während der Einspeisephase bedingt.

Die Abb. 2.21 zeigt den Vergleich der Iodkonzentrationen im Sumpf. Im neuen AFP-Modul ist die Bildung von I<sup>-</sup> im Sumpf durch I<sub>2</sub> mit Stahl durch zwei separate Reaktionen abgebildet. Dadurch entsteht in den Ergebnissen ein kleiner Versatz (grüne und rote Kurven). In der gekoppelten Rechnung ist die Bildung von I<sup>-</sup> noch etwas langsamer. Ursache ist die etwas niedrigere Sumpftemperatur.



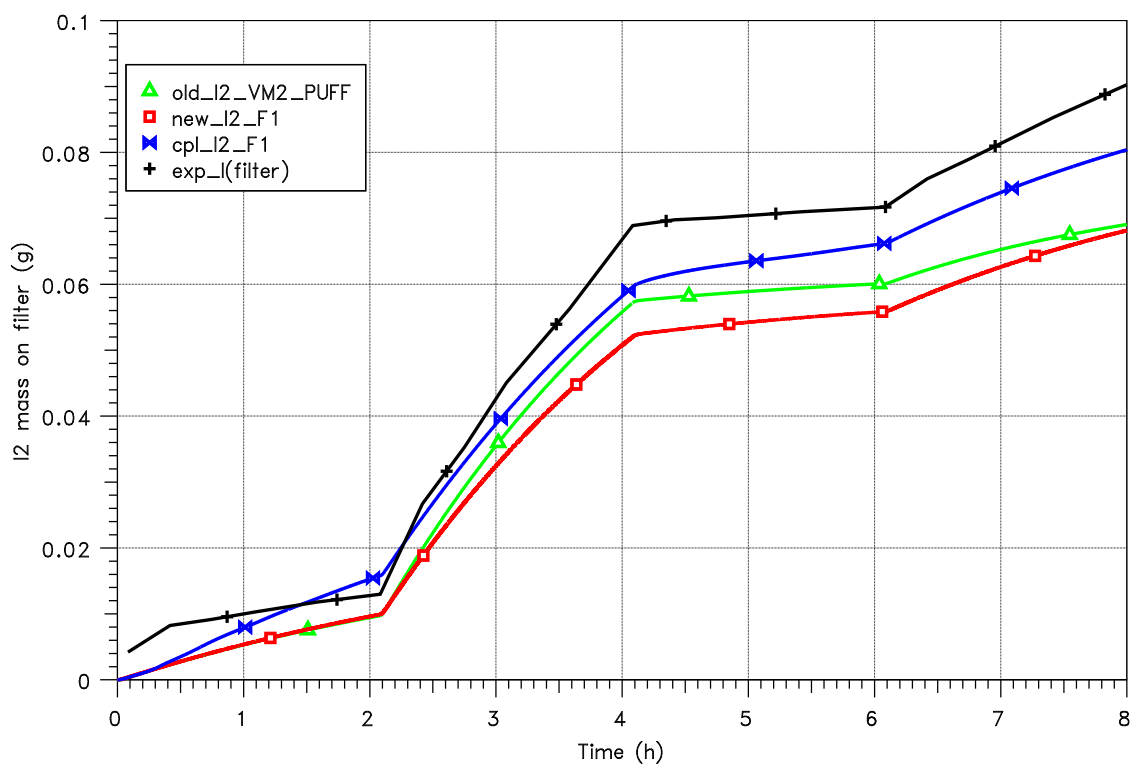
**Abb. 2.18** Vergleich der Geschwindigkeiten an der Sumpfoberfläche, THAI Iod-23

THAI lod-23 Mass Transfer

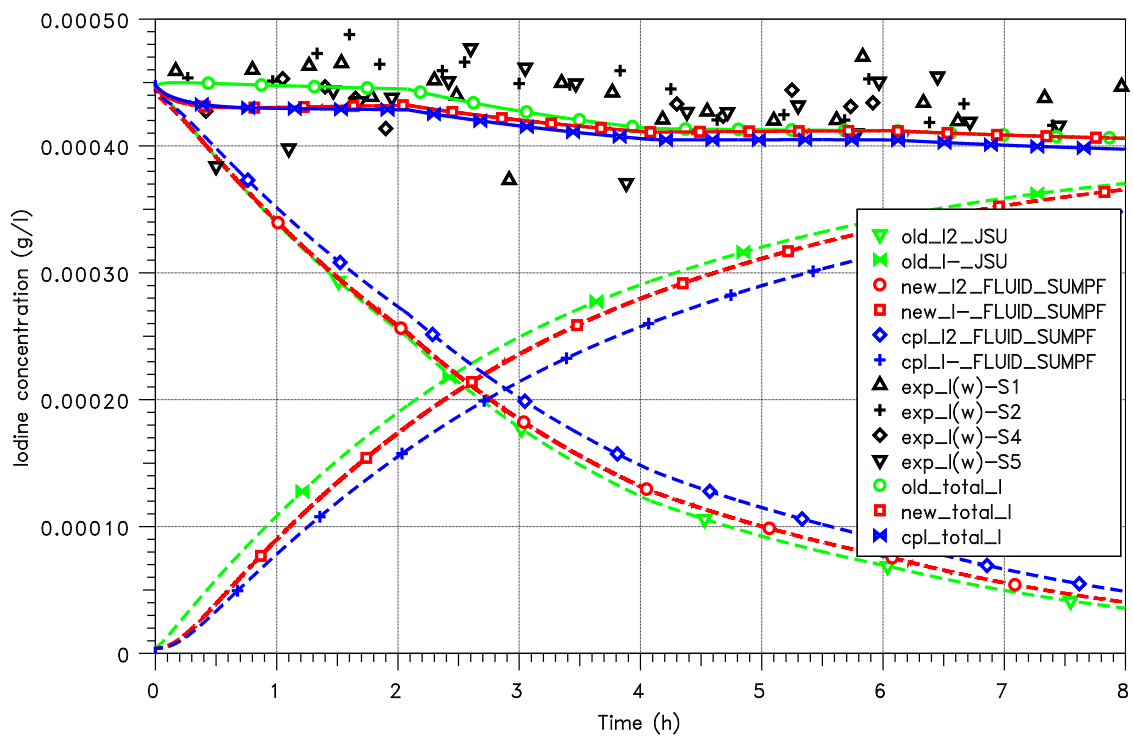


**Abb. 2.19** Vergleich der berechneten und vorgegebenen Massentransferkoeffizienten, THAI lod-23

THAI lod-23 Mass Transfer

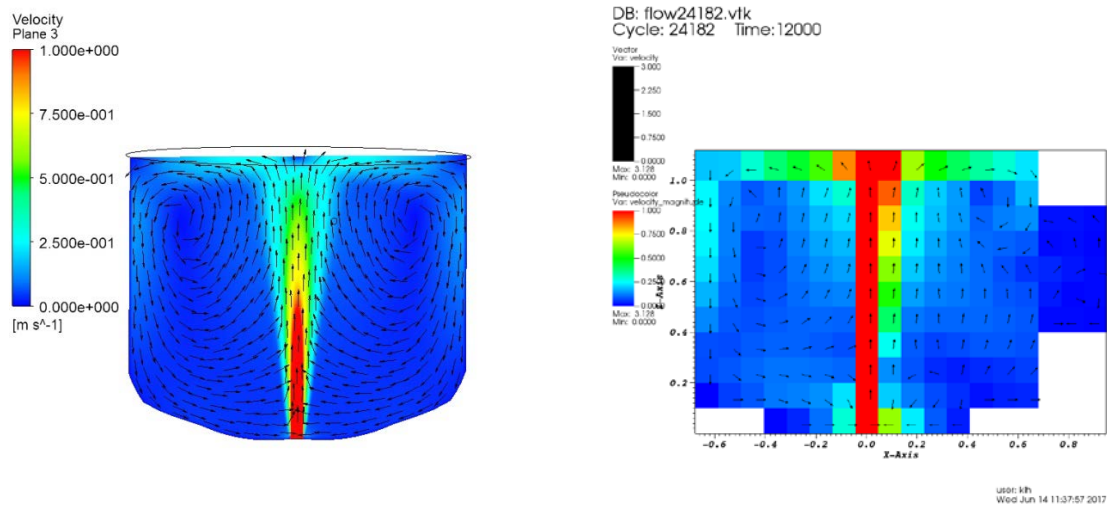


**Abb. 2.20** Vergleich der I<sub>2</sub>-Masse im Filter, THAI lod-23

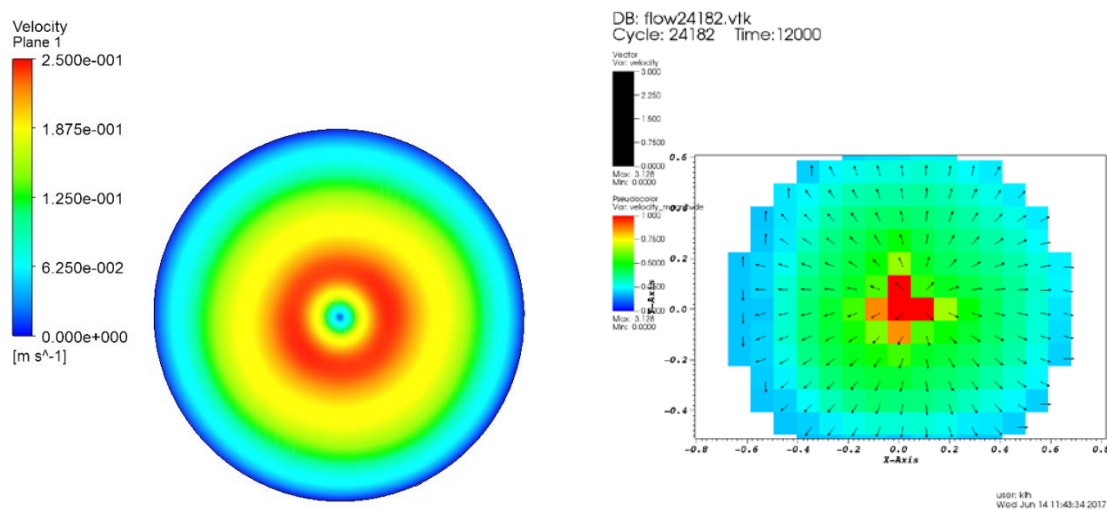


**Abb. 2.21** Vergleich der Iodkonzentration im Sumpf, THAI Iod-23

Im Folgenden werden noch einige CoPool-Ergebnisse dargestellt. Wie oben schon angedeutet, wird aufgrund der modellbedingten flachen Sumpfoberfläche eine zu niedrige Geschwindigkeit an der Oberfläche berechnet. Um dieses zu kompensieren, wurde der Impulseintrag um den Faktor 20 erhöht. Ebenso ist die Gitterauflösung im Vergleich zu üblichen CFD-Rechnungen deutlich gröber, so dass eine Strahlaufweitung nicht simuliert werden kann (Abb. 2.22). Die maximalen Geschwindigkeiten betragen in CoPool ca. 3 m/s. Die in CoPool berechnete Geschwindigkeitsverteilung an der Sumpfoberfläche ist ebenfalls unterschiedlich zu CFX und dem Experiment. Auch dieses ist der gröberen Gittereinteilung geschuldet.



**Abb. 2.22** Vergleich der Geschwindigkeitsprofile (links: CFX, rechts CoPool)



**Abb. 2.23** Vergleich der Geschwindigkeitsprofile (links: CFX, rechts CoPool)

## 2.5 Implementierung eines Ruthenium-Modells

Die Radiotoxizität von Ruthenium (Ru) ist vergleichbar mit der von Iod bzw. Cäsium (Cs) und die Ru-Masse im Reaktorkern ist etwa gleich groß wie die Cs-Masse. Im Rahmen des Projektes OECD-STEM („Source Term Evaluation and Mitigation“) wurde die Bildung und der Transport von flüchtigem RuO<sub>4</sub> und Ru-Aerosolen unter unfalltypischen Bedingungen experimentell untersucht. Für COCOSYS erfolgte basierend auf den experimentellen Beobachtungen der Einbau eines ersten Modells zur Simulation des Verhaltens von Ruthenium.



### 2.5.1 Wissensstand zum Ruthenium-Verhalten

Im Reaktor wird im Brennstoff Ruthenium durch die Spaltung von Uran während des Normalbetriebs gebildet. Die Ru-Bildung nimmt mit steigendem Abbrand zu und nimmt darüber hinaus mit steigenden U-235-Anreicherungen im Brennstoff bei identischem Abbrand noch weiter zu /MUN 07/. In Mischoxid-Brennstoffen (MOX-Brennstoff) kommt es zu einer vergleichsweise höheren Ru-Bildung aufgrund der höheren Spaltausbeute des Pu-239 im Vergleich zu U-235 /HOL 09/.

Ruthenium ist ein Spaltprodukt mit einer sehr hohen spezifischen Aktivität. Für RBMK-Brennstoffe aus Tschernobyl wurde berechnet, dass ein Ru-Partikel mit einem Durchmesser von 8  $\mu\text{m}$  eine spezifische Aktivität von 1500 Bq hat /MUN 07/.

Die Radiotoxizität wird durch die Nuklide Ru-103 mit einer Halbwertszeit (HWZ) von  $t_{1/2} = 40$  d und Ru-106 mit einer HWZ von  $t_{1/2} = 1$  y verursacht /HOL 09/.

Ruthenium ist aufgrund seiner hohen Radiotoxizität und seiner chemischen Toxizität in den Fokus der Untersuchungen für schwere Störfälle gerückt. In Frankreich werden die Radionuklide im Strahlenschutz je nach Radiotoxizität in vier Gruppen aufgeteilt. Ru-106 ist wie I-131 in der Gruppe „Hohe Radiotoxizität“ (Gruppe 2) und Ru-103 wie Cs-137 in der Gruppe „Moderate Radiotoxizität“ (Gruppe 3) eingruppiert /MUN 07/.

Rutheniumoxide können im Falle eines schweren Störfalls nach Lufteintritt in den Primärkreis gebildet werden. Bisher ist noch umstritten, wie bzw. unter welchem Umstand ein solches Ereignis ablaufen könnte, in welchem ausreichend Luft zur Reaktion mit Ruthenium zur Verfügung steht /MUN 07/ und /HOL 09/.

Vor Versagen des Reaktordruckbehälters – in der sogenannten „In-vessel“-Phase – weist der Reaktor bzw. Primärkreis in der Regel einen höheren Druck auf als das umgebende Containment. Danach könnte sich die Situation ändern. In der Literatur werden folgende Szenarien diskutiert /MUN 07/, /HOL 09/:

1. Lufteinbruch nach Bruch der Primärkühlmittelleitung (2F-Bruch) und zwischenzeitlicher Abkühlung
2. Lufteinbruch nach RDB-Versagen
3. Lufteinbruch während eines Brennelementwechsels durch den offenen RDB-Deckel

#### 4. Kernzerstörung im Brennelementlagerbecken

In /MIR 15/ werden für einen französischen DWR mit 1300 MW<sub>el</sub> Berechnungen vorgestellt, die die potentiellen radiologischen Konsequenzen aufzeigen. Dazu werden folgende Annahmen gemacht, die auf experimentellen Ergebnissen beruhen:

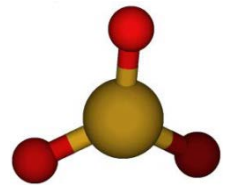
- RDB Versagen bei ~ 20 h
- Aufteilung des aus dem Brennstoff freigesetzten Ru wie folgt:
  - 80 % werden zunächst im Kühlkreislauf abgelagert
  - 15 % erreichen als RuO<sub>2</sub>-Aerosol das Containment
  - 5 % gelangen als RuO<sub>4</sub>(g) (gasförmig) in das Containment
- Nach 20 h werden von dem im Kühlkreislauf abgelagerten Ru 10 % wiederverdampft und gelangen in das Containment.

Metallisches Ruthenium ist gering flüchtig /MUN 07/. Rutheniumoxide wie RuO<sub>3</sub>(g) und RuO<sub>4</sub>(g) sind hingegen sehr flüchtig. So könnten sie aus dem Brennstoff über den Primärkreis in das Containment gelangen. Gasförmige Rutheniumoxide wie RuO(g), RuO<sub>2</sub>(g) und RuO<sub>3</sub>(g) sind bei Temperaturen unter 1273 K thermodynamisch nicht stabil und werden daher das Containment nicht erreichen /HOL 09/, weshalb RuO<sub>4</sub> als Hauptquelle aus dem Kühlkreislauf angesehen wird. Nachfolgend wird eine Zusammenstellung der wesentlichen Eigenschaften der betrachteten Rutheniumoxide wiedergegeben /MUN 07/:

- Rutheniummonoxid (RuO)
  - gasförmig
  - bei Temperaturen > 1273 K werden RuO<sub>4</sub>, RuO<sub>3</sub> und RuO<sub>2</sub> in RuO zersetzt
  - experimenteller Nachweis für die Existenz bei Temperaturen > 1900 K
- Rutheniumdioxid (RuO<sub>2</sub>)
  - stabilstes Rutheniumoxid
  - pulverförmig
  - gasförmig nur bei sehr hohen Temperaturen > 2000 K

- Rutheniumtrioxid (RuO<sub>3</sub>)

- Partialdrücke von RuO<sub>3</sub> und RuO<sub>4</sub> sind bei 0,987 bar und 1327 K gleich



- RuO<sub>3</sub> überwiegt in der Gasphase bei Temperaturen zwischen 1327 K und 2000 K

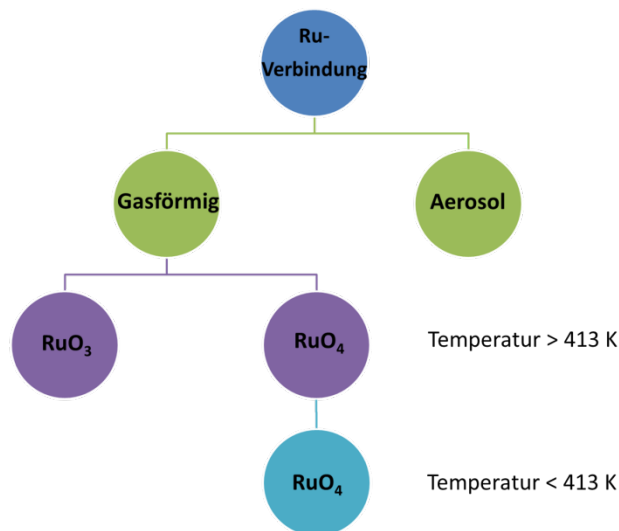
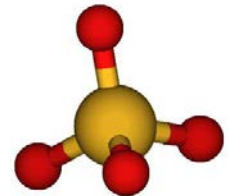
- größerer Anteil RuO<sub>4</sub> bei Temperaturen unterhalb von 1327 K

- Rutheniumtetroxid (RuO<sub>4</sub>)

- gasförmig oder kondensiert

- sehr reaktive und sehr flüchtige Ruthenium-Spezies

- toxischer Dampf



**Abb. 2.24** Ruthenium Verbindungen

Flüchtiges Ruthenium ist nur vorhanden, wenn der Brennstoff starker Oxidation ausgesetzt ist. Die Affinität von Sauerstoff, um zu den im Brennstoff vorhandenen Elementen eine Verbindung einzugehen, ist wie folgt:

$$\text{Zr} > \text{UO}_2 > \text{Ru} \quad (2.19)$$

Die Verfügbarkeit von Sauerstoff für Ruthenium hängt daher von der UO<sub>2</sub>-Oxidationsstufe ab. Deshalb können laut /MUN 07/ einige Elemente, darunter auch Ru, nur dann oxidieren, wenn UO<sub>2</sub> zuvor in UO<sub>2+x</sub> oxidiert wurde.

### 2.5.1.1 Vorgänge in der Gasphase

Bei Raumtemperatur ist die Kinetik der RuO<sub>4</sub>-Abbaureaktion sehr langsam. Das könnte erklären, warum trotz thermodynamischer Instabilität RuO<sub>4</sub> bei niedrigeren Temperaturen vorkommen kann. Die Stabilität von RuO<sub>4</sub>(g) erhöht sich mit steigender Temperatur.

Gelangt RuO<sub>4</sub>(g) aus dem Primärkreis in das Containment, wird es aufgrund seiner thermodynamischen Instabilität durch nachfolgende Reduktionsreaktion reduziert:



Das entstandene RuO<sub>2</sub>(s)-Aerosol lagert sich dann auf den Oberflächen des Containments ab.

Mit steigender Temperatur wird die Gleichgewichtskonstante kleiner, d. h. die Rückreaktion nimmt zu und es wird mehr RuO<sub>4</sub>(g) gebildet. Somit wird RuO<sub>4</sub>(g) bei steigender Temperatur stabiler.

Durch die Einwirkung von ionisierender Strahlung mit Luft werden die Radiolyseprodukte NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O und O<sub>3</sub> gebildet. Die im Falle eines schweren Störfalls auftretenden Konzentrationen von RuO<sub>4</sub>(g) sind im Vergleich mit den in der Atmosphäre befindlichen Radiolyseprodukten sehr gering. Deshalb geht /MUN 07/ davon aus, dass die durch die radioaktive Strahlung freigesetzte Energie sich auf die Stoffe in der Luft (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O) verteilt. In /MUN 07/ wird weiter davon ausgegangen, dass die ionisierende Strahlung einen indirekten Einfluss auf die Veränderung der Rutheniumspezies durch die chemischen Reaktionen mit den Radiolyseprodukten aus der Luft hat und somit die ionisierende Strahlung keinen direkten Einfluss auf das gasförmige Ruthenium hat. Des Weiteren wird in /MUN 07/ diskutiert, dass die Stabilität von RuO<sub>4</sub>(g) unter Einfluss von radioaktiver Strahlung fragwürdig ist.

Im Containment kann RuO<sub>4</sub>(g) durch Reaktionen mit ionisierender Strahlung direkt oder indirekt gebildet werden, indem das auf den Containmentoberflächen abgelagerte RuO<sub>2</sub>(s) mit den Radiolyseprodukten aus der Luft indirekt oder mit der ionisierenden Strahlung direkt reagiert (siehe Abb. 2.25). Dabei werden die Ablagerungen von RuO<sub>2</sub>(s) auf der Wand durch die Reaktion mit den Radiolyseprodukten und durch Radiolyse selber oxidiert.



### 2.5.1.2 Vorgänge in der Wasserphase

Weiterhin können Ru-Aerosole aus dem Primärkreis in das Wasser des Containment-Sumpfes gelangen oder sich zunächst auf Oberflächen im Containment ablagern. Die Ru-Aerosole ( $RuO_2$  und die Mischaerosole) sind in Wasser löslich und können somit durch einen ablaufenden Wasserfilm von der Wand abgewaschen werden. Mögliche in der Wasserphase vorkommende Ru-Spezies sind:

- $RuO_4(aq)$ , Transfer durch die Gasphase in die Wasserphase (Massentransfer)
- $RuO_2(aq)$ , Entstehung nach Sedimentation des löslichen  $RuO_2$ -Aerosols aus der Gasphase direkt in die Wasserphase – schwer löslich
- Ruthenate und Perruthenate, Entstehung nach Sedimentation von Mischaerosolen aus der Gasphase direkt in die Wasserphase

Die Reaktionen in der Wasserphase können entweder Ruthenium in der Wasserphase binden oder flüchtiges  $RuO_4$  freisetzen.

### 2.5.1.3 Verhalten von Ru auf Oberflächen

Rutheniumtetroxid ( $RuO_4(g)$ ) ist für seine hohe Affinität, eine Bindung mit organischen Komponenten einzugehen, bekannt /MUN 07/. Tetroxide werden in der organischen Chemie als Oxidationsmittel eingesetzt. Aus diesem Grund wird in /MUN 07/ eine starke Reaktivität von Tetroxiddampf mit Containmentoberflächen, die mit einem Farbanstrich versehen sind, erwartet.

Weiter wird in /MUN 07/ die Möglichkeit diskutiert, dass Ruthenium auch mit in der Wasserphase befindlichen Farb- und Stahloberflächen reagiert. Demnach scheint das dort adsorbierte Ruthenium nahezu irreversibel, d. h. chemisorbiert, gebunden zu sein.

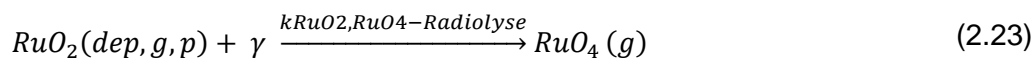
## 2.5.2 Modellierung des Ruthenium-Verhaltens in COCOSYS-AIM3

In PHEBUS-Versuchen wurde gezeigt, dass ca. 1 % des Ru-Inventars im Reaktorkern im Containment ankommt.

Da in der Gasphase die meisten flüchtigen Ru-Spezies gebildet werden, wird ein erstes Ruthenium-Modell in COCOSYS-AIM3 auf die Gasphase beschränkt. Darüber hinaus gibt es zu viele Unsicherheiten über das Verhalten der Ru-Spezies in der Wasserphase, so dass eine Modellierung der Wasserphase zurzeit nicht sinnvoll erscheint /MUN 09/.

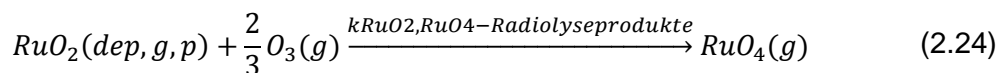
Angelehnt an die in ASTEC implementierte Ruthenium-Chemie werden drei chemische Reaktionen /COU 15/ berücksichtigt (Abb. 2.25):

1. Entstehung von  $RuO_4(g)$  aus der Oxidation von auf der Wand abgelagertem  $RuO_2(dep,g,p)$  durch Radiolyse



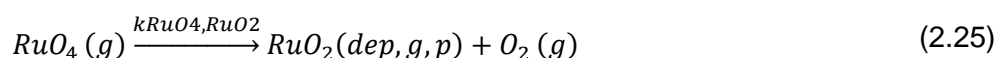
$$\frac{d[RuO_4]}{dt} = \frac{n_{Ru}}{V_g} \cdot D_g \cdot k_{RuO_2, RuO_4 - Radiolyse}$$

2. Entstehung von  $RuO_4(g)$  aus der Oxidation von auf der Wand abgelagertem  $RuO_2(dep,g,p)$  durch die Reaktion mit Radiolyseprodukten

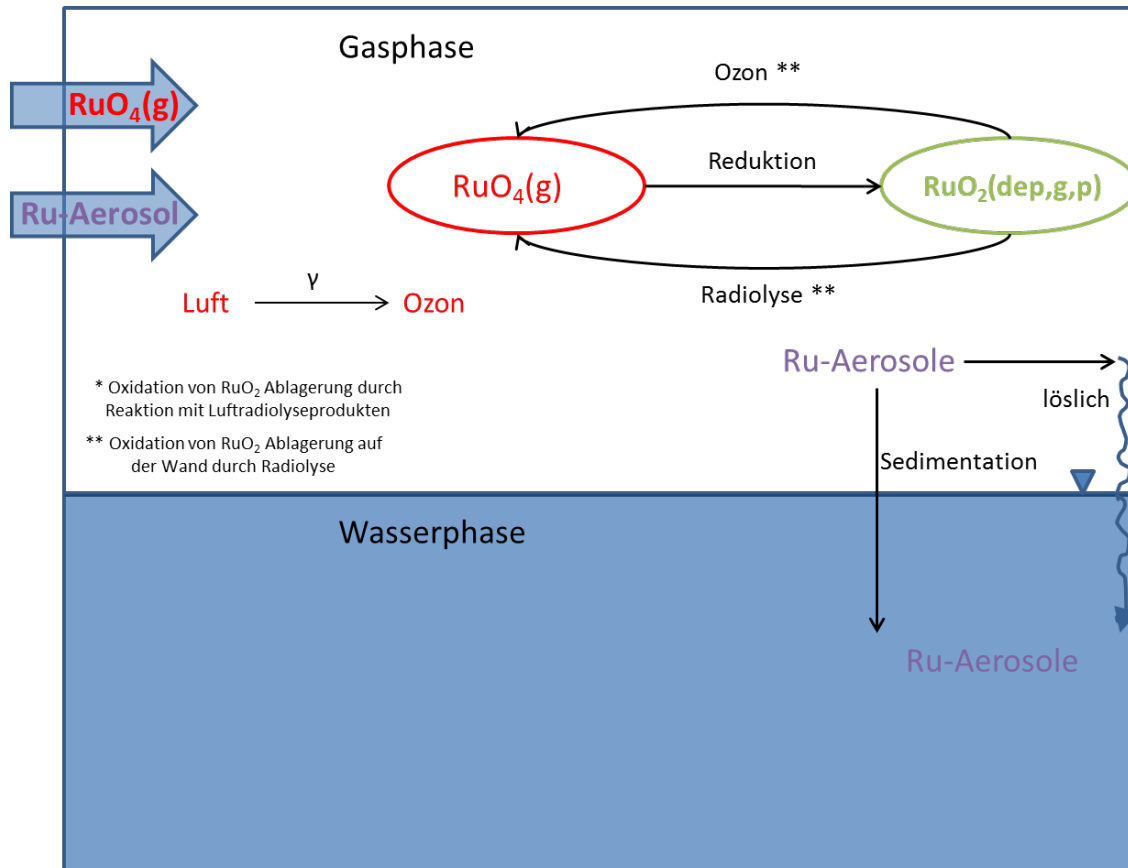


$$\frac{d[RuO_4]}{dt} = \frac{n_{Ru}}{V_g} \cdot [Radiolyseprodukte] \cdot k_{RuO_2, RuO_4 - Radiolyseprodukte}$$

3. Reduktion von  $RuO_4(g)$  durch Wechselwirkung mit Farboberflächen



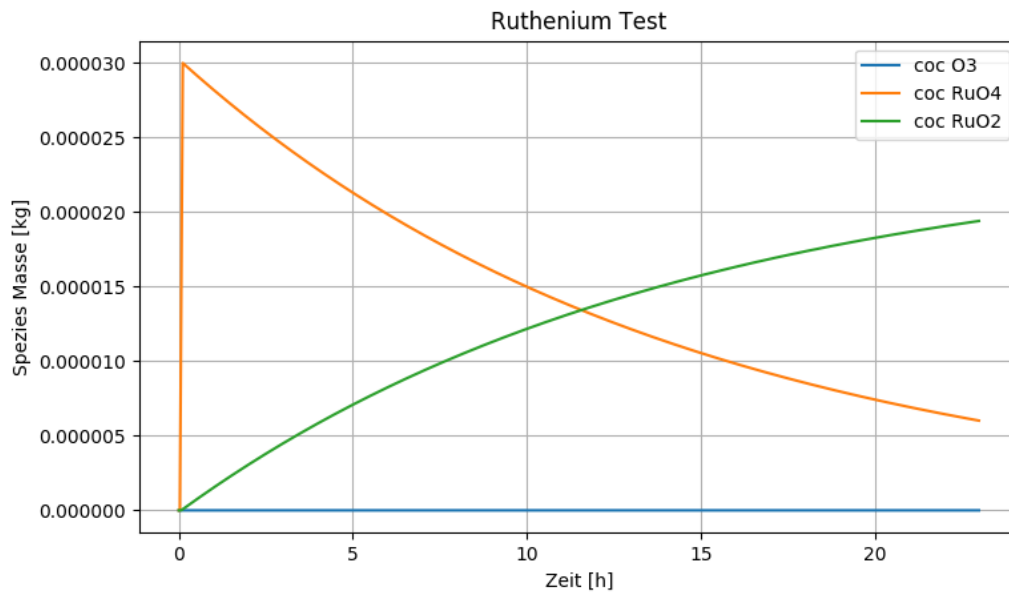
$$\frac{d[RuO_4]}{dt} = -k_{RuO_4, RuO_2} \cdot [RuO_4]$$



**Abb. 2.25** Mögliche Ruthenium Reaktionen im Sicherheitsbehälter während eines schweren Störfalls

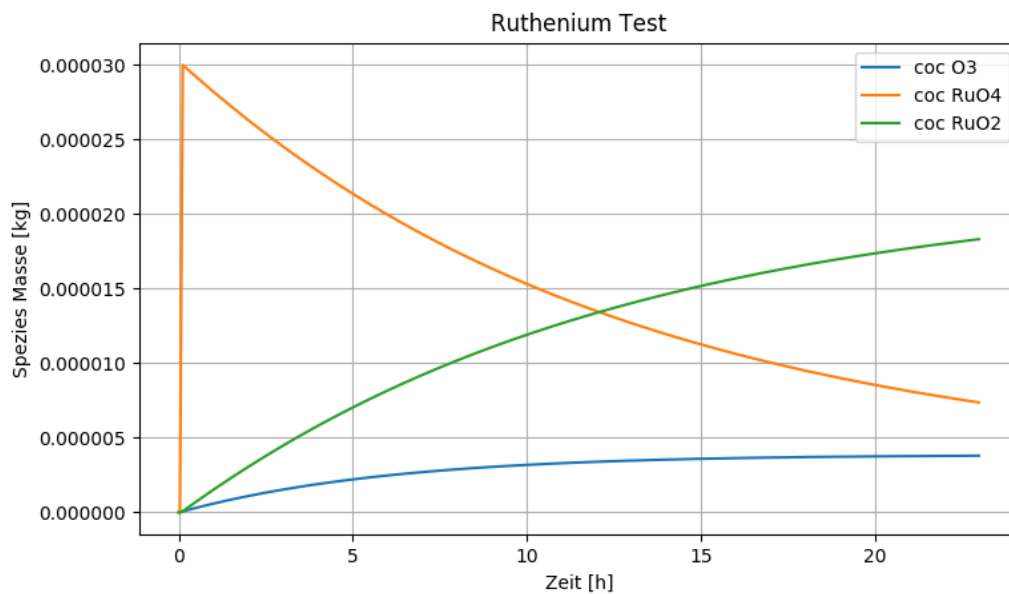
### 2.5.3 Beispielrechnung

Um das Verhalten dieses einfachen Ruthenium-Modells zu untersuchen, ist eine Einraumrechnung mit einem Volumen von  $1 \text{ m}^3$  durchgeführt worden. In dem Volumen ist eine etwa  $1,5 \text{ m}^2$  große Farbanstrichfläche vorhanden, auf der die oben beschriebenen Reaktionen ablaufen können. Zwischen 100 s und 400 s werden insgesamt  $30 \text{ }\mu\text{g}$   $RuO_4$  eingespeist. Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abb. 2.26 dargestellt. Über einen Zeitraum von 23 h lagern sich etwa  $5/6$  des gesamten Rutheniums in Form von  $RuO_2$  auf der Farboberfläche ab. In dieser Rechnung spielt die erneute Bildung von  $RuO_4$  durch die Reaktion von Ozon mit an der Farboberfläche abgelagertem  $RuO_2$  bzw. die direkte radiolytische Bildung von  $RuO_4$  allerdings keine Rolle, da ohne Strahlung auch kein Ozon gebildet wird.



**Abb. 2.26** Ruthenium-Testrechnung ohne Dosisleistung

Daher ist die Rechnung mit einer konstanten Dosis von 0,1 kGy/h wiederholt worden. Das Ergebnis ist in Abb. 2.27 dargestellt. Durch die radiolytische Rückreaktion zu luftgetragem RuO<sub>4</sub> wird nur unwesentlich weniger des vorhandenen RuO<sub>4</sub> in RuO<sub>2</sub> umgebildet. Eine vertiefte Untersuchung ergab, dass unter den unterstellten Bedingungen die direkte radiolytische Reaktion (2.23) im Vergleich zur Ozonreaktion (2.24) dominiert.



**Abb. 2.27** Ruthenium-Testrechnung mit Dosisleistung



#### 2.5.4 Schlussfolgerung/Bewertung

Die durchgeführte Testrechnung zeigt, dass ohne Strahlung das flüchtige RuO<sub>4</sub> über einen Zeitraum von etwa einem Tag an Farboberflächen abgelagert wird. Unter Strahlung gewinnt allerdings die Rückreaktion durch die direkte radiolytische Reaktion an Bedeutung und das gasförmige RuO<sub>4</sub> bleibt je nach Stärke der Strahlung länger luftgetragen in der Atmosphäre. Für eine endgültige Betrachtung muss die freigesetzte Menge RuO<sub>4</sub> in einem Szenario zusammen mit der zu dem Zeitpunkt vorkommenden Strahlenbelastung bekannt sein. Diese Größen müssen zu realistischen Schätzungen verfügbarer Farbanstrichflächen in Relation gesetzt werden. Die durchgeführte Testrechnung bestätigt, dass eine Rutheniumquelle zu einer Vergrößerung des Quellterms führen könnte. Zur genaueren Bewertung müssen allerdings Einzelheiten eines zu betrachtenden Szenarios bekannt sein.

#### 2.6 Chemisorption von I<sub>2</sub> auf Aerosolpartikeln

Die „Chemisorption von I<sub>2</sub> auf Aerosolpartikeln“ in der Atmosphäre wird weitgehend analog gehalten zu dem in Abschnitt 2.2 beschriebenen „Verhalten von Silber-Partikeln im Sumpf“. Die ausführlichere Modellbeschreibung erfolgt in dem genannten Abschnitt, während hier nur die Modellanpassungen für die Atmosphärenreaktion beschrieben werden.

##### 2.6.1 Chemisches Modell

Die Modellierung der Atmosphärenreaktion erfolgt weitgehend analog zu der in der Wasserphase. Die Annahme, dass sich das Silberiodid auf der Oberfläche der Partikel bildet und die reaktive Oberfläche in der Atmosphäre verringert, wird durch folgende Gleichung berücksichtigt:

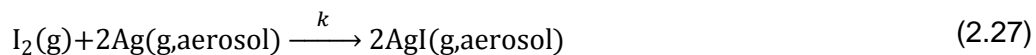
$$S = \frac{S_{Ag}m_{Ag} - S_{AgI}m_{AgI}}{m_{Ag}} \quad (2.26)$$

Dabei wird die Oberfläche der Partikelgrößenverteilungen für Silber und Silberiodid über die spezifische Oberfläche  $S$  [m<sup>2</sup>/kg] und die Massen  $m$  [kg] der einzelnen Komponenten

berechnet. Die AgI-Oberfläche wird von der Ag-Oberfläche abgezogen und die neu berechnete spezifische Oberfläche  $S$  für diese Reaktion durch Division durch die Silbermasse gebildet.

## 2.6.2 Silber-Iod-Reaktionen in der Atmosphäre

Die Silberiodid(AgI)-Bildung im Gasvolumen erfolgt nach folgender chemischen Reaktionsgleichung auf den Silberaerosolpartikeln:



Diese AgI-Bildung in der Atmosphäre wird beschrieben über die folgende Ratengleichung:

$$\frac{dI_2}{dt} = k I_2 Ag S_{Ag-AgI} M_{Ag} \quad (2.28)$$

Im Unterschied zur Reaktion im Sumpf gibt es eine Reaktionskonstante  $k$ , die nicht von weiteren Parametern abhängt. Außerdem wird in der Atmosphäre die verringerte Ag-Aerosoloberfläche  $S_{Ag-AgI}$  benutzt, von der die Oberfläche des AgI-Aerosols abgezogen wird. Die benötigten Werte werden folgendermaßen definiert:

$Ag$  Ag-Konzentration, kmol/m<sup>3</sup>

$I_2$  I<sub>2</sub>-Konzentration, kmol/m<sup>3</sup>

$k$  BAS = 0,01  $\frac{m}{s}$ ; EAKT = 0

$S_{Ag-AgI}$  Spezifische Fläche aller Silberpartikel, m<sup>2</sup>/kg, d. h. die Gesamtsilberoberfläche geteilt durch deren Masse. Diese wird abhängig von der Partikelgrößenverteilung berechnet. In dem Fall der atmosphärischen Reaktion wird die spezifische Oberfläche des AgI-Aerosols abgezogen.

$M_{Ag}$  Molare Silbermasse, kg/kmol

$t$  Zeit in s

### 2.6.3 Silber/Iod-Reaktionen an Oberflächen

Die heterogene Silber-Iod-Reaktion abgelagerter Silberpartikel auf Oberflächen im Gasraum unterscheidet sich nicht von der Silber-Iod-Reaktion im Gasvolumen, außer dass die Reaktion zwischen in der Atmosphäre gelöstem  $I_2$  und abgelagerten Ag-Partikeln erfolgt und abgelagertes AgI erzeugt wird:



Es handelt sich also um eine heterogene Reaktion mit den abgelagerten Silberpartikeln auf trockenen Oberflächen. Die Reaktion läuft nach derselben Ratengleichung ab:

$$\frac{dI_2}{dt} = k I_2 A_g S_{Ag} M_{Ag} \quad (2.30)$$

Außerdem wird für die heterogene Atmosphärenreaktion nicht die um AgI verringerte spezifische Oberfläche sondern die spezifische Oberfläche von Ag benutzt. Die Parameter haben dieselbe Bedeutung wie in dem Fall im Gasvolumen. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass das auf den Oberflächen abgelagerte Silber mit dem in der Atmosphäre gelösten  $I_2$  reagiert. Für die Silberkonzentration im betrachteten Volumen  $A_g$  gilt daher  $A_g = A_{gS} \frac{A_S}{V_S}$ , mit:

$A_{gS}$  Ag-Oberflächenkonzentration, kmol/m<sup>2</sup>

$A_S$  Strukturoberfläche, m<sup>2</sup>

$V_S$  Gasvolumen, m<sup>3</sup>

$k$  BAS = 0,01  $\frac{m}{s}$ ; EAKT = 0

Zusätzlich erfolgt eine Limitierung auf die Oberfläche der Struktur, da oben liegende Partikel weiter unten liegende verdecken.

#### 2.6.4 Anwendung auf den Versuch THAI Iod-26

In dem THAI-Versuch Iod-26 /FUN 13/ wird die Wechselwirkung von gasförmigen  $I_2$  mit aerosolförmigem Silber in der Atmosphäre untersucht. Dazu wird zunächst  $I_2$  in den THAI-Behälter eingespeist und über einen Zeitraum von 19,49 h die Wechselwirkung des Iods mit den Stahloberflächen in THAI beobachtet. Eine anfängliche schnelle Einspeisung von 89 g Ag-Aerosol erfolgt nach 19,49 h bis 19,59 h und eine längere Aerosoleinspeisung von 21,99 h bis 27,61 h mit 54,5 g Ag, während derer die Aerosolkonzentration im THAI-Behälter ungefähr konstant gehalten wird. Ein Vergleich der mit COCOSYS berechneten und mit Filtern bzw. optisch mit Laser gemessenen Aerosolkonzentration ist in Abb. 2.28 dargestellt.

Das eingespeiste Silberaerosol führt zu einer schnellen Reaktion des Iods mit diesem Aerosol. Dieses Verhalten bewirkt eine rasche Abnahme der Iodkonzentration nach der Silbereinspeisung. Dieses Verhalten ist gut in Abb. 2.29 zu erkennen. Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den COCOSYS-Resultaten zeigt eine gute Übereinstimmung während der Ablagerungsphase auf den Stahloberflächen. Die Reaktion mit den Silberpartikeln kann plausibel berechnet werden.

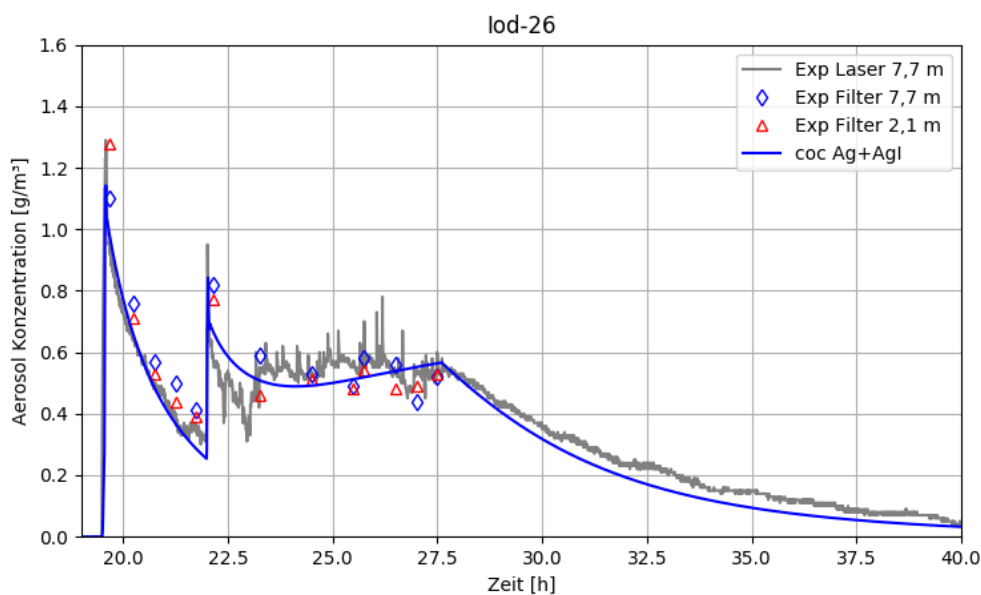
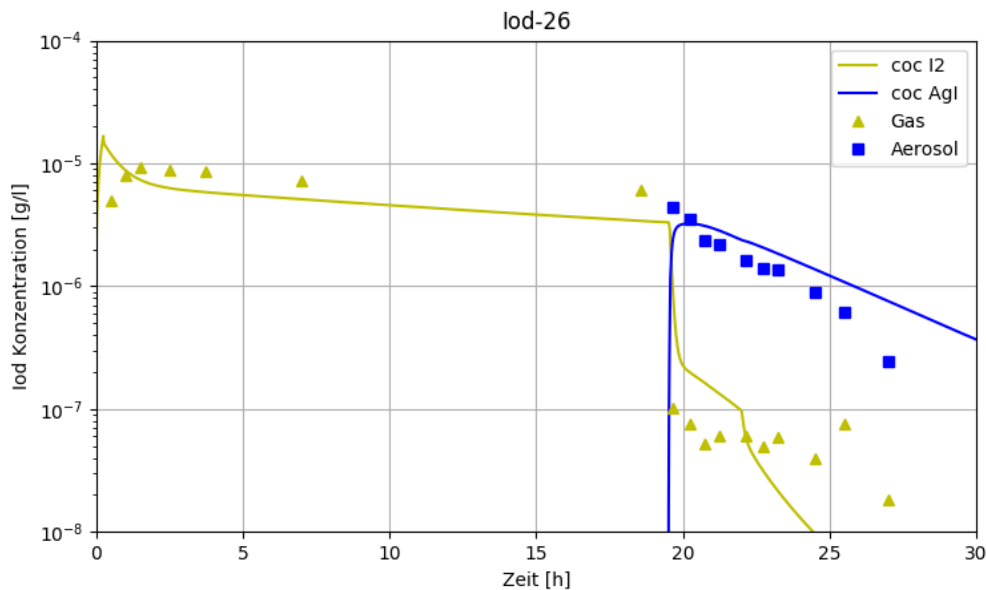


Abb. 2.28 Gemessene und berechnet Aerosolkonzentration, THAI Iod-26



**Abb. 2.29** Gemessene und berechnete  $I_2$ - und AgI-Konzentrationen, THAI Iod-26

### 2.6.5 Diskussion der Ergebnisse und der Modellierung

Die Arbeitspunkte „Verhalten von Silber-Partikeln im Sumpf“ und „Chemisorption von  $I_2$  auf Aerosolpartikeln“ sind einheitlich bearbeitet worden, da die betrachteten chemischen Reaktionen dieselben sind. Die hier erläuterte Modellierung der Silber/Iod-Reaktion in der Atmosphäre ist zusammen mit den in Abschnitt 2.2 beschriebenen Ergebnissen für die Sumpfreaktion /KLE 17c/ dargestellt.

Von entscheidender Bedeutung ist die vorhandene reaktive Oberfläche von aerosolförmigen Silberpartikeln im Sumpf und in der Atmosphäre. Für beide Fälle wird die reaktive Oberfläche anhand der Partikelgrößenverteilung des Silbers berechnet. Von dieser Fläche wird in der Atmosphärenreaktion die Oberfläche des erzeugten Silberiodids abgezogen, da angenommen wird, dass die Silberiodidschicht auf der Oberfläche der Aerosolpartikel entsteht und eine weitere Reaktion des Silbers effektiv verhindert. Diese Verringerung der reaktiven Oberfläche wird derzeit in der Sumpfreaktion aufgrund von Restriktionen im AFP-Modell nicht benutzt. Die Berechnungsmethode kann sich mit zunehmender Erfahrung mit dem Modell noch ändern, wobei möglicherweise eine separate Berechnung der benötigten Parameter für jede Größenklasse als sinnvoll erscheinen könnte.

Auch heterogene Reaktionen sind jeweils für abgelagertes Material auf Sumpf bzw. Oberflächen in der Gasphase implementiert worden. Auch bei diesen Reaktionen wird

die reaktive Oberfläche der Aerosolpartikel berücksichtigt. Allerdings wird weder eine partikelgrößen-spezifische Reaktion noch eine Verringerung der Oberfläche durch gebildetes Agl berücksichtigt. Ob diese Ansätze ausreichend sind, kann in Zukunft vertieft diskutiert werden.

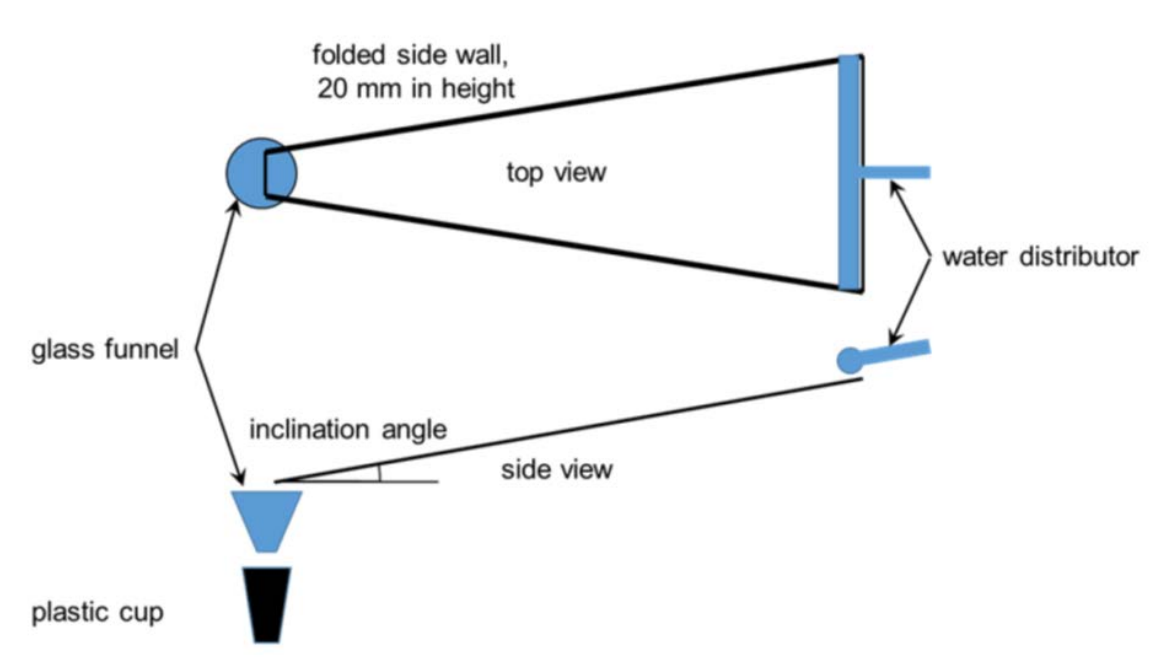
Nachrechnungen der Versuche THAI-AW-3, für die Silber-Iod-Reaktion im Sumpf, und THAI-Iod-26, für die Chemisorption an luftgetragenen Silberaerosolen, liefern unter diesen Annahmen plausible Ergebnisse. Unsicherheiten für die Geschwindigkeit der Reaktion liefern die Partikelgrößenverteilung des Aerosols sowie die Prozesse der Silberiodidbildung an den Partikeln. Andere mögliche Ansätze können auch Diffusionsprozesse innerhalb des Partikelmaterials betrachten. Die untersuchten Experimente lassen allerdings keine Aussage über derlei Phänomene zu, weswegen zunächst eine möglichst einfache Berechnung der Silberoberfläche implementiert worden ist. Zukünftige Arbeiten könnten diesen einfachen Ansatz revidieren. Hierbei sind Versuche mit vergleichsweise geringen Silbermengen notwendig, um diesen Effekt untersuchen zu können. Im Rahmen des COCOSYS-Validierungsvorhabens ist geplant, diese neuen Modelle in der erneuten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Iodmodelle anhand von PHEBUS-FPT1 einzusetzen.

## **2.7 Abwaschen von unlöslichen Aerosolen**

### **2.7.1 Modellfortschritt**

Das im Vorhaben RS1185 entwickelte Modell AULA (Abwaschmodell für unlösliche Aerosole) wurde im Rahmen der Umstrukturierung des neuen AFP-Moduls eingebaut. Mit dem AULA-Modell ist es nun möglich, unlösliche Aerosole, die auf Oberflächen abgelagert sind, mit einem ablaufenden Kondensatfilm abzuwaschen. Das neue Abwaschmodell basiert auf einem Ansatz aus der Geologie, in dem der Transport von Sediment beschrieben wird. Ein Partikel erodiert, wenn die gerichtete Summe aus hydrodynamischer Kraft und Auftriebskraft die Summe aus Gravitationskraft, Reibungskraft und Kohäsionskraft übersteigt. A. Shields löst das Problem mithilfe eines von ihm formulierten Kriteriums. Das Shields-Kriterium besagt, dass die Erosion eines abgelagerten Partikels dann beginnt, wenn die Flurgeschwindigkeit über der Partikelschicht einen kritischen Wert übersteigt. Dieses Kriterium ist gültig für eine große Anzahl von Partikelgrößen und Flurgeschwindigkeiten.

Das Abwaschverhalten von unlöslichen Aerosolen (nicht-lösliche Silberaerosole) wurde unter dem Einfluss verschiedener Neigungswinkeln im Rahmen von Laborversuchen von Becker Technologies untersucht. In Abb. 2.30 ist der Versuchsaufbau exemplarisch skizziert.



**Abb. 2.30** Versuchsaufbau des AW-3 Lab Tests /LAU 14/

Mithilfe der in THAI-V durchgeführten Laborexperimente wurde das Modell AULA entwickelt und überprüft.

Für die ersten Nachrechnungen mit dem neuen COCOSYS-Modell AULA wurden drei Versuche mit unterschiedlichen Neigungswinkeln verwendet (siehe Tab. 2.1). Im Rahmen dieses Berichtes wurden daraus zwei Versuche exemplarisch ausgewählt und diskutiert. Neben den unterschiedlichen Neigungswinkeln lagen außerdem auch noch unterschiedliche Aerosolbeladungsmengen auf den Stahlblechen sowie unterschiedliche Wassermassenströme vor.

**Tab. 2.1** Test Matrix /LAU 14/

Test	Aerosol loading (aimed / achieved)	Aerosol SMD	Plate surface	Inclination	Water flow rate
Nr	[g/m <sup>2</sup> ]	[µm]	[-]	[°]	[g/s]
1	11 / 11.5	0.7-1.2	Decont. Paint	2	1.3
2	50 / 67.4	0.7-1.2	Decont. Paint	2	11
3	30 / 26.4	1.5-2.5	Decont. Paint	2	11
4	30 / 27	1.5-2.5	Decont. Paint	20	11
5	11 / 8.5	0.7-1.2	Decont. Paint	20	11
6	2.5 / 0.5	0.7-1.2	Decont. Paint	90	12
7	9 / 4.8	0.7-1.2	Decont. Paint	90	12
8	5 / 0.6	1.5-2.5	Decont. Paint	90	12
9	50 / 66.4	0.7-1.2	Decont. Paint	2	1.3
10	9 / 4.8	0.7-1.2	Decont. Paint	90	1.5
11	30 / 26.7	1.5-2.5	Stainless Steel	10	12
12	11 / 10.2	0.7-1.2	Stainless Steel	10	11
13	5 / 0.6	1.5-2.5	Stainless Steel	90	12
14	2 / 0.5	0.7-1.2	Stainless Steel	90	1.3
15	50 / 68.6	0.7-1.2	Decont. Paint	2	Rivulettest

Die Versuchsergebnisse haben gezeigt, dass in allen Versuchen zunächst ein anfänglich schnelles Abwaschen der abgelagerten Aerosole stattfindet, welches schließlich in ein langsames und lange andauerndes Abwaschen übergeht. Des Weiteren verdeutlichen die Versuche, dass durch die Entstehung von zeitlich stabilen Rivulets nur ein Teil der Bleche benetzt wird und die Rivuletbreite abhängig vom Neigungswinkel ist.

Erste Nachrechnungen mit dem neuen Abwaschmodell haben allerdings einige Unstimmigkeiten zwischen den experimentellen Daten und den mit COCOSYS berechneten Ergebnissen gezeigt. Aus diesem Grund und anhand der Auswertung der Versuchsdaten wurde das Modell verbessert, sodass sich nun nach einer kurzen, exponentiellen Abwaschphase eine langsame, lineare Abwaschphase anschließt. Diese langsamere, lineare Abwaschphase wird in dem weiterentwickelten Modell als zusätzlicher Abwaschpfad berücksichtigt. Dieser weitere Abwaschpfad wird als „Rivulet Mixing Option“ bezeichnet.

In COCOSYS werden nun zwei Abwaschpfade wie folgt modelliert: Die Abwaschrates  $k_e$  in AULA führt zu einem ersten schnellen linearen Abwaschen der abgelagerten Aerosole. Die „Rivulet Mixing Option“ beschreibt den Mitriss der Aerosole entlang der seitlichen Kanten der Rivulets aufgrund von Turbulenzen bzw. einer leichten seitlichen Verschiebung der Rivulets. Dieses wird mit dem Term



$$r = \frac{v_{riv} h}{A} \quad (2.31)$$

mit der abgelagerten Aerosolmassendichte  $M_{dep}/A$ , einer effektiven seitlichen Verschiebung der Rivulets  $v_{riv}$  als Eingangsgröße sowie der Lauflänge der Rivulets bzw. der Wandhöhe  $h$  beschrieben.

Die Gleichungsform führt zu einem linearen Term in der Abwaschrage, der so auch in den Experimenten beobachtet wurde. Die im AULA-Modell resultierende Abwaschrage  $k_E$  führt dagegen zu einem exponentiellen Abfall der abgelagerten Aerosolmasse ( $c_{Ae}$ ).

$$r = k_E c_{Ae} = \begin{cases} k_{E,0} \frac{(u_*^2 - u_{*,c}^2)}{u_{*,c}^2} c_{Ae} & u_* > u_{*,c} \\ 0 & u_* \leq u_{*,c} \end{cases} \quad (2.32)$$

Beide Abwaschpfade laufen in COCOSYS simultan ab, jedoch dominiert in der ersten Phase das exponentielle Abwaschen und in der zweiten Phase, wenn die Oberfläche unter den Rivulets abgewaschen ist, das lineare Abwaschen, welches den weiteren Anstieg der Aerosolmenge im Sumpf in der späten Phase erklärt.

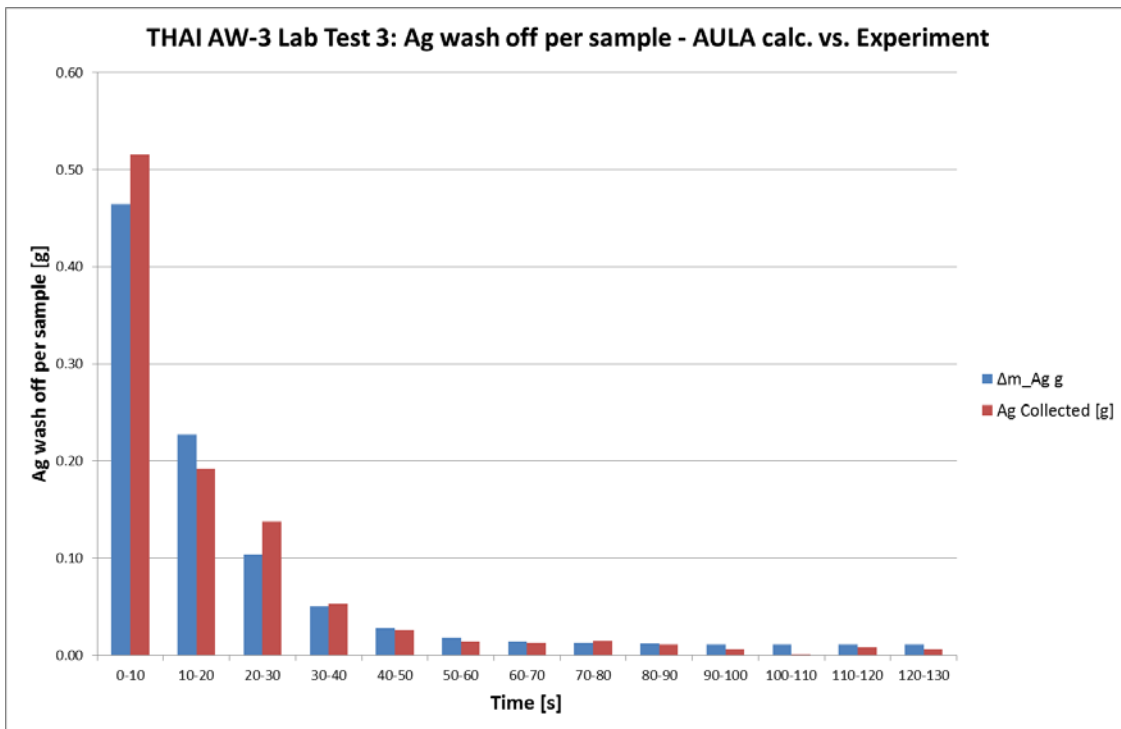
Eingabegrößen für das neue Modell sind u. a. die WET\_FRACTION (Flächenanteil, welcher im Versuch von einem Rivulet überdeckt wurde) und die FILM\_FRACTION (Flächenanteil der Rivulettoberfläche bzw. Filmoberfläche).

Ist die kritische Schergeschwindigkeit des Films an der Oberfläche überschritten,  $u_* > u_{*,c}$ , werden langfristig alle Aerosole unterhalb des Rivulets abgewaschen. Die Auswertung der Versuchsdaten hat gezeigt, dass die auf der Basis der abgewaschenen Aerosolmengen (exponentielle Phase) bestimmte Rivuletfläche und die nasse Fläche viel zu gering sind. Die sogenannte Rivuletgeschwindigkeit  $v_{riv}$  wird entsprechend des linearen Anstiegs ermittelt.

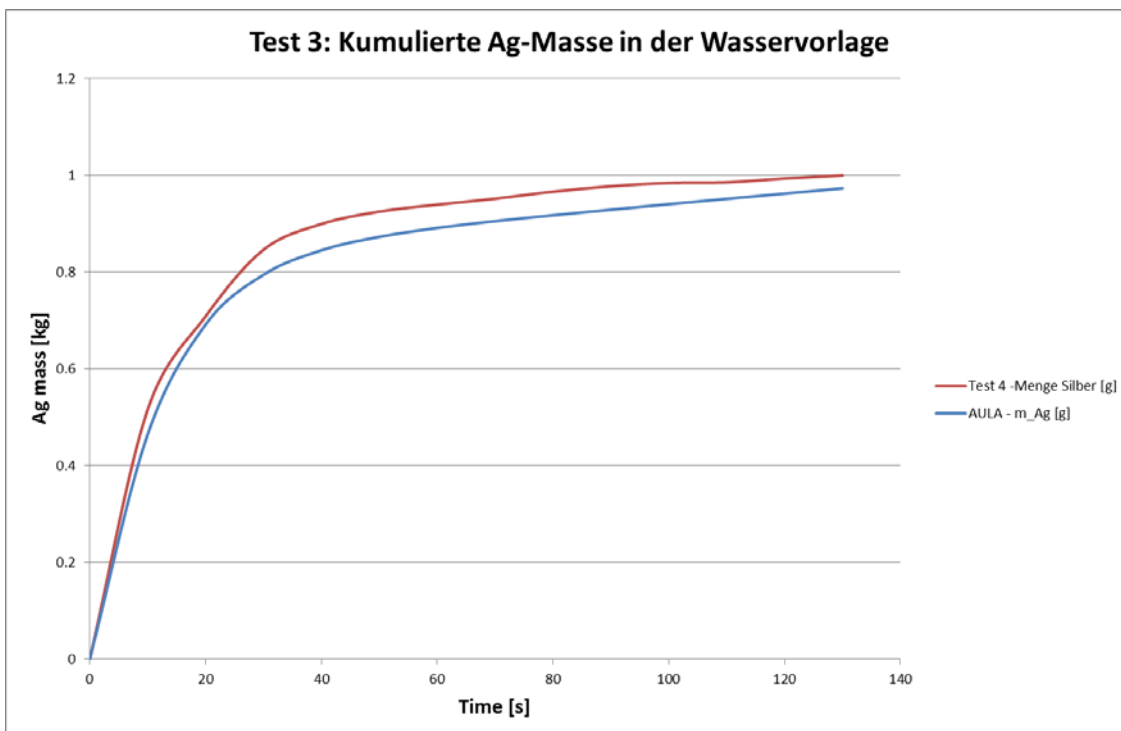
## 2.7.2 Ergebnisse zur Nachrechnung von AW-3 Lab-Tests

### 2.7.2.1 AW-3 Lab Test 3

Die Nachrechnung von „AW-3 Lab Test 3“ (Aerosolbeladung von 26 g/m<sup>2</sup>, aufgeprägte Wassermassenstrom 11 g/s und Neigungswinkel des Bleches 2°) ergibt im Vergleich mit den Versuchsdaten eine sehr gute Übereinstimmung (vgl. Abb. 2.31 und Abb. 2.32). In Abb. 2.31 ist die gemessene der mit COCOSYS/AULA berechneten Erosionsrate für diesen Versuch gegenübergestellt. In Abb. 2.32 wird die gemessene Silbermasse mit der mit COCOSYS/AULA berechneten Silbermasse in der Wasservorlage des Versuchs verglichen. Der WET\_FRACTION Anteil wurde aus den Versuchsdaten mit 0.099326 berechnet und die im Input vorgegebene RIV\_MIX\_VEL mit 3.484E-05 m/s. Das Abwaschen der Ag-Aerosole ist nur möglich, wenn in der Rechnung eine Dichte von  $\rho = 2000 \text{ kg/m}^3$  angenommen wird. Bei einer sehr hohen Dichte  $\rho = 10000 \text{ kg/m}^3$  sind die Partikel zu schwer und der Abwaschprozess startet nicht. D. h. die zu überwindende kritische Schergeschwindigkeit („Shear Velocity“) kann in der Rechnung durch die aus den vorliegenden Rivulets berechnete Schergeschwindigkeit nicht überschritten werden. Außerdem sind die Rechnungen mit einem größeren  $K_{E0} = 0.09 \text{ 1/s}$  durchgeführt worden. Durch die Anpassung der Erosionskonstante, die die Geschwindigkeit des Abwaschprozesses beschreibt und experimentell bestimmt werden muss, können die Versuchsergebnisse genau nachgerechnet werden. In /WEB 11/ ist die Erosionskonstante definiert als die Erosionsrate bei der doppelten kritischen Sohlschubspannung.



**Abb. 2.31** AW-3 Lab-Test 3, gemessene und mit COCOSYS/AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate



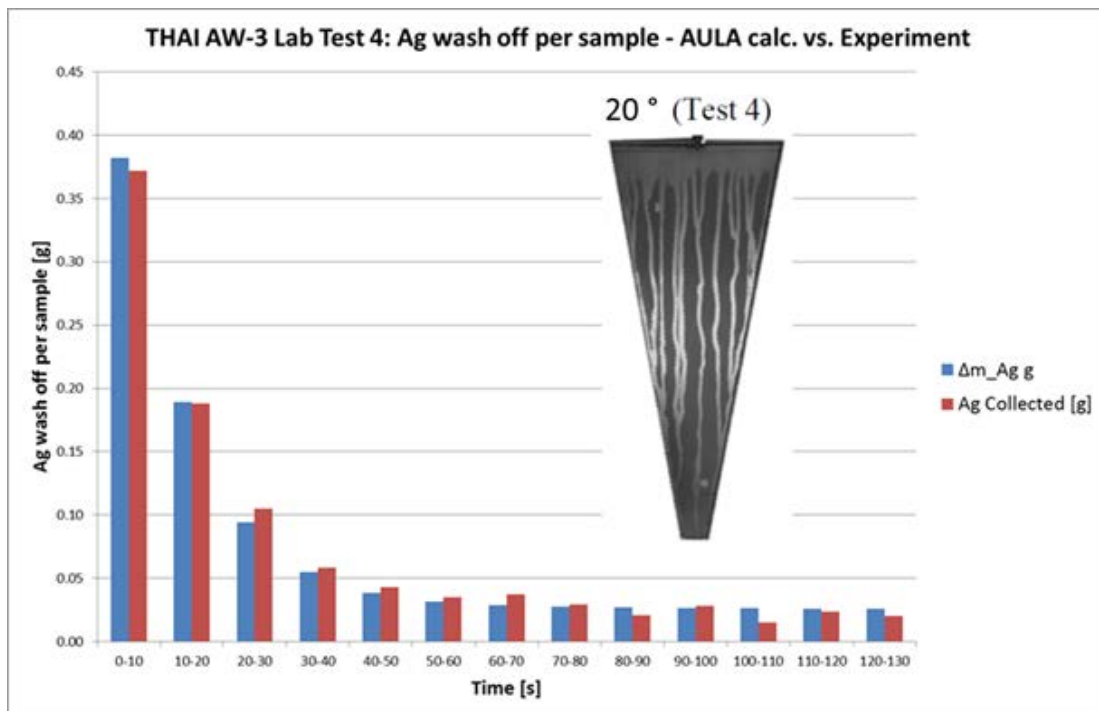
**Abb. 2.32** AW-3 Lab-Test 3, gemessene und mit COCOSYS/AULA (cV3.0dev) berechnete akkumulierte Silbermasse in der Wasservorlage

### 2.7.2.2 AW-3 Lab Test 4

Im versuch „AW-3 Lab Test 4“ wird eine Aerosolbeladung von 27 g/m<sup>2</sup> auf dem mit De-kontaminationsfarbe beschichteten Stahlblech erzielt.

Auch bei diesem Versuch beträgt der aufgeprägte Wassermassenstrom 11 g/s und der Neigungswinkel des Bleches 20°.

Wie in Abb. 2.33 zu sehen ist, entstehen über die Zeit ca. 10 Rivulets die ca. 45 % der Stahlblechoberfläche überdecken. Die Ergebnisse der Nachrechnung im Vergleich mit den Versuchsergebnissen sind in Abb. 2.33 dargestellt. Zu Beginn des Abwaschens ist die höchste Erosionsrate vorzufinden. Nach der exponentiellen Abwaschphase (t = 40 s) sind ca. 17,3 % der Aerosole bezogen auf die nassen Flächen abgewaschen. Nach 130 s sind insgesamt 23,4 % der abgelagerten Aerosole bezogen auf die nassen Flächen abgewaschen. Die Ergebnisse der Berechnung sind in sehr guter Übereinstimmung mit den Versuchsdaten.



**Abb. 2.33** AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate

### **2.7.2.3 Erste Nachrechnung des THAI-Abwaschversuchs AW-3**

Zurzeit werden Nachrechnungen zu dem THAI-Abwaschversuch AW-3 gemacht. Der Versuch AW-3 wurde von Becker Technologies in der THAI Anlage durchgeführt und untersucht das Aerosolabwaschverhalten von nicht löslichen Silberaerosolen von horizontalen und vertikalen Wänden.

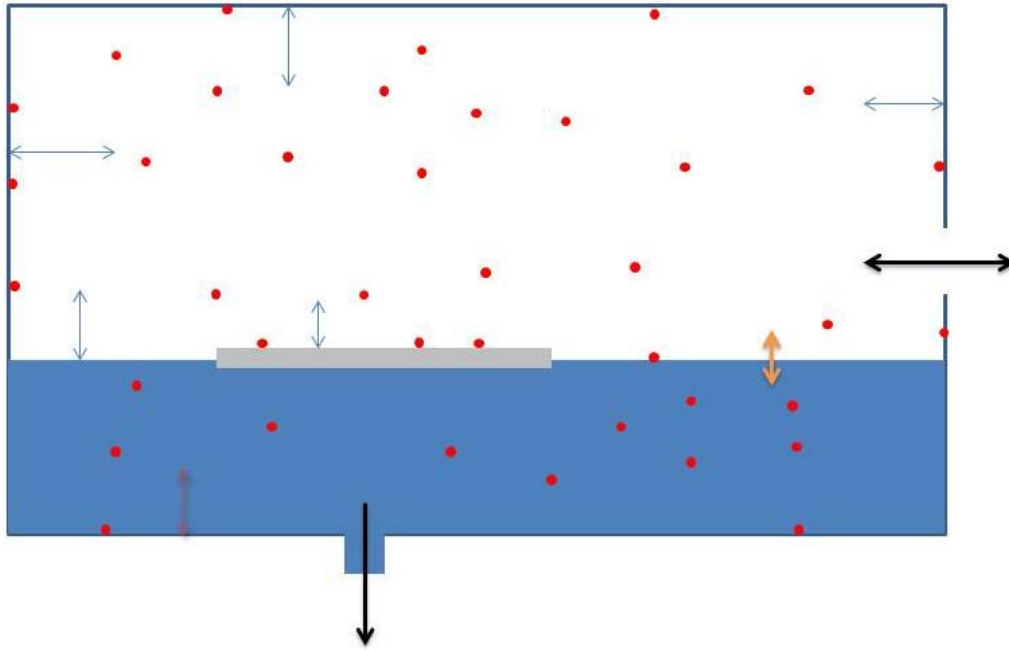
Bei den Nachrechnungen sind Unstimmigkeiten in den Ergebnissen aufgetreten, die zurzeit diskutiert werden und die evtl. daraus resultierenden Probleme müssen in einem nächsten Schritt behoben werden. Weitere, aus dem Versuch gewonnene Erkenntnisse müssen anschließend in das AULA-Modell übernommen werden.

## **2.8 AFP-Umstrukturierung**

Die Umstrukturierung des AFP-Hauptmoduls wurde fortgeführt, wobei auch grundlegende Konzepte teilweise erheblich erweitert wurden. Dies gilt insbesondere für die Simulation von Aerosolen und Spaltprodukten im Sumpfvolumen sowie für Abwaschprozesse von Aerosolen und Spaltprodukten von Strukturen.

### **2.8.1 Konzepte in Bezug auf die Modellierung des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens**

Im Rahmen des Vorhabens wurde die Sumpfmmodellierung im AFP-Hauptmodul implementiert. Details zur Handhabung des Modells sowie der implementierten Routinen sind im COCOSYS User- und Referenz-Manual dokumentiert. Ergebnisse der durchgeführten Testrechnungen sind in /KLE 17a/ beschrieben. Im Folgenden werden daher nur die phänomenologischen Aspekte der Modelle sowie der konzeptionellen Ergänzungen beschrieben. Die wesentlichen Prozesse des Aerosol- und Spaltproduktverhaltens sind in Abb. 2.34 dargestellt.



**Abb. 2.34** Betrachtete Prozesse und Schnittstellen im AFP-Hauptmodul (blau: Ablagerung/Resuspension; grün: Änderung des Wasserstandes; schwarz: Zu-/Abströmung; orange: Interaktion Wasser-Gasphase)

In der Atmosphäre suspendierte Aerosole lagern sich an den verschiedenen Wandstrukturen ab. In Erweiterung zur ursprünglichen Version wird nun jede Wandstruktur separat betrachtet, da die thermodynamischen Randbedingungen (Oberflächentemperatur, Wandkondensationsrate) sehr unterschiedlich sein können. Per Eingabe wird nun die Ausrichtung einer Wandfläche vorgegeben, so dass grundsätzlich auch schräge Wandflächen betrachtet werden können. Durch eine Änderung des Sumpfwasserstandes ändern sich die Flächenverhältnisse  $A/V$ , die nun vom Modell entsprechend berücksichtigt werden. Da die Höhenkoten der Wandunterkante und Wandoberkante per Eingabe vorgegeben werden, werden die Flächenanteile (Wandsegmente) oberhalb und unterhalb des Wasserspiegels berechnet. Aerosole, welche sich an der Sumpfoberfläche ablagern, werden in das Sumpfvolumen transportiert. Transportprozesse (z. B. durch Atmosphärenverbindungen) werden selbstverständlich berücksichtigt. Wie im ursprünglichen AFP-Modell auch, werden die Aerosolgleichungen volumenweise (z. B. zonenweise) gelöst. Ebenso wird die Volumenkondensation (MGA-Modell) berücksichtigt.

Im neuen Konzept des AFP-Moduls werden generell „flüssige Volumina“ z. B. Sumpfvolumen und Wasserfilm betrachtet. Aerosole und Spaltprodukte (Spezies benannt) werden über Drainageverbindungen transportiert. Für „Sump-Balance“-Verbindungen

(Sumpfausgleich) wird eine mögliche Zirkulation von Wasser aufgrund von Temperaturunterschieden ebenso in der Transportgleichung berücksichtigt. Nicht lösliche Aerosole werden am Sumpfboden abgelagert. Auch hier wird die Ausrichtung der Wandoberflächen im Sumpf berücksichtigt. Wie im ursprünglichen AFP auch, wird in Bezug auf das nicht lösliche Aerosol eine Sinkgeschwindigkeit direkt vorgegeben oder diese mit einer vorgegebenen Aerosoldichte berechnet. Im zweiten Fall wird der mittlere Durchmesser der Aerosole benötigt. Daher wird im neuen AFP-Hauptmodul die Größenverteilung auch in flüssigen Volumina (Sumpfvolumen) berechnet. Allerdings erfolgt nur eine Bilanzierung der einzelnen Größenklassen. Somit wird eine mögliche Agglomeration im Sumpfvolumen nicht berücksichtigt.

Im neuen AFP-Hauptmodul wird jede Wandfläche einzeln betrachtet. Dabei werden drei verschiedene Positionen (Hosts) für die Spezies (Bilanzbaum) vorgesehen. Diese sind der trockene Flächenanteil, der nasse Flächenanteil (mit darüber liegenden Wasserfilm, abgebildet als flüssiges Volumen) und der Anteil unterhalb des Wasserspiegels.

Die Bilanzgleichungen werden in Bezug auf chemische Verbindungen bzw. auf Basis von Elementen aufgestellt. Diese bilden einen sogenannten „Chemie-Vektor“. Dieser Vektor wird dann für alle Hosts (Volumina, Flächen usw.) geschlossen gelöst. Im ursprünglichen AFP-Hauptmodul erfolgt die Lösung der chemischen Gleichungen in AIM compartmentweise (bzw. zonenweise) und der Transport der einzelnen Elemente in FIPHOST elementweise für alle Zonen.

Da die Elemente unterschiedliche Isotopenspektren haben können, müssen diese formal für jeden Host unterschieden werden. Daher muss die Lösung des gesamten Chemie-Vektors auf den „Bilanzbaum“ rückgerechnet werden. Um den Transport jeder einzelnen Spezies nachvollziehen zu können, werden bei der Integration nicht nur die einzelnen Hosts sondern auch jede Schnittstelle einzeln betrachtet. Bei der Rückrechnung ist zu vermeiden, dass bei schnellen Transienten negative Massen berechnet werden. Somit erfolgt die Rückrechnung bei Bedarf schrittweise.

Aufgrund der Sedimentation von Aerosolen können diese durch vertikale Öffnungen transportiert werden. Dabei muss eine mögliche Gegenströmung berücksichtigt werden. Im Rahmen des Vorhabens wurde das im ursprünglichen AFP-Modul vorhandene Modell in die neue Struktur übertragen. Da der Transport von der Größe der Partikel abhängt,

wurde eine separate Struktur parallel zur der für atmosphärische Verbindungen geschaffen. Der Einfachheit halber erfolgt die Berechnung wie die für die Strömungsverbindungen innerhalb der Integration der Aerosolgleichungen.

### **2.8.2 Modellierung von technischen Systemen**

Im Zuge der Umstrukturierung wurden die im originalen AFP-Modul enthaltenen Filtermodelle übertragen. Es sind mehrere Modelle und Optionen vorhanden. Diese sind:

- Vorgabe der Filtereffizienz per Eingabe
- HEPA Filter (Faser)
- Granulat Filter
- Demister (auf Basis von HEPA Filtern)
- Wie im User-Manual beschrieben, ist es möglich, die Filtereffizienz als auch den Druckverlust zu kalibrieren. Bezüglich des Druckverlustes stehen verschiedene Modelle zur Verfügung. Im Rahmen der Modellerweiterung für Metallfaserfilter wurden zusätzliche Korrelationen für die Berechnung des Druckverlustes implementiert /WEB 13/.

Die Filtermodelle wurden bei der Umstrukturierung nicht verändert. Da eine unterschiedliche Behandlung zwischen Aerosol- und Iodrechnung nicht mehr vorhanden ist, wurde die Vorgabe von Dekontaminationsfaktoren für Iodspezies angepasst. Nun ist es möglich, für jede gasförmige chemische Verbindung einen separaten Faktor vorzugeben. Für jede einzelne Filterbank in einem Filtersystem wird ein separater Host erzeugt. Um in Zukunft zusätzliche Modelle implementieren zu können, wurde ein separates AFP-Objekt AE\_FILTER in einem separaten Modul erzeugt. Modelle zur Temperaturberechnung sowie zu chemischen Reaktionen sind wie beim originalen AFP noch nicht implementiert.

Zur Überprüfung der Implementation wurden zahlreiche Testrechnungen durchgeführt, die in /KLE 17a/ dargestellt werden.

### **2.8.3 Implementierung des Restarts im neuen AFP-Modul**

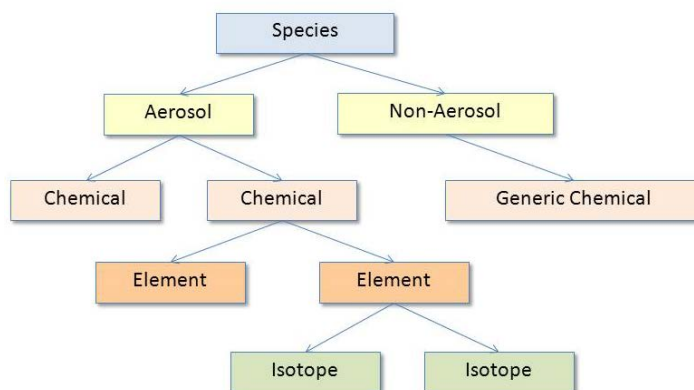
Eine wesentliche Anforderung an Systemprogramme ist die Restartfähigkeit. Aufgrund der neuen Datenstruktur mussten neue Routinen hierzu geschrieben werden. Dabei soll



wie bisher auch eine gewisse Flexibilität beim Aufsetzen des Restarts (z. B. Einführung neuer Verbindungen zwischen den Zonen) möglich sein. Durch die Verwendung des Daten-Element-Moduls (DEM) für den Austausch der Daten zwischen den Programmen mussten diesbezüglich auch neue Konzepte entwickelt werden.

Da es beim Restart möglich ist, neue Spezies hinzuzufügen, wird im ersten Schritt die Struktur des „Speziesbaums“ (Abb. 2.35) mit den jeweiligen Namen der Spezies in den verschiedenen Ebenen gespeichert. Beim Einlesen des Restarts liegt dann die aktuelle Struktur des Speziesbaums (*init\_species*) und die aus dem Restart (*rstr\_species*) vor.

An den verschiedenen Positionen (Hosts) im Containment sind die Massen in einer solchen Baumstruktur gespeichert. In einer weiteren Routine werden die Massen im Restart gespeichert bzw. wieder ausgelesen. Dabei werden durch den Abgleich beider Baumstrukturen die jeweiligen Massen in die aktuelle Baumstruktur übertragen.



**Abb. 2.35** Struktur des Speziesbaums im neuen AFP-Modul in COCOSYS

Durch Änderungen im Datensatz (z. B. zusätzliche Wandstrukturen) kann sich die Gesamtzahl der Hosts ändern. Daher wird die Zuordnung zwischen Restartdaten und aktuellen Daten für die verschiedenen Objekttypen (Aerosolvolumina, Wasservolumina, Transferobjekte, Oberflächen und Filterobjekte) über die Namen und zusätzliche Indizes der Hosts aus dem Restart und der aktuellen Hosts gewährleistet. Weiterhin werden die Massenbilanzen im Restart gespeichert. Beim Einlesen wird berücksichtigt, dass sich die Anzahl der Elemente ändern kann.

Im neuen AFP-Modul erfolgt der Datenaustausch zu den anderen Modulen vollständig über das sogenannte Daten-Element-Modul (DEM). Hier sind die Daten in vollständig

verlinkten Datenknoten in einheitlicher Form gespeichert. Diese Datenbank wird vollständig im Restart vom Treiber gespeichert und beim Restart wieder eingelesen und an die jeweiligen Module verteilt. Damit ist es im Gegensatz zum alten AFP-Modul nicht mehr notwendig, thermohydraulische Randbedingungen im Restart zu speichern.

Änderungen im Datensatz (z. B. eine zusätzliche Verbindung) müssen in der Datenbank berücksichtigt werden. Hierbei ergibt sich die Schwierigkeit, dass Felder (z. B. die Geschwindigkeit) als Ganzes gespeichert werden. Um solche Änderungen berücksichtigen zu können, wurde das DEM entsprechend ergänzt. In den Datenknoten werden nun auch die Argumenttypen für die einzelnen Dimensionen der Felder gespeichert. Damit erkennt das DEM, dass solche Felder u. U. angepasst werden müssen. Weiterhin werden von den betreffenden Modulen Informationen zu möglichen „variablen“ Argumenten bereitgestellt, also solche, welche beim Restart geändert werden können. Diese Informationen beinhalten die Anzahl der Indizes sowie deren Namen, und Informationen, welche Felder ausgetauscht werden müssen (z. B. njunc). Ebenso werden für neue Indizes (also z. B. neue Wandstrukturen) Anfangswerte (wie z. B. Anfangswandoberflächentemperaturen) benötigt. Daher wird eine Liste mit Feldnamen sowie deren Anfangswerte bereitgestellt. Im Treiber wird dann die Datenbank entsprechend der Anweisungen überarbeitet. Durch das allgemeine Konzept sind Ergänzungen diesbezüglich leicht möglich.

## **2.9 Sprühen mit kontaminiertem Wasser**

Sprühsysteme werden im Containment verschiedener KKW zur Begrenzung des Druckanstiegs im Auslegungsbereich oder zur Reduktion der luftgetragenen Aerosolkonzentration bei Unfällen verwendet. Die Wasservorratsquellen für die Sprühsysteme sind unterschiedlich. Es kann sich dabei um „reines“ bzw. um bereits kontaminiertes Wasser handeln. Im Fall von kontaminiertem Wasser können mit den feinen Sprühtröpfchen auch wieder radioaktive Aerosole oder Iod-Spezies in die Sicherheitsbehälteratmosphäre eingetragen werden, was die Effektivität des Sprühsystems für das Aerosolwaschen beeinflusst. Zusätzlich können auch flüchtige Iodspezies, wie elementares Iod ( $I_2$ ) und Organoiod (RI), direkt aus den Tropfen gasförmig in die Atmosphäre freigesetzt werden. Verdunsten die Sprühtröpfchen vollständig, entstehen darüber hinaus aus den nicht-flüchtigen Rückständen – das sind alle löslichen und unlöslichen Stoffe inklusive der Spaltprodukte – Aerosolpartikel. Diese Wiederfreisetzung von Spaltprodukt-Gasen und -Aerosolen erhöht die luftgetragene Konzentration und – abhängig vom Unfallszenario – ggf. auch den Quellterm.

Bisher sind in COCOSYS nur Modelle zum Auswaschen von Aerosolen und Spaltprodukten implementiert. Der Massenaustausch von flüchtigen Iodspezies kann nur vereinfacht simuliert werden (keine Sprühpfade; die Berechnung der Massentransferkoeffizienten berücksichtigt nicht die tatsächlichen Randbedingungen). Die Freisetzung aufgrund einer vollständigen Verdunstung kann nicht simuliert werden.

### **2.9.1 Ergebnisse aus der Nachrechnung des THAI AW-4 Versuchs und der Vorausrechnungen des THAI Iod-31 Versuchs**

Im Rahmen des COCOSYS-Validierungsvorhabens RS1514 wurde erstmals das bestehende Aerosolsprühmodell in COCOSYS überprüft /KLE 16/. In den durchgeführten Rechnungen wurde bereits in der trockenen Anfangsphase die Aerosolabbaurate erheblich unterschätzt. Dagegen wird die Abbaurate in den Sprühphasen eher überschätzt. Ein Vergleich der Größenverteilung mit den Messwerten zeigt die Tendenz, dass eher größere und mittelgroße Partikel ausgewaschen werden. Insgesamt besteht noch erheblicher Verbesserungsbedarf an der durchgeführten Simulation. Eine systematische Modellschwäche ist aber nicht zu erkennen, daher wird das Modell im Hinblick auf das Auswaschen von Aerosolen in das umstrukturierte AFP übernommen.

Zu den geplanten Versuchen mit kontaminierten Wasser (enthält  $I_2$ ) wurden erste Vorausrechnungen durchgeführt. Dabei wurde festgestellt, dass aufgrund der kurzen Wechselwirkungszeit (Fallzeit der Sprühtropfen) die Wechselwirkung mit der Atmosphäre in den THAI-Versuchen relativ gering ist. Dies ist bei der Auslegung des Versuchs Iod-31 zu berücksichtigen. Ergebnisse lagen im Rahmen von RS1514 noch nicht vor.

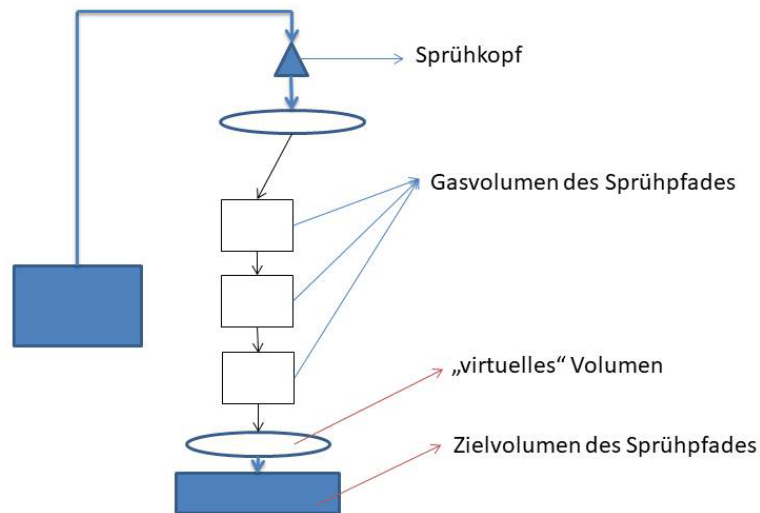
### **2.9.2 Eigenschaften und Konzeption des neuen Sprühmodells**

Um auch die Chemie im Sprühtropfen simulieren zu können sind umfangreiche Ergänzungen notwendig. Die Tab. 2.2 zeigt einen groben Vergleich der Eigenschaften des alten und des geplanten neuen Modells. In Bezug auf das Aerosol auswaschen durch Sprühtropfen werden die Modelle beibehalten. Die eigentliche Implementation ist allerdings etwas unterschiedlich. Im alten Modell werden Auswaschraten berechnet und diese dann bei der Transportberechnung mit berücksichtigt. Die Berechnung im neuen Modell erfolgt nach der Zeitintegration und der Transport durch das Auswaschen wird dann in den jeweiligen Bilanzbäumen berechnet. Im neuen Modell wird die Chemie im Tropfen simuliert. Ähnlich wie in der Thermohydraulik erfolgt die Integration in einer se-

paraten Schleife nach der eigentlichen Zeitintegration. Dies ist notwendig, da die Fallzeiten der Tröpfchen relativ kurz sind. Die Implementation wird so gestaltet, dass die Module in Bezug auf die Iodchemie direkt verwendet werden können. Zur Berechnung des Massentransfers werden nun die tatsächlichen Randbedingungen des Tropfens sowie seiner Umgebung verwendet. Zusätzlich soll berücksichtigt werden, dass die Sprühtröpfchen vollständig verdunsten. Die Freisetzung der Aerosole und Spaltprodukte erfolgt dann im entsprechenden Gasvolumen. Hier müssen dann allerdings Annahmen für die Größenverteilung der Aerosole getroffen werden.

**Tab. 2.2** Vergleich der Eigenschaften beider Aerosol-Sprühmodelle

<b>Eigenschaft</b>	<b>Altes Modell</b>	<b>Neues Modell</b>
<b>Aerosol auswaschen</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Berechnung der Koeffizienten E</li> <li>- Berechnung der Auswaschrate</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Berechnung der Koeffizienten E</li> <li>- Berechnung des Aerosoltransports</li> </ul>
<b>Chemie im Tropfen</b>	-	- Gleiche Reaktionen wie im Sumpf- bzw. Filmvolumen
<b>Massentransfer von I<sub>2</sub> und RI</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- nur ein Iodcompartment möglich</li> <li>- Verwendung des Massentransferkoeffizienten für Sumpfoberfläche</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Verwendung der Sprühpfade</li> <li>- Berechnung des Massentransfers an der Tropfenoberfläche mit entsprechender Korrelation</li> </ul>
<b>Vollständige Verdunstung des Tropfens</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- kann nicht berücksichtigt werden (Spezies gelangen in den Sumpf)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Freisetzung aller Spezies im entsprechenden Gasvolumen (für Aerosole wird eine Größenverteilung angenommen)</li> </ul>



**Abb. 2.36** Konzeption des Sprühmodells im AFP-Modul

### 2.9.3 Modellierung des Aerosolauwaschens

In diesem Kapitel wird das Modell zum Auswaschen von Aerosolen durch Sprühtröpfchen beschrieben. Details sind im COCOSYS-Benutzerhandbuch beschrieben. Die Änderung der Aerosolkonzentration  $c_{ae}$  wird durch die Gleichung

$$\frac{dc_{ae}(t)}{dt} = -\lambda_{spr}c_{ae}(t) \quad (2.33)$$

beschrieben, mit der Auswaschrates  $\lambda_{spr}$

$$\lambda_{spr} = \frac{3G_{dr}h_z E(d_{ae}, d_{dr})}{2\rho_{dr}V_z d_{dr}} \quad (2.34)$$

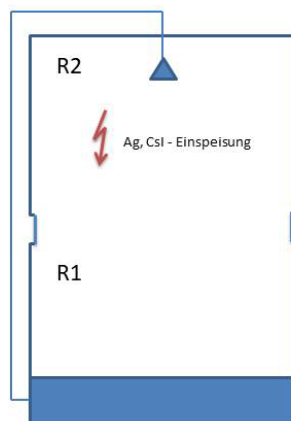
und

$G_{dr}$	Massenstrom des Sprühsystems [kg/s]
$h_z$	Fallhöhe der Sprühtröpfchen [m]
$d_{ae}$	Durchmesser der Aerosolpartikel [m]
$d_{dr}$	Mittlerer Durchmesser der Sprühtröpfchen [m]
$E(d_{ae}, d_{dr})$	Auswascheffizienz
$\rho_{dr}$	Dichte der Sprühtröpfchen [kg/m <sup>3</sup> ]
$V_z$	Volumen der Gaszone [m <sup>3</sup> ]

Die Auswascheffizienz  $E$  setzt sich aus mehreren Beiträgen zusammen. Diese sind Impaktion, Interzeption, Brownsche Bewegung, Thermophorese und Diffusiophorese. Näheres dazu ist im COCOSYS-Benutzerhandbuch beschrieben.

#### 2.9.4 Durchgeführte Testrechnungen

Das Modell zum Auswaschen von Aerosolen wurde aus dem ursprünglichen AFP-Hauptmodul übernommen. In der hier dargestellten Testrechnung wird gezeigt, dass die Ergebnisse mit dem neuen AFP-Modul gleich sind. Die Nodalisierung des Testbeispiels ist in Abb. 2.37 dargestellt. Zu Beginn der Rechnung werden bis  $t = 20$  s Ag- und Csl-Aerosole in der oberen Zone eingespeist. Eine Dampfeinspeisung in R2 erfolgt während der gesamten Problemzeit. Ab 25 s wird Wasser vom Sumpf aus der unteren Zone R1 in R2 gesprüht. Dadurch werden die Aerosole ausgewaschen und gelangen in den Sumpf von R1.



**Abb. 2.37** Nodalisierung des Testbeispiels zum Aerosol auswaschen

Die Abb. 2.38 zeigt den Vergleich der luftgetragenen Csl-Konzentration in den Räumen R2 und R1. Zu Beginn der Rechnung steigt die Konzentration in R2 aufgrund der Einspeisung. Danach sinkt diese aufgrund der Sedimentation in den unteren Raum sowie durch das Sprühen. Im unteren Raum R1 steigt die Aerosolkonzentration an und verbleibt auf einem niedrigen Niveau.

Die Ergebnisse der ursprünglichen und neuen AFP-Version sind erwartungsgemäß gleich. Der Vergleich der jeweiligen Auswaschraten ist in Abb. 2.39 dargestellt. Auch hier stimmen die Ergebnisse beider Rechnungen überein.

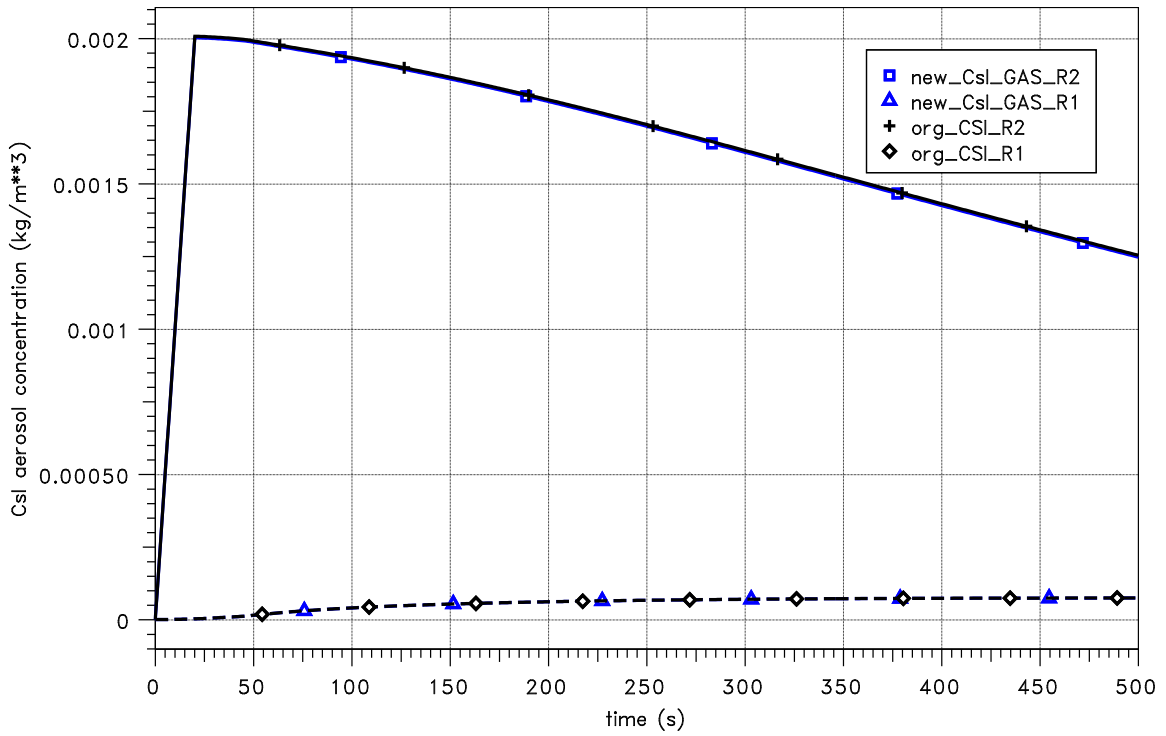


Abb. 2.38 Vergleich der Csl-Konzentrationen

NewAFP Spray Test

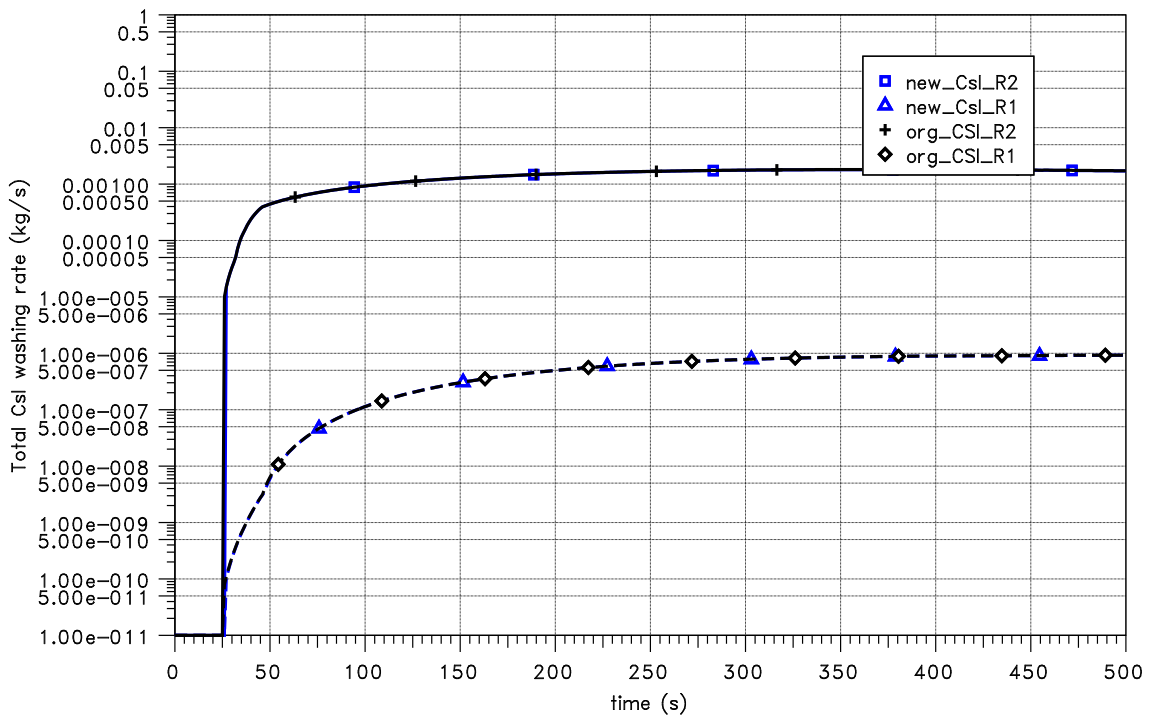


Abb. 2.39 Vergleich der Auswaschraten

## 2.10 Rückhaltung von I<sub>2</sub> und Organoiod in Wasservorlagen

Im Forschungsvorhaben war eine Anbindung des Iodmodells AIM an das Pool-Scrubbing-Modell SPARC geplant, um die Rückhaltung von gasförmigem Iod nicht durch SPARC sondern mit AIM zu berechnen. Eine Literaturrecherche zu dem Thema zeigt aber, dass derzeit keine geeigneten experimentellen Daten zur Validierung vorliegen. Erkenntnisse werden aus dem laufenden Pool-Scrubbing Projekt IPRESKA erwartet, das von Becker Technologies initiiert worden ist und derzeit für drei Jahre läuft.

Im Rahmen des Kick-off-Meetings zu IPRESKA ist ein Workshop zum aktuellen Stand des Wissens in der internationalen Gemeinschaft durchgeführt worden. Zum Iodscrubbing ist besonders der Vortrag von T. Albiol (IRSN) /ALB 17/ von Bedeutung. Dieser Vortrag zeigt die unterschiedlichen Ergebnisse mit den Pool-Scrubbing Codes BUSKA und SPARC. Im Bereich der experimentellen Untersuchungen werden besonders Arbeiten bei PSI genannt, die auch auf dem internationalen Iod-Workshop in Marseille 2015 vorgestellt worden sind. Insbesondere die Arbeiten von Lind /LIN 16/ und Suckow /SUC 16/ erscheinen relevant zu sein. Auf dem IPRESKA Workshop gab es auch einen kleinen Auszug aus den Arbeiten in der kleineren PSI-Anlage Mini-VEFITA /BEG 17/.

Unklar ist derzeit, ob die Arbeiten nur auf Wasservorlagen in Ventingstrecken anwendbar sind, oder ob die Ergebnisse auch für Analyse von Druckabbausystemen benutzt werden können. Generell erscheint eine Beobachtung der Diskussionen im IPRESKA-Vorhaben sinnvoll. Es ist wahrscheinlich, dass aufgrund der dort geführten Untersuchungen eine verbesserte Modellierung im Laufe ermöglicht wird. Es ist geplant, dass mögliche Rückwirkungen der IPRESKA-Ergebnisse auf die weitere Modellentwicklung für COCOSYS im Rahmen eines Nachfolgevorhabens umgesetzt werden. Zum jetzigen Zeitpunkt kann aufgrund der existierenden Datenlage nicht klar gezeigt werden, dass eine alternative Implementierung bessere Ergebnisse als SPARC liefern würde.





### **3 Modellentwicklung zur Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter und zur H<sub>2</sub>-Verbrennung**

#### **3.1 Modellierung des Flutens von Zonen**

##### **3.1.1 Zielsetzung**

COCOSYS erlaubt generell die Berücksichtigung eines Wasserpools in den Räumen im Nichtgleichgewichtsmodell. In den COCOSYS-Versionen bis einschließlich der Version V2.4v4 muss jedoch immer eine Gasphase vorhanden sein, ein vollständiges Fluten der Zonen ist nicht erlaubt. Im Rahmen des Forschungsvorhabens RS1508 wurde das Zonen-Nichtgleichgewichtsmodell um das vollständige Auffüllen der Zonen erweitert. Dabei konzentrierten sich die Arbeiten auf wesentliche Aspekte des Flutungsvorgangs, wie das Entfernen der Gasphase aus einer Zone, die Berücksichtigung der zeitabhängigen Wasserhöhe in der Zone bei wärmeleitenden Strukturen und die Einführung eines neuen Verbindungstyps, der den Transport von Wasser und von Gas erlaubt /SPE 14b/.

Durch die Konzentration auf diese Aspekte konnte die Lauffähigkeit und die Korrektheit dieser Teilimplementierungen demonstriert werden. Einige Aspekte der bisherigen Implementierung lassen jedoch die allgemeingültige Verwendung des Flutens nicht zu:

- Mit dem Entfernen der Gasphase beim Erreichen des Zustandes „vollständig gefüllt“ werden die offenen Verbindungen der gefüllten Zone miteinander verbunden, um so das Durchströmen des gefüllten Raumes zuzulassen. In der bisherigen Umsetzung der Modellerweiterung funktioniert dies jedoch nur für Räume mit maximal zwei Verbindungen.
- Das Strömen von Gas über eine Verbindung, die in einem Raum Kontakt mit der Gasphase hat, und die in dem anderen Raum vollständig unter Wasser liegt, war nicht erlaubt. Das Funktionieren dieser Konstellation ist jedoch notwendig, um das Entleeren der Zone mit der Erzeugung einer neuen Gasphase zu ermöglichen.

Im laufenden Vorhaben sind in Bezug auf das Zonenfluten in COCOSYS einige Änderungen durchgeführt worden. Manche Änderungen betreffen Details, die die Stabilität und Fehlerkontrolle betreffen und sollen hier nicht weiter ausgeführt werden. Andere, größere Erweiterungen betreffen die Erfassung zusätzlicher physikalischer Effekte. Diese sollen im Folgenden näher erläutert werden

Im Teil Verallgemeinerung der Implementierung wurde das Modell so erweitert, dass die Implementierung des Modells von der Topologie des Datensatzes unabhängig ist. Im bisherigen Ansatz wurde für eine vollständig gefüllte Zone eine Analyse der bestehenden Verbindungen durchgeführt, um dann die Massenströme dieser Verbindungen zu koppeln, um ein „Überlaufen“ der gefüllten Zone zu verhindern. Mit einer größeren Anzahl von Verbindungen wird diese Analyse immer komplexer und kann kaum noch allgemeingültig formuliert werden. Hinzu kommt, dass zum Beispiel die Strömungsrichtung vom thermo-hydraulischen Zustand in den verbundenen Nachbarzonen abhängt, der sich zeitlich verändern kann. Als neuer Ansatz wird ein Analogon zur Natur verwendet. In der realen Physik übernimmt der Druck in der gefüllten Zone die Steuerung der Massenströme. Entsprechend wird nun für vollständig gefüllte Zonen eine Gleichung für den Druck gelöst. Die Änderung des Drucks in der Gleichung ist dabei an die Summe der Massenströme in die Zone gekoppelt. Strömt zum Beispiel mehr Wasser herein ein als heraus, steigt der Druck, wodurch der Massenstrom in die Zone sinkt. Mit diesem Ansatz regelt sich das System von selbst, die Details der Topologie müssen nicht mehr betrachtet werden.

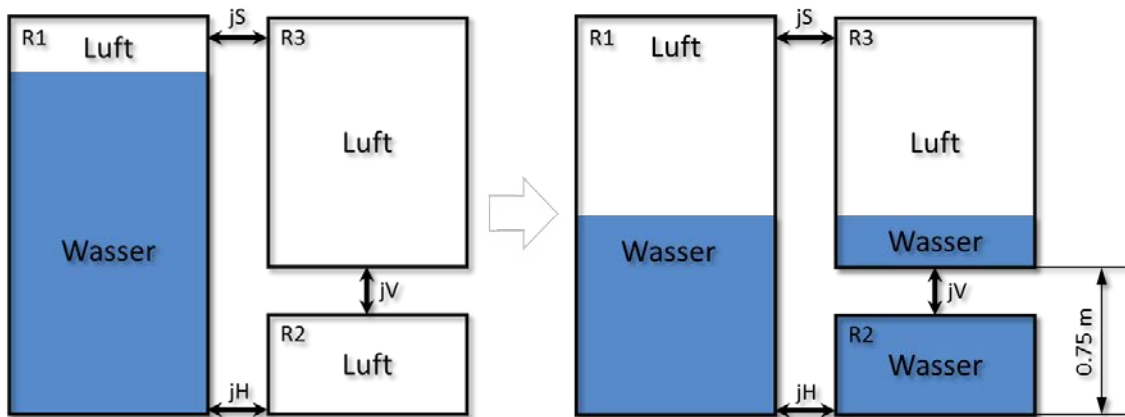
Das Wiedererzeugen der Gasphase ist ein wichtiger Punkt bei der allgemeinen Anwendbarkeit des Modells für das Zonenfluten. In der früheren Implementierung ist mit dem Zustand „vollständig gefüllt“ in einer Zone ein Zustand erreicht worden, den die Zone nicht mehr verlassen konnte, auch wenn der thermo-hydraulischen Zustand in den verbundenen Nachbarzonen ein Abfließen des Wassers erlauben würde. Die neue Implementierung wurde in verschiedenen Teilschritten vorgenommen. Einer war zum Beispiel das Zulassen einer Gasströmung in eine wasser-enthaltende Zone mit getauchter Verbindungsöffnung. Im Abschnitt Wiedererzeugung der Gasphase wird die Lauffähigkeit und Plausibilität anhand eines etwas komplexeren Datensatzes gezeigt.

### **3.1.2 Erzielte Ergebnisse**

#### **Verallgemeinerung der Implementierung**

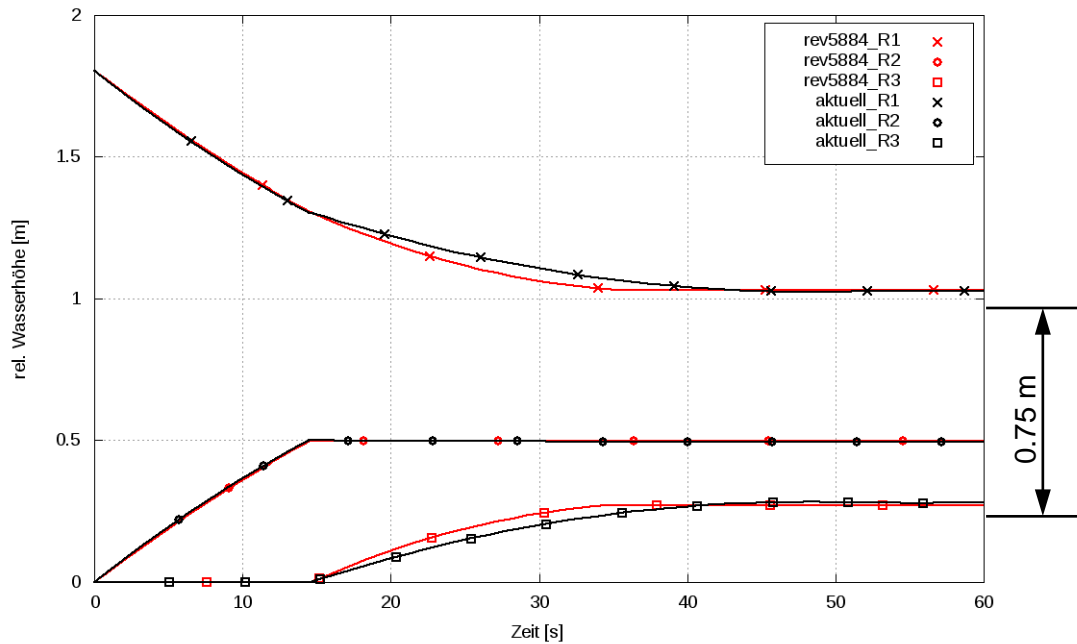
Basierend auf einem Datensatz des Vorhabens RS1508 ist ein angepasster Datensatz erstellt worden, mit dem sich die Implementierung der Druckgleichung überprüfen lässt. Wie in Abb. 3.1 dargestellt, besteht der Fall aus drei Zonen von denen nur R1 am Anfang Wasser enthält. Alle Zonen sind durch Verbindungen des neuen Typs ATM\_FULLL verbunden, der den Transport von Wasser und Gas erlaubt. Die Verbindung jS befindet sich immer über dem Wasserspiegel und sorgt für einen Ausgleich des Gasdrucks in den

Zonen R1 und R3, so dass das Wasser über  $j_H$  und im weiteren zeitlichen Verlauf auch über  $j_V$  ungehindert fließen kann. Am Ende der Rechnung wird ein Gleichgewichtszustand mit ausgeglichenen Wasserpegeln in R1 und R3 erreicht.



**Abb. 3.1** Topologie des generischen Datensatzes für die Implementierung der Druckgleichung mit Anfangs- und Endzustand

Durch die Verwendung der Druckgleichung wird kein genereller Unterschied im Verlauf der Wasserpegel im Vergleich mit der vorherigen Umsetzung erwartet. Und in der Tat sind die in Abb. 3.2 verglichenen Kurvenverläufe der beiden Varianten einander sehr ähnlich. Der einzige wesentliche Unterschied ist der etwas langsamere Anstieg des Pegels des Raums R3 nach dem vollständigen Füllen von R2. Dieser ist jedoch physikalisch sinnvoll. In der vorherigen Implementierung wird mit Erreichen der vollständigen Flutung von R2 der Massenstrom von  $j_V$  – in diesem Fall identisch gleich – an  $j_H$  gekoppelt. Damit liegt sofort ein endlich großer Massenstrom vor. Bei der Verwendung der Druckgleichung startet der Wassermassenstrom durch  $j_V$  bei null und muss sich – durch den steigenden Druck in R2 bedingt – erst erhöhen. Hinzu kommt, dass vorher nur der Reibungswiderstand durch die Verbindung  $j_H$  berücksichtigt wird. In der aktuellen Variante wird nun implizit auch der Widerstand von  $j_V$  berücksichtigt. Der Massenstrom nach R3 fällt dadurch geringer aus. Beide Effekte zusammen erklären den langsameren Anstieg des Wasserpegels in R3.



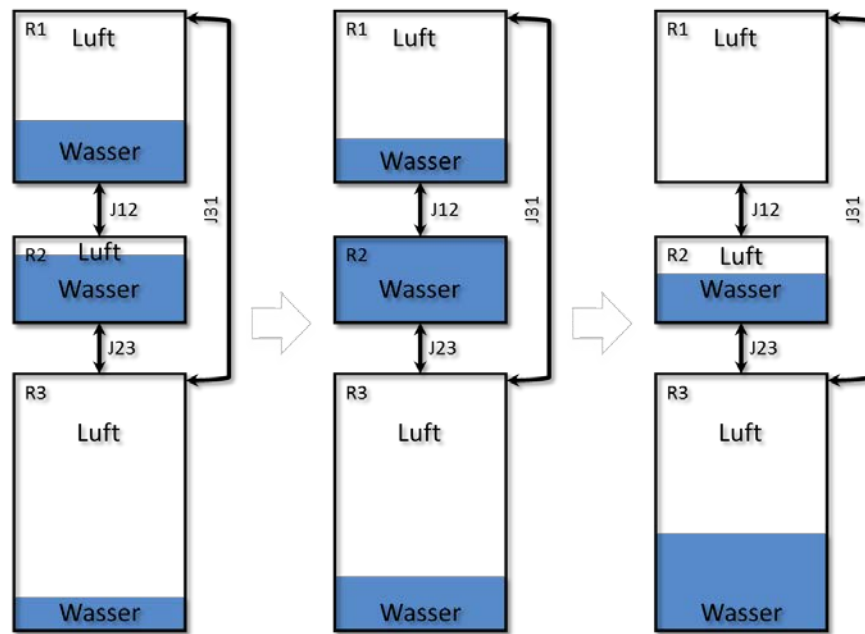
**Abb. 3.2** Zeitlicher Verlauf des Wasserstandes; in Rot: Stand RS 1508 (V3.0 rev. 5884), in Schwarz: aktueller Entwicklungsstand

### Wiedererzeugung der Gasphase

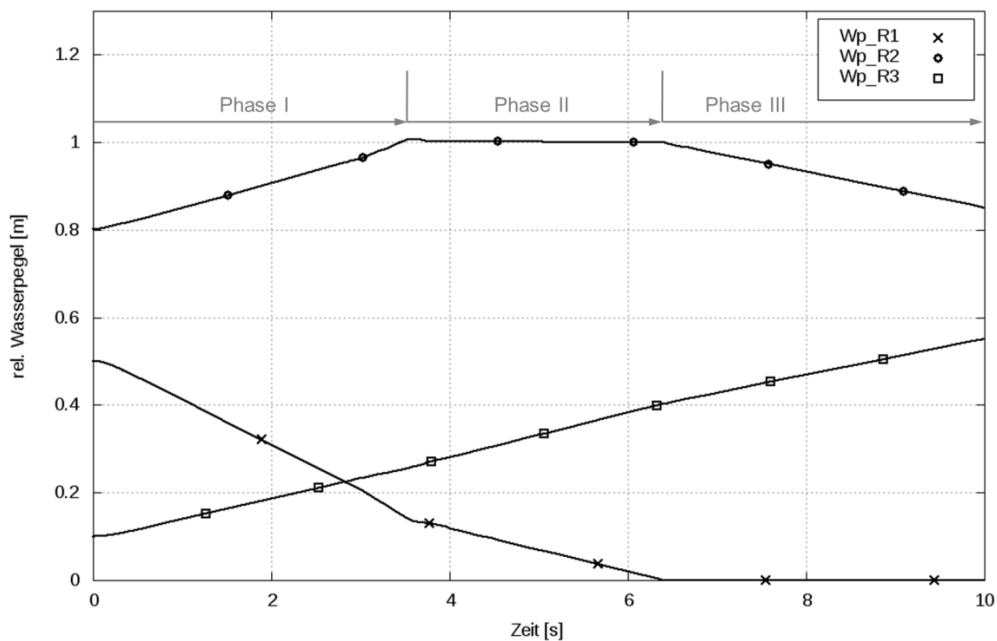
In dem Datensatz, mit dem das Wiedererzeugen einer Gasphase simuliert werden soll, wurden wiederum drei Zonen (R1, R2, R3) verwendet. Die Topologie des Datensatzes ist in Abb. 3.3 dargestellt. Alle Zonen enthalten anfänglich eine gewisse Wassermenge und Luft. Die Gasdrücke sind in allen drei Zonen identisch. Die Zonen sind durch Verbindungen des Typs ATM\_FULL verbunden, die den Transport von Wasser und Gas erlaubt. Die Verbindung J31 dient wiederum zum Druckausgleich zwischen den Räumen R1 und R3. Die Querschnittsfläche der Verbindung J12 ist viermal größer als die Fläche von J23. Das Wasser kann dadurch schneller von der Zone R1 nach R2 fließen, als es von der Zone R2 nach R3 fließt. Darum kommt es zu einem Zwischenzustand in dem die Zone R2 vollständig gefüllt ist.

Die drei Phasen der Rechnung sind in Abb. 3.3 skizziert. In der ersten Phase befindet sich noch Luft in der Zone R2. Während das Wasser aus R1 nach R2 fließt, strömt die Luft aus R2 nach R1. Durch die Verbindung J12 fließen also gleichzeitig Wasser und Gas. In der zweiten Phase ist in R2 keine Gasphase mehr vorhanden. Die Zone ist vollständig mit Wasser gefüllt, und es wird die Druckgleichung gelöst. Mit der vollständigen Entleerung der Wasserphase in R1 beginnt die mit der jetzigen Implementierung möglich gewordene dritte Phase. Wegen des Druckausgleichs über die Verbindung J31 sind die

Gasdrücke in den Zonen R1 und R3 stets annähernd gleich. Durch den hydrostatischen Druck der Wassersäule in R2 fließt das Wasser weiterhin über J23 ab. Der Druck des Wassers in R2 sinkt dadurch über die implementierte Druckgleichung, und Luft wird über J12 angesaugt. Nun wird eine neue Gasphase in R2 erzeugt, und das Wasser fließt weiter ab.



**Abb. 3.3** Topologie des generischen Datensatzes für das Wiedererzeugen der Gasphase in R2 mit Anfangs-, Zwischen- und Endzustand



**Abb. 3.4** Zeitlicher Verlauf der Wasserpegel im aktuellen Entwicklungsstand

### **3.1.3 Offene Punkte**

In bestimmten Anwendungsfällen kommt der Modellierung einer Temperaturschichtung in der Wasserphase eine besondere Bedeutung zu. Bei COCOSYS-Rechnungen zum Unfall in Fukushima Daiichi wurde festgestellt, dass die sich ausbildende heiße, obere Wasserschicht einen starken Einfluss auf die Dampfkondensation und damit den Druck in der Kondensationskammer hat. Mit den bisher vorgenommenen Erweiterungen an COCOSYS ließe sich dieses Phänomen anhand vertikal geschichteter Zonen abbilden. Dazu müssen jedoch die vom Dichteunterschied abhängigen Konvektionsmassenströme für vertikale Verbindungen im neuen Verbindungstyp ATM\_FULL berechnet werden und die Gleichungsparameter angepasst werden.

## **3.2 Einbindung des 3D-Poolmodells CoPool**

### **3.2.1 Ergänzung der Modellierung**

Für eine realistische Simulation thermohydraulischer Zustände in Anlagenräumen, in denen ein tiefer Wasserpool gegenwärtig ist, ist die Erfassung des Bewegungszustands des Pools und der Temperaturverteilung in diesem von großer Bedeutung. Die Temperatur an der Wasseroberfläche nimmt z. B. großen Einfluss auf Phasenübergänge und chemische Reaktionen und die Wassergeschwindigkeit an der Oberfläche auf die Stoffübergänge. Dies ist z. B. für den Sumpf in einem DWR relevant. Beim Fraunhofer Institut ITWM in Kaiserslautern wird das Rechenprogramm CoPool zur vereinfachten dreidimensionalen Berechnung der Strömungs- und Temperaturverteilung in Wasservorlagen entwickelt /GOR 14/. In Zusammenarbeit mit der GRS erfolgte im Rahmen des Vorhabens RS1508 die Anbindung von CoPool an COCOSYS /SPE 14b/. Folgende Ergänzungen und Korrekturen zur Anbindung von CoPool an COCOSYS sind in diesem Vorhaben vorgenommen worden:

- Implementierung des „Restarts“.

Für die Durchführung von Anlagenrechnungen ist es notwendig, dass Rechnungen des Programmsystems COCOSYS in Kopplung zu CoPool zu speziellen, vordefinierten Zeitpunkten wiederaufgenommen werden können („Restart“). Dazu wurden entsprechende Arbeiten durchgeführt und die Kopplung entsprechend ertüchtigt. Die Restartzeitpunkte, zu denen CoPool Daten abspeichert, werden von COCOSYS aus gesteuert. Über sogenannte Restartnummern kann im Nachhinein eine Rechnung

zum gewünschten Zeitpunkt fortgesetzt werden. Ebenso kann ein Restart von Rechnungen mit mehreren parallelen CoPool-Programmen durchgeführt werden. Die Restart-Funktionalität wurde anhand des bereits in RS1508 verwendeten Zwei-Pool-Beispiels getestet. Dabei wurden verschiedene Kopplungsvarianten in Bezug auf die Zeitschrittsteuerung verwendet. Für die Nutzung der Restart-Fähigkeit von COCOSYS-CoPool gilt die Einschränkung, dass in CoPool selbst und in Bezug auf die Kopplung zwischen CoPool und COCOSYS keine Änderungen der Eingabedaten (z. B. zusätzliche Schnittstellen wie externe Verbindungen) möglich sind.

– Spezielle Modifikationen an der Kopplung.

Für die Integration in die neue AFP-Struktur sind spezielle Modifikationen durchgeführt worden, insbesondere für die Behandlung des Sumpfvolumens (aufgrund der Annahme einer konstanten Wasserdichte zur Darstellung des Wasservolumens in CoPool) und zum Eintrag von auf Strukturen abgelagerten Aerosolen ins Wasservolumen („Abwaschen“). So berücksichtigen die angepassten Schnittstellen nun konsequent die in CoPool verwendete konstante Wasserdichte. Weitere Ergänzungen der Kopplung betrafen das Fluten von Zonen, den Energie- und Impulsübertrag durch Dampfeinspeisung (z. B. über Kondensationsrohre), den Wassereintrag über Sprühsysteme sowie die Wärmeeinspeisung. Ebenso ist es nun möglich, einfache Drainageverbindungen zwischen verschiedenen CoPool-Sümpfen zu definieren. Ferner ist die Kopplung für die Anbindung eines Gebäudekondensator-Modells erweitert worden.

– Systematische Überprüfung der Kopplung.

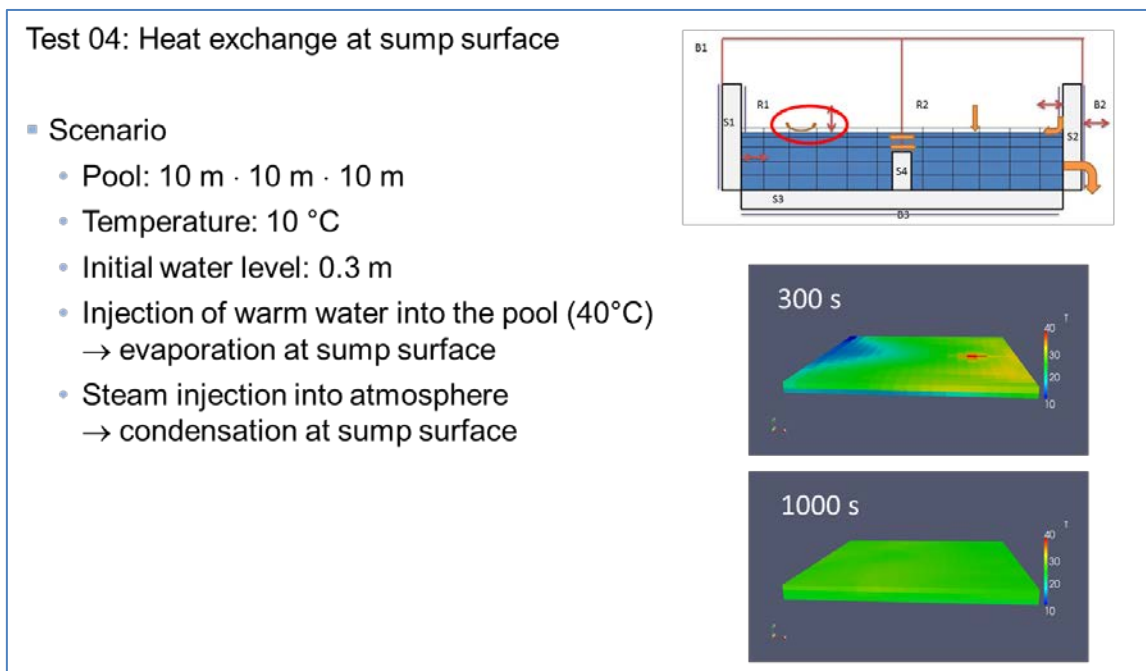
Die Kopplung zwischen COCOSYS und CoPool ist anhand einfacher Testbeispiele systematisch überprüft und der für eine SWR-72-Anlage bereits existierende Datensatz erweitert worden. Sieben systematische Tests untersuchten die Ergebnisse des gekoppelten Codes auf Plausibilität hinsichtlich der Vorgänge (1) beim Wärmeübergang zwischen Atmosphäre und Wand oberhalb des Wassers, (2) bei der Wassereinspeisung in den Pool, (3) beim Wärmeübergang unterhalb der Wasseroberfläche, (4) beim Wärmeaustausch an der Wasseroberfläche, (5) bei der Dampfeinspeisung über Kondensationsrohre, (6) bei der Kondensation und bei der Verwendung von Drainageverbindungen und von (7) Pump- und Sprühsystemen. Aufgrund von Verbesserungen in der Numerik von CoPool ergeben die berechneten mittleren Temperaturen von gekoppelten Rechnungen mit COCOSYS-CoPool und von Stand-alone-Rechnungen mit COCOSYS jetzt gute Übereinstimmungen. Bei der Simulation von Kondensationsrohren in SWR zeigt sich, dass der Impulsaustausch zwar korrigiert wurde (korrekte Berücksichtigung des Dampfolumens), allerdings erscheint



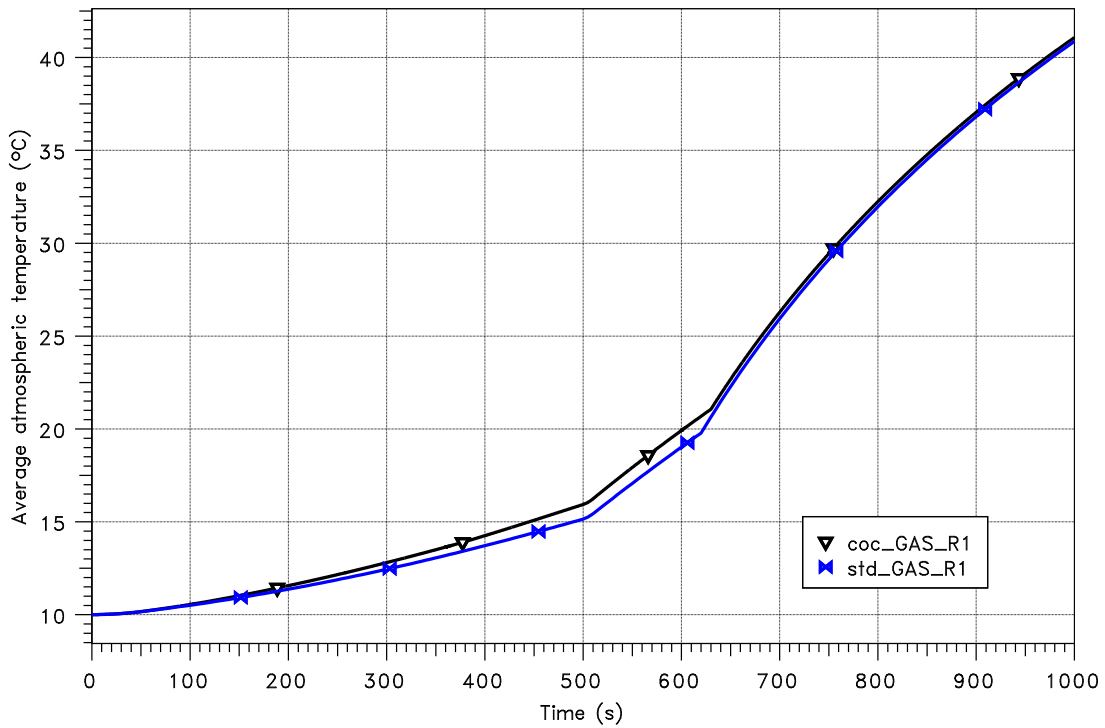
die Vermischung des Sumpfes immer noch zu gering. Die Kopplung sollte ferner in Bezug auf den Einfluss einer Drainage entlang einer Wandoberfläche verbessert werden.

### 3.2.2 Testbeispiele

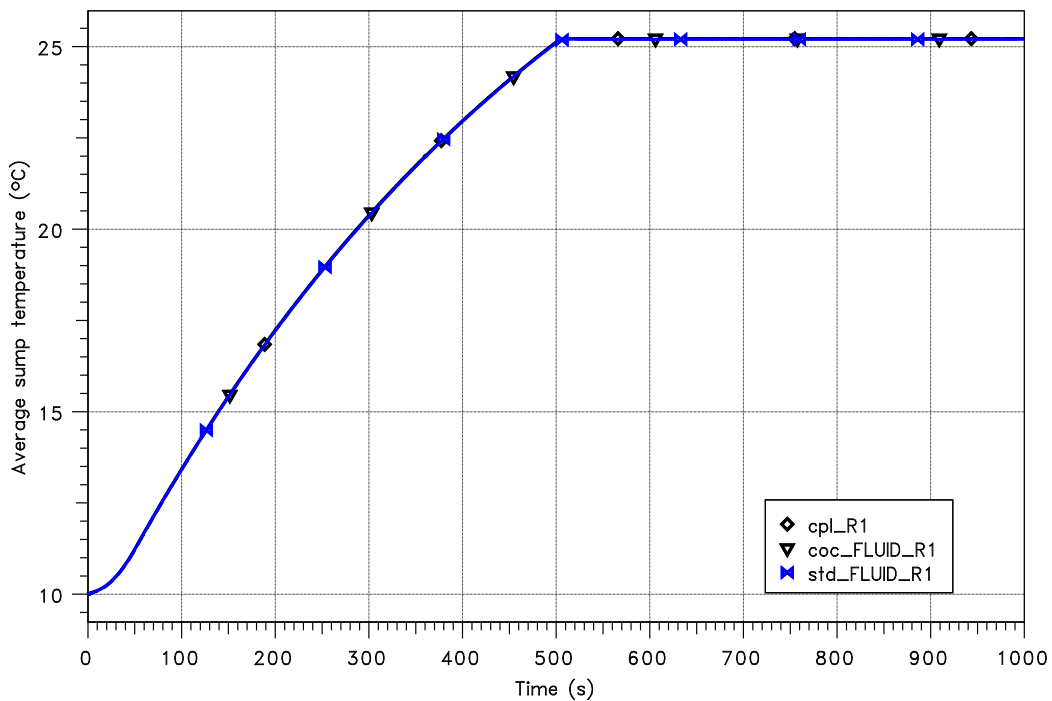
Beispielhaft seien hier die Ergebnisse des Tests (4) zum Wärmeaustausch an der Sumpfoberfläche und zum Test (7) Pump- und Sprühsysteme wiedergegeben. In Test (4) wurde ein kubischer Behälter der Größe  $10\text{ m} \times 10\text{ m} \times 10\text{ m}$  betrachtet, in welchem der anfängliche Wasserstand  $0,3\text{ m}$  beträgt und das Wasser eine Anfangstemperatur von  $10\text{ °C}$  hat (Abb. 3.5). An einer Seite wurde nun warmes Wasser ( $40\text{ °C}$ ) eingespeist, was zur Verdunstung an der Sumpfoberfläche führt. Danach wurde Dampf in die Atmosphäre eingespeist, was die Kondensation von Wasserdampf an der Sumpfoberfläche zur Konsequenz hat. Abb. 3.6 – Abb. 3.9 zeigen Ergebnisse des Vergleichs.



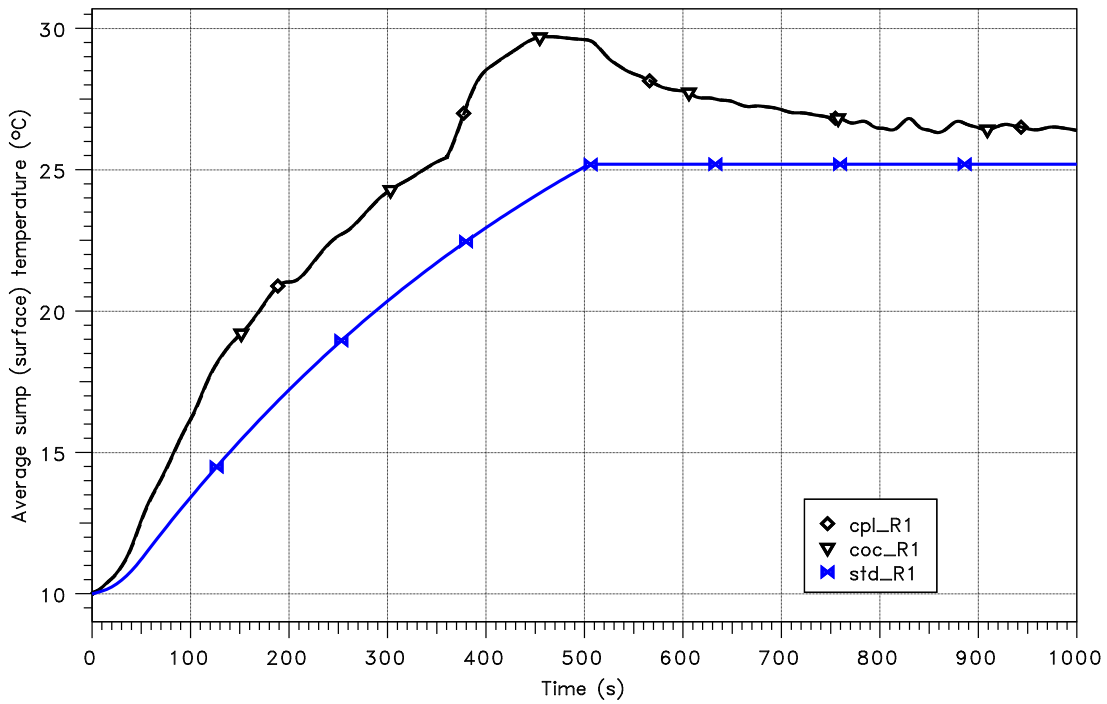
**Abb. 3.5** Beschreibung des Szenarios der CoPool-Simulation



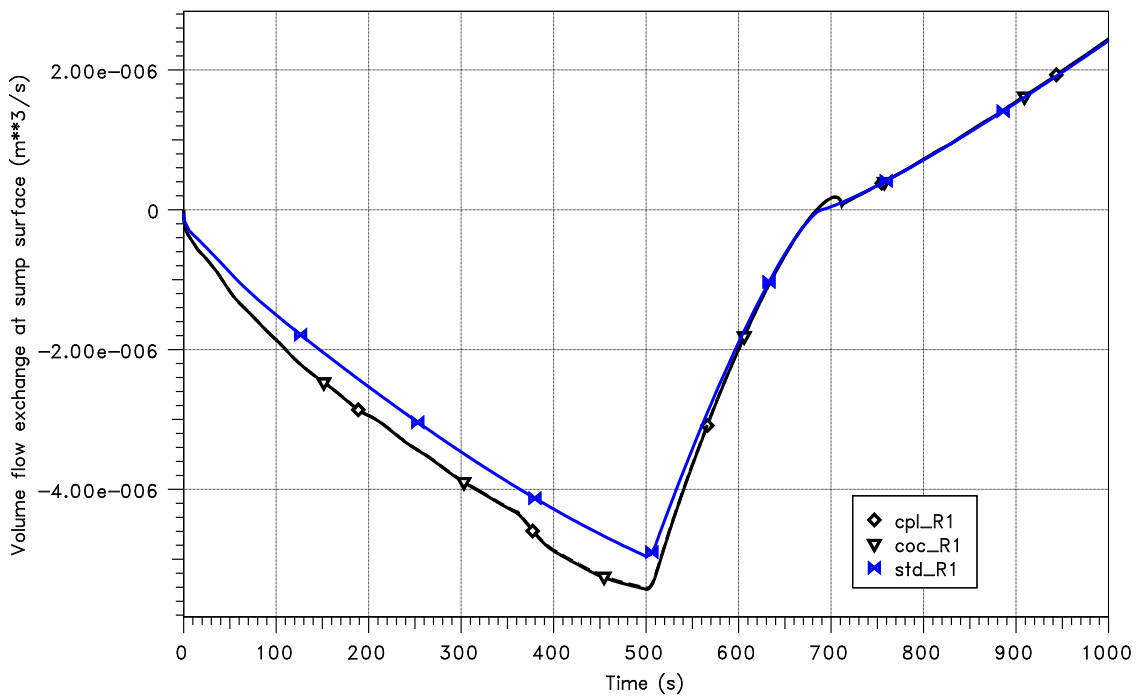
**Abb. 3.6** Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere atmosphärische Temperatur über dem Wasserpool



**Abb. 3.7** Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere Temperatur des Wasser-pools



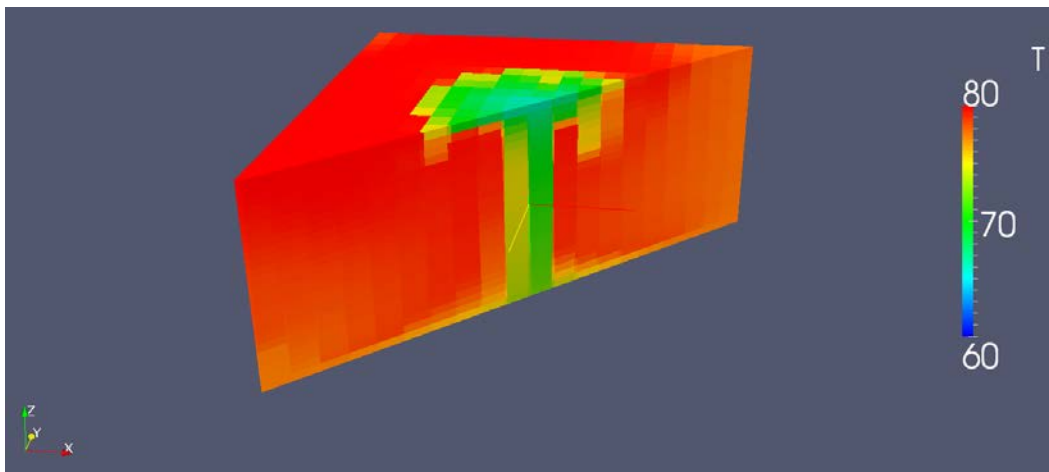
**Abb. 3.8** Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere Oberflächentemperatur des Wasserpools



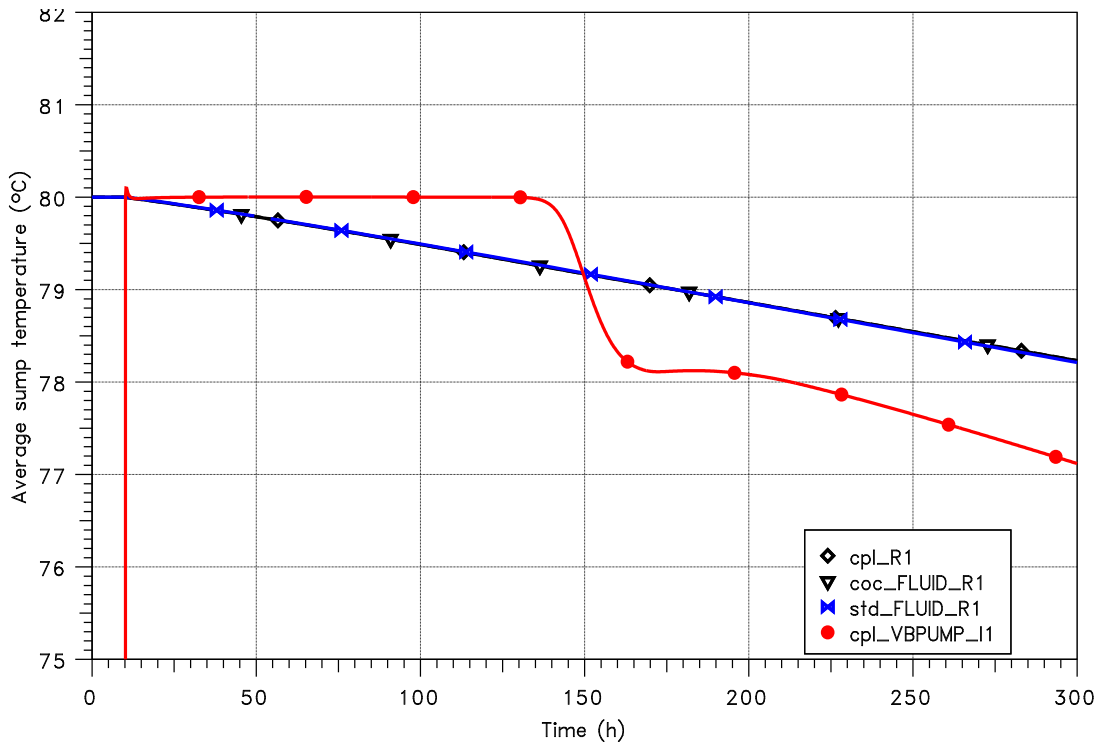
**Abb. 3.9** Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die Volumenkondensationsrate

In Test (7) wurde oberhalb einer halb vollen Poolzone R1 mit den Ausmaßen  $10 \times 10 \times 10 \text{ m}^3$  eine gleichgroße Domzone angehängt. Die Entnahme des Pumpmassestroms erfolgt bei  $(x, y, z) = (1 \text{ m}, 1 \text{ m}, 1 \text{ m})$ . Der Sprühkegel beginnt in der Domzone und endet dann mittig auf der Wasseroberfläche von R1. Alle Zonen starten mit  $80 \text{ °C}$  Anfangstemperatur, die Außenwände sind isoliert.

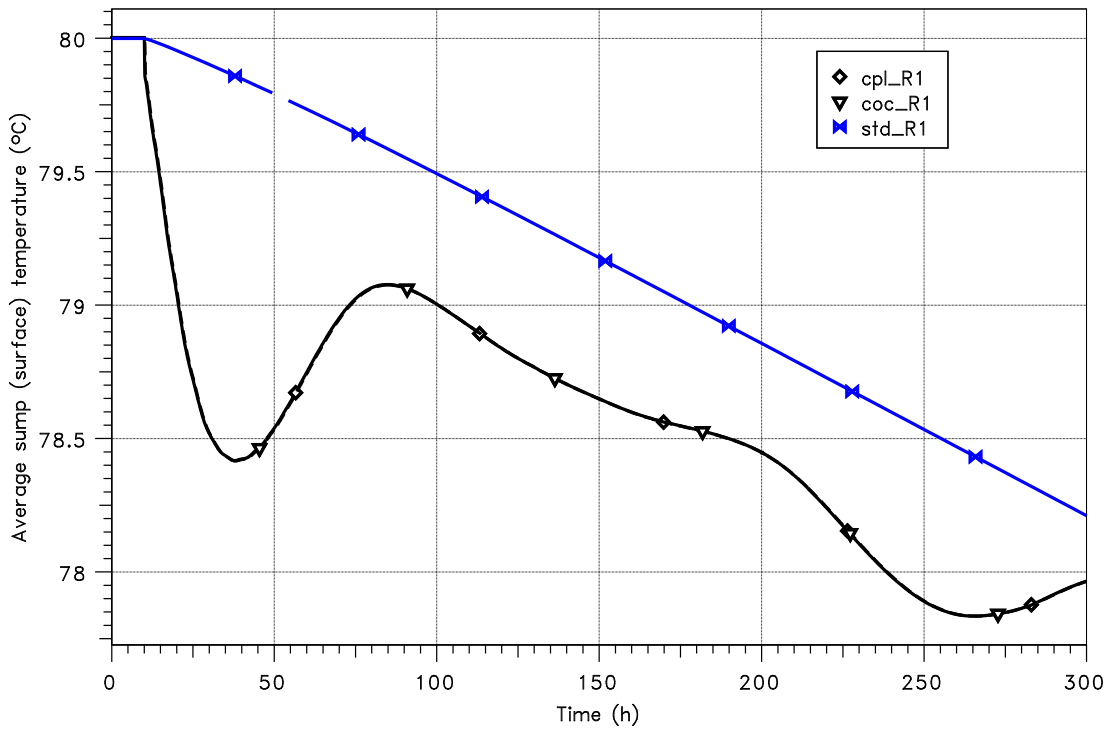
Abb. 3.10 zeigt einen diagonalen Schnitt der Temperaturverteilung im Pool bei 300 s. Das kältere Sprühwasser sinkt direkt zum Boden. Die mittleren Pooltemperaturen in gekoppelter und Stand-alone-Rechnung verlaufen gleich (Abb. 3.11). Die rote Kurve zeigt die Temperatur am Einlass der Pumpe. Zu Beginn verharrt die Temperatur bei  $80 \text{ °C}$  und ist somit höher als die mittlere Temperatur. Sobald das kalte Wasser den Poolboden erreicht, sinkt die Einlasstemperatur rapide ab und ist im Folgenden unterhalb der mittleren Pooltemperatur. Abb. 3.12 zeigt den Vergleich der berechneten mittleren Sumpfoberflächentemperaturen. Erwartungsgemäß liegt die von CoPool berechnete Sumpfoberflächentemperatur unterhalb der mittleren Pooltemperatur. Die anfängliche Temperaturschwankung ist dadurch bedingt, dass es eine Zeit dauert, bis das kalte Wasser in tiefere Bereiche absinkt und die Zirkulation in Gang kommt. Die Atmosphärentemperaturen sind in beiden Rechnungen praktisch gleich, Abb. 3.13.



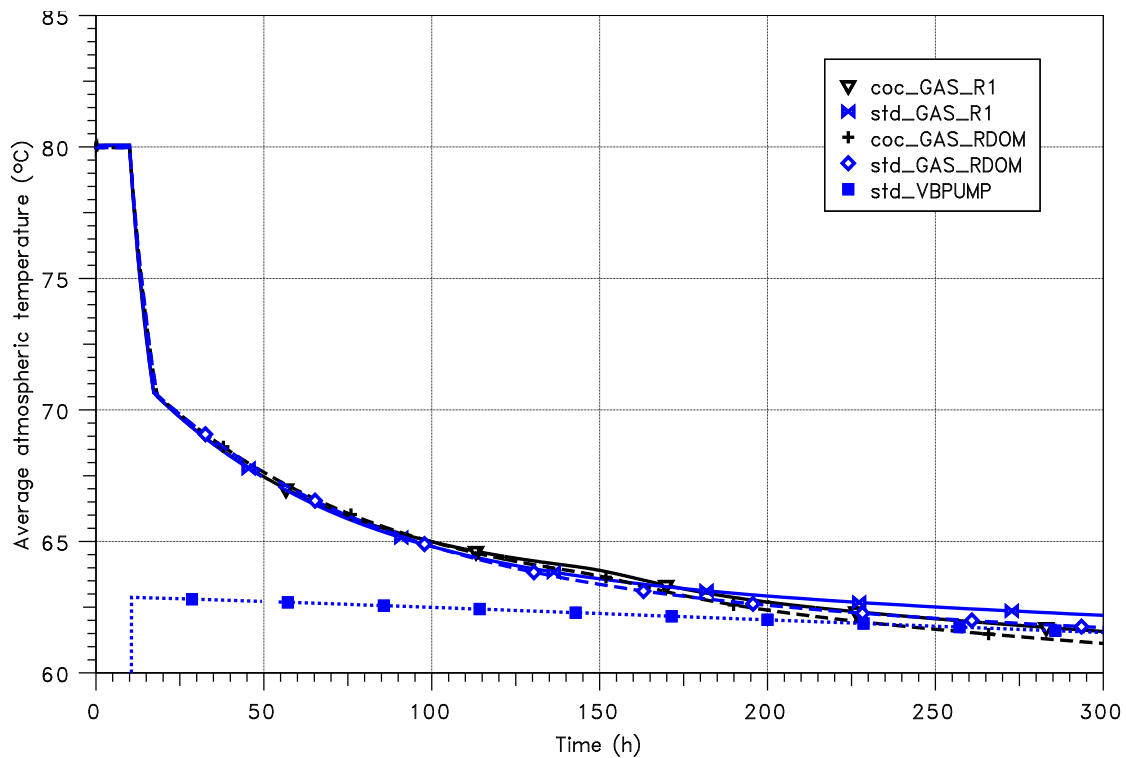
**Abb. 3.10** CoPool - diagonaler Schnitt, Temperaturverteilung im Pool bei 300 s, Co-Pool Test 07



**Abb. 3.11** Vergleich der mittleren Pooltemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung; Pumpeinlasstemperatur (rote Kurve), Co-Pool Test 07



**Abb. 3.12** Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung, CoPool Test 07



**Abb. 3.13** Vergleich der Atmosphärentemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung, CoPool Test 07

### 3.2.3 Fazit

Die systematischen Tests zeigten insgesamt zufriedenstellende Ergebnisse. Alle Ergebnisse sind in /KLE 17b/ ausführlich dargestellt. Die numerischen Lösungsverfahren in CoPool erweisen sich als stark verbessert im Vergleich zu früheren Versionen, die bereits in der Anbindung an COCOSYS untersucht worden waren. Auf dieser Basis können die im Validierungsvorhaben RS1544 geplanten Anwendungsrechnungen zur DWR-Anlage (vgl. /KLE 16/) und zum SWR-72 wieder aufgenommen werden. Die Ergebnisse von diesen Anwendungsrechnungen werden im Bericht zu RS1544 dokumentiert.

### 3.3 Verbesserung des Flammenfront-Modells in COCOSYS

Zum Flammenfrontmodell sollten Fortschritte auf den folgenden zwei Themenfeldern erzielt werden:

- Ertüchtigung der Flammenfrontmodells für die Flammenausbreitung über Gas-/Wasserverbindungen
- Verbesserung von Zündkriterien (inkl. CO-Effekt) mit Blick auf Anlagenrechnungen

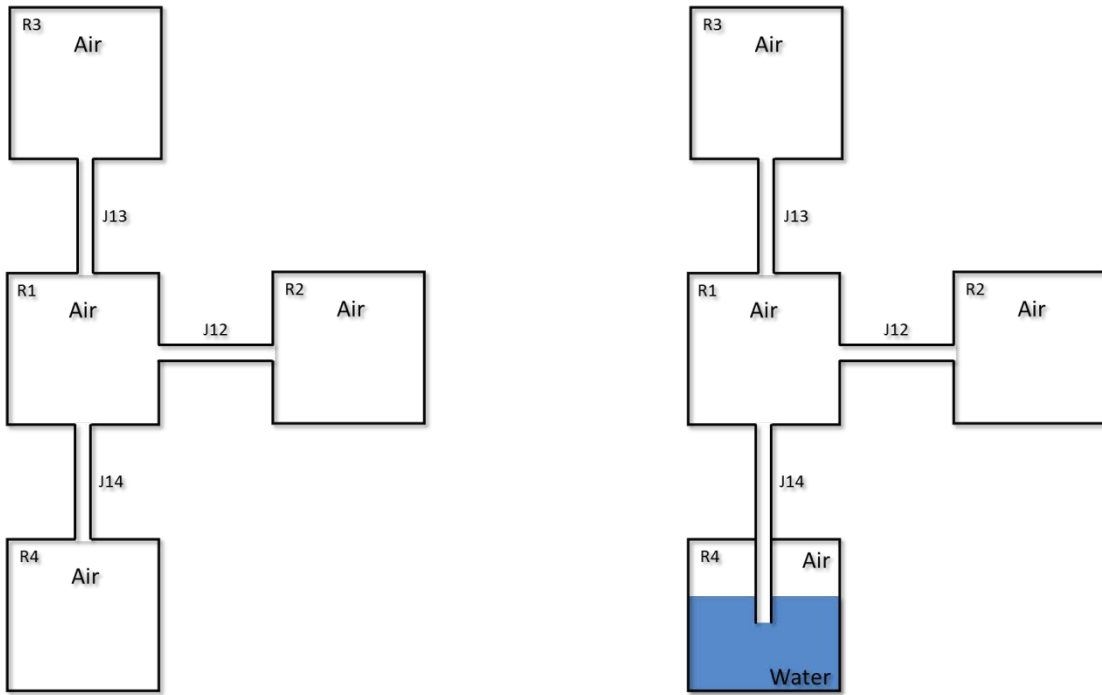
Während der Bearbeitung des Vorhabens hat sich in der Auswertung von Rückflüssen aus der Anwendung, insbesondere aus dem OECD-BSAF-Vorhaben, die Notwendigkeit zu (nicht geplanten) Verbesserungen an dem Modell des Zonenflutens gezeigt. Gleichzeitig ist der benötigte Arbeitsaufwand zur Korrektur von in Anlagenrechnungen identifizierten Problemen mit dem Modell des Zonenflutens gestiegen. Im Kontext der Arbeiten zum Zonenfluten (siehe Abschnitt 3.1) ist daher zunächst der Themenpunkt zum Flammenfront-Modell bearbeitet worden (Abschnitt 3.3.1), der einen engen Bezug zum Zonenfluten aufweist. Verbesserungen in der Simulationstechnik bei der Berücksichtigung von Zündkriterien sollen im Zusammenhang mit der Aktualisierung von Kriterien zu schnellen Wasserstoffverbrennungen bearbeitet werden, s. Abschnitt 3.3.2.

### **3.3.1 Ertüchtigung des Flammenfront-Modells für Gas/Wasser-Verbindungen**

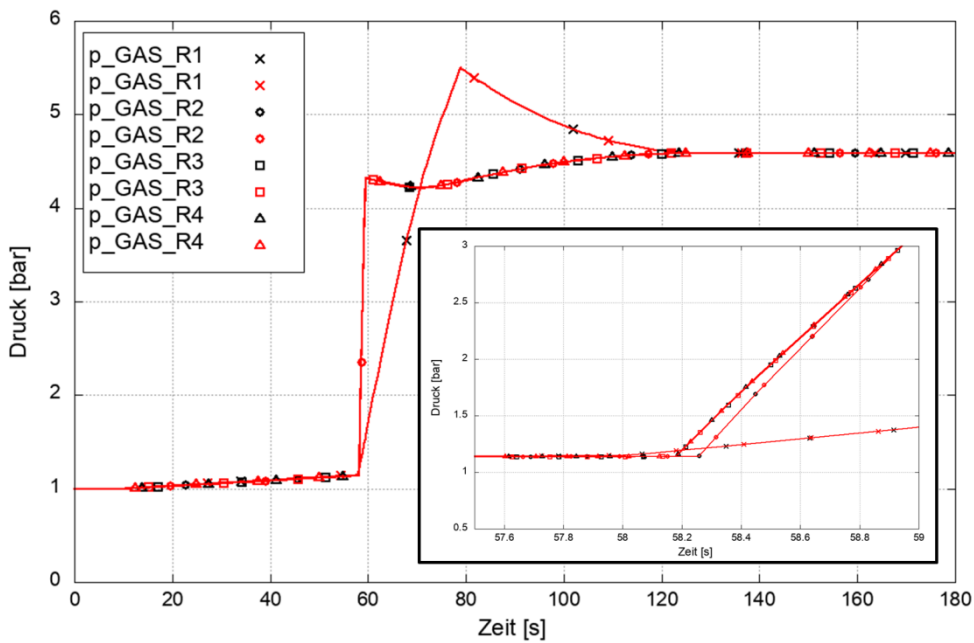
In der bisherigen Form unterstützt das Flammenfront-Modell FRONT alle möglichen Verbindungstypen in COCOSYS. Die verschiedenen Typen werden jedoch aufgrund ihrer unterschiedlichen, physikalischen Eigenschaften vom Flammenfront-Modell unterschiedlich behandelt. Um das Flammenfront-Modell auch für die neu eingeführten kombinierten Gas/Wasser-Verbindungen (ATM\_FULL, vergleiche Abschnitt 3.1) anwenden zu können, ist das Modell im Thermohydraulikmodul erweitert worden.

Dazu wurde zu Testzwecken ein COCOSYS-Datensatz erstellt, der die in Abb. 3.14 (links) skizzierten vier Räume R1 bis R4 enthält, die durch die drei Verbindungen J12 bis J14 verbunden sind. Das Flammenfront-Modell unterscheidet generell zwischen aufwärts, abwärts und horizontal gerichteten Flammfronten. Die drei Verbindungen bilden also alle möglichen Ausbreitungsrichtungen ab.

Die Räume sind anfänglich mit Luft bei Normalbedingungen gefüllt und haben jeweils ein Volumen von  $1000 \text{ m}^3$ . Die Verbindungen sind jeweils 10 m lang und haben einen Durchmesser von 0,1 m. Als Verbindungstyp wird einmal der im Flammenfront-Modell bereits verfügbare Typ ATMOS\_JUN verwendet und einmal der neue Verbindungstyp ATM\_FULL. Um brennbare Zustände in den einzelnen Räumen zu schaffen, wird im Zeitbereich von 10 bis 61 s insgesamt 42 kg Wasserstoff eingespeist. Davon gehen 31 % in dem Raum R1, und jeweils 23 % in die anderen drei Räume. Als Zündkriterium wurde eine Wasserstoffkonzentration von 11 % verwendet.



**Abb. 3.14** Skizzen der zum Testen verwendeten Nodalisierungen; links: einfache atmosphärische oder kombinierte Gas/Wasser-Verbindungen, rechts: eingetauchte Gas/Wasser-Verbindung



**Abb. 3.15** Vergleich der Rechnung mit einfachen atmosphärischen (schwarze Symbole) und kombinierten Gas/Wasser-Verbindungen (rot) anhand des Drucks



Die beiden Verbindungstypen „atmosphärische Verbindung“ und „kombinierte Gas/Wasser-Verbindung“ verwenden intern die gleichen Rechenschritte für die Berechnung der Gasströmung durch die Verbindung. Bei korrekter Implementierung des Flammenfront-Modells für die kombinierte Gas/Wasser-Verbindung sollten identische Ergebnisse zu der Rechnung mit atmosphärischer Verbindung erhalten werden. Zur Überprüfung und Veranschaulichung der Vorgänge zeigt Abb. 3.15 den zeitlichen Verlauf des Drucks in allen Räumen, jeweils in schwarz für die Rechnung mit atmosphärischen Verbindungen, und in rot für die Rechnung mit Gas/Wasser-Verbindungen. In die Gesamtansicht der Ergebnisse ist eine weitere Darstellung eingebettet, die den Zeitbereich, in dem die Verbrennung in den Verbindungen stattfindet, detailliert zeigt.

In der ersten Phase der Rechnung sieht man einen leichten Druckanstieg in allen Räumen, der durch die Einspeisung des Wasserstoffs erzeugt wird. Bei einer Zeit von 58 s wird das Zündkriterium im Raum R1 erreicht, und die Verbrennung beginnt. Gleichzeitig wird die Verbrennung in den Verbindungen gestartet. Wie man in der Detailansicht erkennt, werden die weiteren Räume zu unterschiedlichen Zeiten entzündet. Das liegt daran, dass die Flammenfront je nach Verbindungsrichtung mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten durch die Verbindung läuft, und daher das jeweilige Verbindungsende zu unterschiedlichen Zeiten erreicht wird. Die Verbrennungsraten in den entzündeten Zonen hängen vom Turbulenzgrad in der Verbindung ab. Da in der hier betrachteten Konfiguration turbulente Flammenfronten entstehen, laufen die Verbrennungen in den Räumen R2 bis R4 wesentlich schneller ab als im Raum R1. Nach einer Zeit von etwa 80 s ist auch diese langsamste Verbrennung beendet, und der generelle Druckverlauf zeigt den Druckausgleich zwischen den Räumen.

Die Druckverläufe zeigen eine exakte Übereinstimmung. Auch alle weiteren das Flammenfront-Modell betreffenden Größen wie Flammenfrontgeschwindigkeit in den Verbindungen oder Brennraten in den Räumen stimmen exakt überein.

Weitere Arbeiten betrafen die Umsetzung von spezifischen Eigenschaften des neuen kombinierten Verbindungstyps. So ist es zum Beispiel möglich, dass ein Verbindungsende unter Wasser liegt, wie in Abb. 3.14 (rechts) skizziert. Würde jetzt eine Flammenfront vom Raum R1 nach R4 laufen, träfe sie in R4 auf Wasser. Dieser Fall wurde in der Implementierung berücksichtigt. Die Flammenfront würde in der Verbindung J14 enden, und den Raum R4 nicht entzünden.

### **3.3.2 Verbesserung von Zündkriterien und Kriterien zu schnellen Wasserstoffverbrennungen / Detonationen**

Aufgrund von ungeplantem Mehraufwand bei der Lösung von vorrangigen Fragestellungen, insbesondere den Kopplungsarbeiten zwischen ATHLET-CD und COCOSYS für durchgehende Simulationen eines Kernschmelzunfalls mit Freisetzung von Schmelze aus dem Primärkreis, sowie der Ertüchtigung des Zonenflutens für Anlagenrechnungen, konnten die Arbeiten zur Verbesserung von Zündkriterien und kritischen Bedingungen für Wasserstoffverbrennungen nicht wie geplant in vollem Umfang durchgeführt werden. Erste Ansätze für die Umsetzung der Kriterien wurden erarbeitet. Die Kriterien werden im Nachfolgevorhaben in den Code eingepflegt.



## **4 Modellentwicklung zum Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten**

### **4.1 Ausgestaltung der Schnittstelle zwischen Primärkreis und Containment im Hinblick auf RDB-Versagen und Austrag von Schmelze**

#### **4.1.1 Schmelzeeintrag in die Reaktorgrube**

In bisherigen Simulationen der Beton-Schmelze-Wechselwirkung mit dem CCI-Modul von COCOSYS war es notwendig, den Anfangszustand, d. h. Masse, Zusammensetzung und Temperatur der Schmelze im Eingabedatensatz des CCI-Moduls zu spezifizieren. Nach Weiterentwicklungen am Primärkreismodul ATHLET-CD v3.1A sind nun die Voraussetzungen dafür gegeben, den Eintrag von Schmelze in die Reaktorgrube bei Versagen des Reaktordruckbehälters in einer gekoppelten Rechnung zwischen ATHLET-CD und COCOSYS direkt zu berücksichtigen.

In diesem Vorhaben sind entsprechende Erweiterungen am CCI-Modul vorgenommen worden, die es erlauben, die aus dem Primärkreis austretende Schmelze in das CCI-Modul zu übernehmen.

#### **Grundzüge der Implementation und benötigte Eingabedaten**

Das Primärkreismodul ATHLET-CD verwendet das Untermodul AIDA, welches das Verhalten von Schmelze im unteren Plenum des Reaktordruckbehälters simuliert und Versagensmodelle für die Wand des Reaktordruckbehälters enthält. Stellt ATHLET-CD das Versagen des RDB fest, wird der Schmelzestrom durch die entstehende Öffnung über die Differenz der Drücke innerhalb und außerhalb des RDB berechnet, und die ausgetragene Masse bilanziert. Der Datenaustausch zwischen ATHLET-CD und COCOSYS ist nun so erweitert worden, dass die ausgetragene Masse sowie Zustandsgrößen der Schmelze wie Temperatur, assoziierte Nachzerfallsleistung und Isotopenspektrum an COCOSYS übertragen wird. Die vom Anwender im Eingabedatensatz zusätzlich vorzunehmenden Eingaben sind dabei so gering wie möglich gehalten worden.

Für jeden zu berechnenden Schmelze-Pool wird im Eingabedatensatz eine Startbedingung, eingeleitet durch das Kontrollwort `SEQ_STA`, angegeben (siehe auch Abschnitt 4.4.1). Soll der Schmelze-Pool `POOL1` bei Versagen des RDB aus ATHLET-CD gespeist werden, genügt die Angabe des Schlüsselworts `ATH`.

```

C---- CAVITY
@
P---- Pool1
@
----- SEQ_STA
@      START
      ATH

```

Zusätzlich müssen unter dem Schlüsselwort `EXTMELT` weitere Parameter angegeben werden. Der Parameter `ORIGINAL` unter `MODE` weist das CCI-Modul an, die Zusammensetzung des Schmelzestroms aus dem ATHLET-CD-Modul unverändert zu lassen, während unter `SCALE` ein Skalierungsfaktor festgelegt wird. Letzterer ist in der Regel nur bei generischen Testfällen von Interesse. Der Parameter `ACCUMASS` gibt eine minimale Masse der Schmelze in Kilogramm an, bei deren Erreichen die Simulation des CCI-Moduls startet. Er dient der numerischen Stabilisierung des CCI-Moduls. Bis zum Erreichen dieser Masse wird die Masse ohne CCI-Simulation akkumuliert.

```

C---- CAVITY
...
K---- EXTMELT
@      MODE      [ACCUMASS      [SCALE]]
      ORIGINAL [      500.      [1.000]]

```

ATHLET-CD erlaubt einfache Tests des AIDA-Untermoduls ohne Berücksichtigung der Thermohydraulik und des Kerninventars im Primärkreis. Alle benötigten Größen, die ansonsten der Simulation entnommen werden, müssen im Eingabedatensatz spezifiziert werden (u. a. Masse der Schmelze im unteren Plenum, Nachzerfallsleistung, initiale Temperatur der Schmelze). Die Schmelze ist hier vollkommen generisch, d. h. eine Zusammensetzung aus chemischen Elementen muss nicht spezifiziert werden.

```

C---- CAVITY
...
K---- EXTMELT
@      MODE      ACCUMASS      SCALE
      REPLACE      80000.      1.0
@      MATERIAL FRACTIONS
      O2U          0.49
      Zr           0.18
      O2Zr         0.12
      Cr           0.04
      Fe           0.15
      Ni           0.02

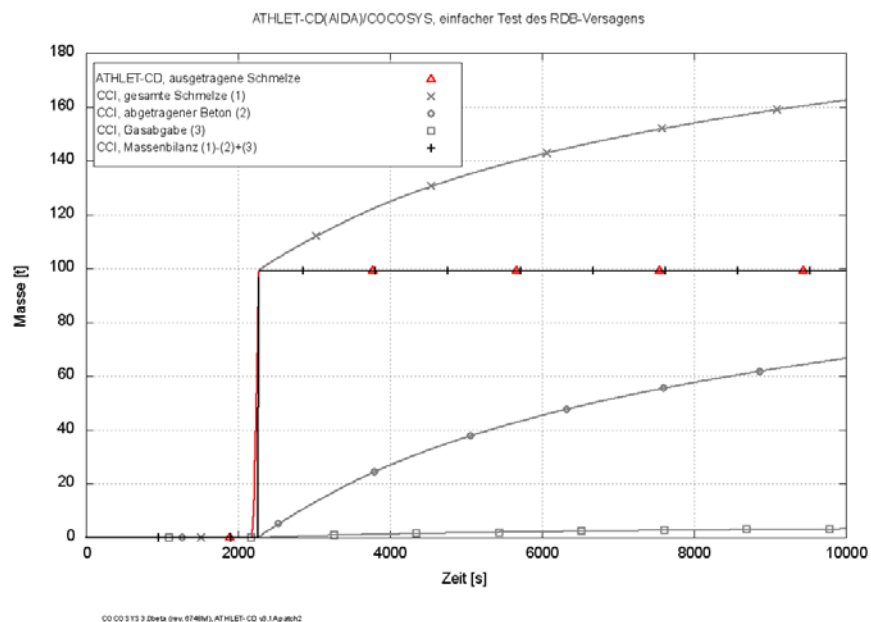
```

Um dennoch für diese Testverwendung eine sinnvolle Berechnung der Beton-Schmelze-Wechselwirkung durchführen zu können, muss die generische Schmelze aus ATHLET-CD im CCI-Modul modifiziert werden. Durch Angabe des Parameters `REPLACE` unter

MODE wird die Gesamtmasse durch die darunter angegebenen chemischen Elemente und Verbindungen anteilig zusammengesetzt.

### Beispielrechnung

Auf Basis eines solchen vereinfachten Datensatzes sind gekoppelte ATHLET-CD/COCOSYS-Rechnungen durchgeführt worden, um die Erweiterungen in der Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS zu validieren. Ergebnisse einer solchen Rechnung sind in Abb. 4.1 dargestellt. Bei etwa 2 200 s sagt ATHLET-CD das Versagen des RDB voraus und beginnt mit dem Austrag der Schmelze. Diese wird an das CCI-Modul übertragen, und die eigentliche Simulation der Beton-Schmelze-Wechselwirkung wird aktiviert.



**Abb. 4.1** Beispielrechnung zur CCI-Sequenz mit ATHLET-CD: Gegenüberstellung der von ATHLET-CD ausgetragenen Schmelzemasse und den im CCI-Modul berechneten Massen

Der gesamte Schmelzepool (1) im CCI-Modul setzt sich aus der Schmelze des Reaktorkerns und aus dem vom Beton abgetragenen Material (2) zusammen. Um zu prüfen, ob die an das CCI-Modul übertragene Masse korrekt ist, muss ferner noch berücksichtigt werden, dass dem Schmelzepool Masse in Form von Gas verloren geht. Damit kann man nun im CCI-Modul auf die übertragene Schmelzemasse zurückrechnen. Wie erforderlich liegt die in Abb. 4.1 „CCI, Massenbilanz“ genannte Kurve fast exakt auf der Kurve,

die die ausgetragene Masse aus dem ATHLET-CD-Modul zeigt. Die kurze Zeitverzögerung zwischen CCI- und ATHLET-CD-Modul am Anfang des Schmelzeaustrags hat zwei Gründe. Zum einen rechnen die beiden Module mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten. Zum anderen beginnt die Rechnung des CCI-Moduls leicht verzögert, da erst begonnen wird, wenn die unter ACCUMASS angegebenen 80 000 kg Schmelze aus ATHLET-CD übertragen wurden.

#### 4.1.2 Freisetzung von Spaltprodukten

##### Grundzüge der Implementation und benötigte Eingabedaten

Für die Freisetzung von Spaltprodukten in Form von Isotopen aus der Schmelze sind keine weiteren Eingabedaten notwendig. Die Implementierung der Kopplung von ATHLET-CD und COCOSYS erkennt automatisch, ob die Berechnung von Isotopen in ATHLET-CD aktiviert ist. Falls ein Isotopenspektrum in der Schmelze zur Verfügung steht, wird dies automatisch an COCOSYS übertragen und vom CCI-Modul verwendet.

##### Beispielhafte Anwendung

Prinzipiell ist es möglich, dass ATHLET-CD und das CCI-Modul verschiedene chemische Elementlisten führen. Beim Übertrag der Schmelze von ATHLET-CD an das CCI-Modul bekommt der Anwender daher zunächst eine detaillierte Gegenüberstellung der von ATHLET-CD geführten und der im CCI-Modul geführten Elemente in der Schmelze.

```

CCI VS EXTERNAL ISOTOPES

UNMATCHED FRACTIONS:      2.036E-03 (ISOTOPES: HE-4 HE-6 LI-7 BE-9 ...

MATCHING ATOM FRACTIONS:
CCI: C          6.036E-06   EXTERNAL ISOTOPE:  C-12   C-14
CCI: O          118.707E-03 EXTERNAL ISOTOPE:  O-16
CCI: Al         42.806E-15  EXTERNAL ISOTOPE:  AL-27
CCI: Ca         9.938E-06   EXTERNAL ISOTOPE:  CA-40
CCI: Mg         12.547E-12  EXTERNAL ISOTOPE:  MG-24
CCI: U          868.451E-03 EXTERNAL ISOTOPE:  U-234   U-235   U-...
CCI: Zr         1.114E-03  EXTERNAL ISOTOPE:  ZR-90   ZR-91   ZR...
CCI: Si         6.012E-06   EXTERNAL ISOTOPE:  SI-28
CCI: Cr         59.804E-12  EXTERNAL ISOTOPE:  CR-52
CCI: Ni         3.506E-06   EXTERNAL ISOTOPE:  NI-58   NI-63   NI-74
CCI: Fe         15.035E-06  EXTERNAL ISOTOPE:  FE-55   FE-56   FE-59
CCI: H          241.550E-09 EXTERNAL ISOTOPE:  H-1     H-3
SUM:            988.312E-03

MATCHING FP FRACTIONS:
CCI: Ag         10.910E-06   EXTERNAL ISOTOPE:  AG-107  AG-108M
CCI: B          431.296E-09 EXTERNAL ISOTOPE:  B-11
CCI: Ba         408.605E-06 EXTERNAL ISOTOPE:  BA-135  BA-136
CCI: Cd         12.962E-06  EXTERNAL ISOTOPE:  CD-111  CD-112
CCI: Ce         910.660E-06 EXTERNAL ISOTOPE:  CE-140  CE-141

```

CCI: Cs	556.317E-06	EXTERNAL ISOTOPE: CS-133	CS-134
CCI: Eu	33.989E-06	EXTERNAL ISOTOPE: EU-151	EU-153
CCI: In	513.636E-09	EXTERNAL ISOTOPE: IN-115	IN-115M
CCI: La	357.803E-06	EXTERNAL ISOTOPE: LA-139	LA-140
CCI: Mo	892.266E-06	EXTERNAL ISOTOPE: MO-95	MO-96
CCI: Na	17.415E-18	EXTERNAL ISOTOPE: NA-23	
CCI: Nd	992.217E-06	EXTERNAL ISOTOPE: ND-142	ND-143
CCI: Np	149.943E-06	EXTERNAL ISOTOPE: NP-237	NP-238
CCI: Pr	304.707E-06	EXTERNAL ISOTOPE: PR-141	PR-142
CCI: Pu	3.657E-03	EXTERNAL ISOTOPE: PU-238	PU-239
CCI: Rb	111.526E-06	EXTERNAL ISOTOPE: RB-85	RB-86
CCI: Ru	631.517E-06	EXTERNAL ISOTOPE: RU-99	RU-101
CCI: Sb	4.366E-06	EXTERNAL ISOTOPE: SB-121	SB-122
CCI: Sn	12.186E-06	EXTERNAL ISOTOPE: SN-117	SN-118
CCI: Sr	323.368E-06	EXTERNAL ISOTOPE: SR-87	SR-88
CCI: Te	115.161E-06	EXTERNAL ISOTOPE: TE-125	TE-126
CCI: Y	164.898E-06	EXTERNAL ISOTOPE: Y-89	Y-90
CCI: Ti	20.667E-12	EXTERNAL ISOTOPE: TI-48	
CCI: K	1.064E-09	EXTERNAL ISOTOPE: K-39	
SUM:	9.651E-03		
SUM(ATOM+FP):	997.964E-03		

Der Anwender kann so leicht prüfen, ob alle für seine Rechnung wichtigen Spaltprodukte erfasst werden. Die Angaben der berücksichtigten Anteile von strukturellen Massen (ATOM) und derjenigen von rein als Spaltprodukt behandelten Massen (FP) erlauben es ferner, zwischen wesentlichen und möglicherweise unwichtigen Komponenten zu unterscheiden.

Die Berechnung der chemischen Vorgänge und der Wechselwirkung mit dem Beton erfolgt im CCI-Modul weiterhin auf Basis der chemischen Elemente, ohne besondere Berücksichtigung der Isotope. Bei der Freisetzung von Gasen und Aerosolen aus ATHLET-CD wird die Isotopenzusammensetzung aus dem vorhandenen Isotopenvektor in der Schmelze berechnet und an den COCOSYS-Haupttreiber und das nachgeschaltete Spaltproduktmodul AFP übertragen.

#### 4.1.3 Evaluierung strukturmechanischer Methoden

##### Grundzüge der Methoden und benötigte Eingabedaten

Das Primärkreismodul ATHLET-CD enthält das Untermodul AIDA, das für die Berechnung der Vorgänge im unteren Plenum verantwortlich ist. Neben der Modellierung der thermischen Vorgänge zwischen der Schmelze, der Kruste und der Wand des Reaktor-druckbehälters (RDB) wird auch das strukturmechanische Verhalten der RDB-Wand abgebildet. Hauptsächlich soll bei letzterem das Versagen der Wand bei auslegungsüberschreitenden thermischen und mechanischen Belastungen modelliert werden. Dazu



stehen in AIDA drei Methoden zur Bewertung der Strukturintegrität sowie ein Versagenskriterium zur Verfügung, die alle in verschiedenen vorausgegangenen Forschungsvorhaben implementiert worden waren. Diese unterscheiden sich hinsichtlich der abgebildeten, physikalischen Vorgänge, die zum Versagen des Behälters führen:

- ASTOR: Diese Methode ist grundsätzlich für Kriechversagen bei hohem Druck und mittlerer Temperatur konzipiert worden. Ein frühes Versagen durch Schmelzen oder duktilen Bruch wird nicht geprüft.
- Larson-Miller: Die Methode nach Larson-Miller ist grundsätzlich nur für Kriechversagen bei hohem Druck und mittlerer Temperatur konzipiert. Ein frühes Versagen durch Schmelzen oder duktilen Bruch wird nicht geprüft.
- ASTEC-Modell: Diese kombiniert eine Prüfung von Kriechversagen und duktilem Versagen.
- Schmelztemperatur: Diese Methode prüft ob die Schmelztemperatur in der Mitte der Behälterwand erreicht wird.

### **Beispielhafte Anwendung**

Die in ATHLET und ATHLET-CD verfügbaren Methoden zur Bewertung der Strukturintegrität wurden zunächst im Hinblick auf ihre Implementation und auf mögliche Verbesserungen eingehend untersucht. Die Ergebnisse sind ausführlich in einer technischen Notiz dokumentiert worden /BLA 17/.

Weiterhin wurden zur Bewertung der vorhandenen Methoden diese in Testrechnungen untersucht. Zu dieser Untersuchung wurde der bereits in Abschnitt 4.1.1 verwendete einfache Test verwendet. Wesentliche Parameter des RDB in Bezug auf die hier durchgeführte Auswertung sind der Innenradius = 2.0 m und die Wanddicke = 15 cm. Das untere Plenum wird als Anfangsbedingung mit 100 t Schmelze gefüllt, die eine Temperatur von 3000 K hat. Ein weiterer, wichtiger Parameter für das Versagen ist der Innendruck des RDB, da dieser die auf die Wand wirkenden mechanischen Spannungen und den Versagensmodus (duktiler Bruch, Abschmelzen, Kriechversagen) bestimmt. Abhängig vom angenommenen Unfallverlauf kann es zur Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum bei hohem oder niedrigem Druck im Primärkreis kommen. Entsprechend wurden Rechnungen bei Innendrücken von 160 bar und 10 bar durchgeführt, um die Grenzfälle abzudecken.

**Tab. 4.1** Versagenszeiten in Minuten nach gewähltem strukturmechanischem Modell oder Versagenskriterium

RDB-Druck [bar]	ASTOR	Lars.-Mill.	ASTEC	Temp.
160	36	40	37	49
10	(186)	(168)	43 <sup>1</sup>	49

Die von den Methoden bestimmten Versagenszeiten sind in Tab. 4.1 aufgeführt. Im Hochdruckfall liefern die ASTOR- und ASTEC-Methoden sehr ähnliche Versagenszeiten, die Larson-Miller-Methode ein etwas späteres Versagen. Prinzipiell liegen diese unter der Zeit des Erreichens der Schmelztemperatur. Im Fall niedrigen Drucks werden die ASTOR- und die Larson-Miller-Methode eigentlich außerhalb ihres Gültigkeitsbereichs betrieben und liefern entsprechend auch unphysikalische Versagenszeiten, die oberhalb des Erreichens der Schmelztemperatur liegen. Wegen der geringeren Lasten durch den geringeren Druck liefert die ASTEC-Methode im Vergleich zum Hochdruckfall ein späteres Versagen.

In der ausführlichen technischen Notiz /BLA 17/ sind nach Abgleich der implementierten Modelle mit dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik detaillierte Vorschläge zur Verbesserung der Methoden zusammengestellt worden und mögliche Fehlerquellen aufgezeigt worden. Kritikpunkte sind vor allem in Inkonsistenzen in den verwendeten Materialdaten sowie in der Dokumentation der Methoden für die Anwender, in der Hinweise zu Gültigkeitsbereichen fehlen, zu sehen. Wie man auch in der Anwendung der Methoden erkennt, führt die Anwendung außerhalb des Gültigkeitsbereichs zu stark verzögertem Versagen. Mit der Prüfung auf duktiles Versagen oder auf Erreichen der Schmelztemperatur, die immer erfolgen sollte, könnten konservative Versagenszeiten ermittelt werden, die gegen unzureichende Methodenauswahl absichern.

#### **4.2 Anbindung von Modellen für Vorgänge nach Schmelzeaustrag in die mit Wasser gefüllte Reaktorgrube**

Im Falle eines Eintrags von Schmelze in einen mit Wasser gefluteten Raum müssen zahlreiche Phänomene bei der Analyse des Unfallablaufs betrachtet werden, die in

---

<sup>1</sup> In der zu Beginn der Untersuchung vorliegenden Version von AIDA konnte mit der ASTEC-Methode kein Versagen des RDB erreicht werden. Ursache waren kleinere Fehler. Diese wurden behoben.

COCOSYS bislang nicht simuliert werden können. Dazu zählen unter anderem die mögliche Fragmentierung der Schmelze beim strahlförmigen Eindringen der Schmelze ins Wasser, die zu einer Schüttbettkonfiguration von Schmelzepartikeln führen kann, sowie ggf. die daran anschließende Umströmung des porösen Schüttbettes bzw. das Wiederaufschmelzen dieses bei nicht ausreichender Kühlung mit Übergang zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Das mögliche Auftreten von Dampfexplosionen wird hier zunächst ausgeklammert.

Im Rahmen des vom BMWi geförderten Vorhabens 1501482 wird am Institut für Kernphysik und Energiesysteme (IKE) in Stuttgart das Rechenprogramm COCOMO-3D durch Integration der Modelle JEMI (für die Fragmentierung der Schmelze/Schüttbettbildung bei Eintrag der Schmelze in eine Wasservorlage) und MEWA (für die Kühlung eines wasserumströmten, porösen Schüttbettes mit Zweiphasenströmung) entwickelt /BUC 16/. Dieses Rechenprogramm kommt aufgrund seines hohen Anspruchs in der Modellbildung, seines sehr guten Validierungsstandes und seiner guten internationalen Akzeptanz für eine weitergehende Untersuchung im Hinblick auf eine Modellbildung für COCOSYS in erster Linie in Betracht.

Mit der Zielsetzung, die Modellkette der GRS zu dieser Thematik mittelfristig zu schließen, wurde im Rahmen dieses Vorhabens eigene grundlegende Expertise zu den involvierten Themen aufgebaut und sich mit den Modellen in COCOMO-3D vertraut gemacht.

#### **4.2.1 Mögliche Szenarien und Bewertung des Modellstandes**

##### **4.2.1.1 Mögliche Szenarien für den Eintrag von Kernschmelze in Wasser**

In existierenden Anlagen der Generation II und III kann das Phänomen relevant werden, wenn die Reaktorgrube vor Versagen des RDB mit Wasser geflutet wurde. In vielen Accident-Management-Konzepten von existierenden Anlagen (z. B. in Deutschland oder auch Frankreich) ist die Flutung der Reaktorgrube vor RDB-Versagen explizit nicht vorgesehen. In hypothetischen Kernschmelzszenarien für deutsche DWR wurde daher bislang vorwiegend eine „trockene“ Reaktorgrube zum Zeitpunkt des RDB-Versagens unterstellt. Sofern eine Flutung der Grube vor RDB-Versagen möglich ist, könnten in den meisten existierenden DWR Pooltiefen von etwa 1 – 2 m unter dem RDB erreicht werden. Für einige vorwiegend in Nord-Europa (z. B. Schweden) gebaute SWR sehen die Accident-Management-Konzepte dagegen eine Präsenz von tiefen Wasserpools (~ 7...10 m) unter dem RDB vor. In neueren DWR-Reaktorkonzepten der Generation III+

(z. B. beim AP1000) wird die RDB-Außenkühlung mit einer vorgehenden Flutung des Reaktorsumpfes bis über die Hauptkühlmittelleitungen als Maßnahme zur Beherrschung eines Unfalls einbezogen.

Ein tiefer Wasserpool begünstigt die Fragmentierung von Schmelze bei Austrag aus dem RDB. Dagegen kann ein großer Durchmesser des Schmelzestrahls während des Austrags ungünstig auf die Fragmentierung wirken. Das Phänomen der Fragmentierung hängt daher stark mit den Bedingungen in RDB und Reaktorgrube zum Zeitpunkt des RDB-Versagens bzw. mit dem Versagensmodus selbst zusammen.

Ein maximal ungünstiges Szenario für die Kühlbarkeit würde beispielsweise von einem großen Schmelzepool in der unteren RDB-Kalotte ausgehen, der nahezu den kompletten Reaktorkern beinhaltet, in Verbindung mit einem einzigen, großen Leck, das innerhalb sehr kurzer Zeit entsteht, aus welchem der komplette Pool ausströmt. Folgt man der Argumentation in /SHE 12/, so müsste für einen Schmelzeverlagerungsprozess vom RDB in die Reaktorgrube kein solches, maximal ungünstiges Szenario in Betracht gezogen werden. Diese Argumentation leitet sich aus folgenden Gesichtspunkten ab:

- In leistungsstarken DWR wird mit fortlaufender Kernzerstörung zwar eine substantielle Poolbildung von Schmelze im unteren Bereich des RDB erwartet, aber das Aufschmelzen des RDB im Bereich des Schmelzepools ist eher an der Seitenwand wahrscheinlich, wo die höchsten Wärmestromdichten bei natürlicher Konvektion der Schmelze innerhalb des Pool entstehen. Bei abgesenktem Druck im Primärkreis steht für eine erste Verlagerung von Schmelze in die Reaktorgrube daher nicht die gesamte Schmelze des Pools zur Verfügung und treibende Kraft ist nur das Gewicht der oberhalb des Lecks anstehenden Schmelze, die sich während des Austrags verringert. Maximale Austräge von Schmelze im Sinne von Masse und Massenstrom sind daher nicht wahrscheinlich. Die Wahrscheinlichkeit von großen Schmelzeaussträgen in die Reaktorgrube kann durch druckabsenkende Maßnahmen erfolgreich verringert werden.
- In SWR werden als Schwachstellen für ein mögliches Versagen des RDB die Anschlussstutzen der Steuerstabführungsrohrdurchführungen betrachtet. Da diese zahlreich sind, ist eine mehr oder weniger simultane Leckbildung an mehreren Stellen wahrscheinlich, sodass sich das Ausströmen von Schmelze auf mehrere kleine Ausströmungen aufteilt. Falls sich aber am Boden des RDB eine genügend dicke Kruste stabil ausgebildet haben sollte und diese ein Versagen an den Durchführungen der Steuerstabführungsrohre verhindert, kann ebenfalls ein seitliches Versagen

des RDB im oberen Poolbereich – wie beim DWR – als wahrscheinlich angenommen werden. Auch in diesem Fall werden daher keine maximalen Schmelzergüsse aus dem RDB in die Reaktorgrube erwartet.

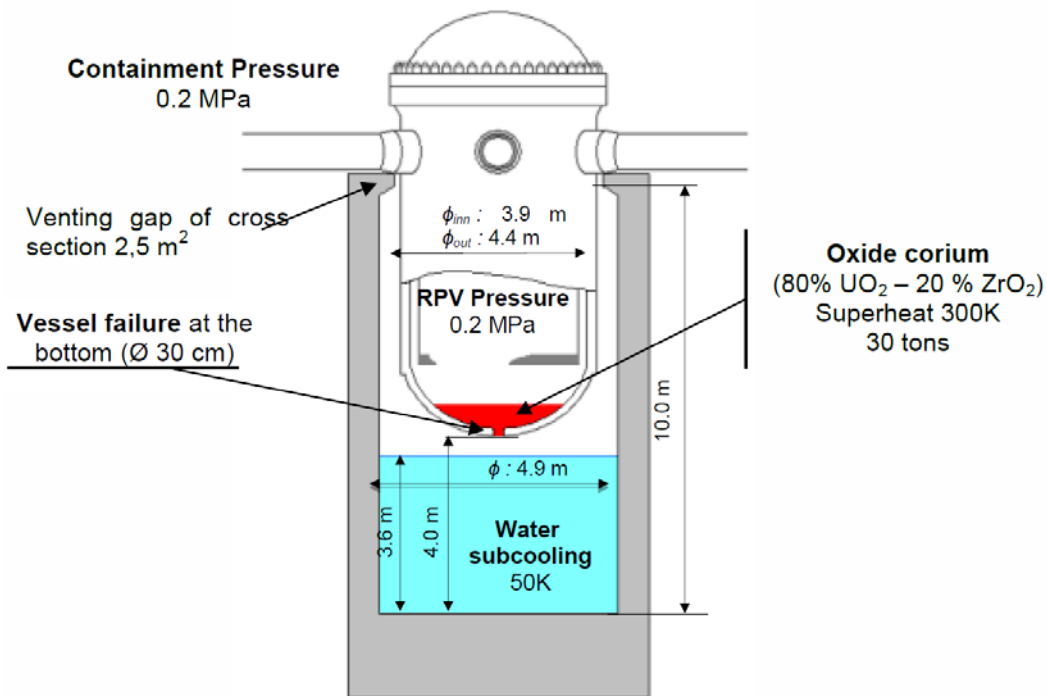
In /SHE 12/ gibt es die Aussage, dass für den Durchmesser eines hypothetischen Schmelzestrahls weniger als 40 cm erwartet werden können. Diese Quantifizierung ist aber nicht nachvollziehbar bzw. nicht belegt.

#### **4.2.1.2 Reaktor-Szenario im OECD-SERENA2-Projekt**

Die analytische Arbeitsgruppe des OECD-SERENA2-Projektes hatte mögliche Auswirkungen von Schmelze-Wasser-Wechselwirkungen im Hinblick auf eine Dampfexplosion anhand zweier generischer Szenarien im Anlagenmaßstab ausgewertet, jeweils eins für einen DWR- und eins für einen SWR /PIL 14/. Die Szenarien wurden auf der Basis von konkreten Daten zusammengestellt, die von zweien am SERENA-Projekt mitwirkenden Organisationen (EDF für DWR; VTT für SWR) zu diesem Zweck zur Verfügung gestellt worden waren. Die Szenarien waren so ausgewählt worden, dass sie einerseits realistisch und andererseits generisch genug sind, um die wichtigsten Vorgänge bei dem Absturz von Schmelze in Wasser in einer Reaktoranlage untersuchen zu können, ohne zu spezifisch für ein bestimmtes Anlagendesign zu sein.

Das DWR-Szenario stellt für den hier behandelten Arbeitspunkt daher ein geeignetes Szenario dar, um sich mit den verfügbaren Modellen in COCOMO näher vertraut zu machen. Es ist gekennzeichnet durch folgende Parameter /PIL 14/, vgl. Abb. 4.2:

- 30 000 kg an voll-oxidierter Schmelze im Gewichtsverhältnis 80 %  $\text{UO}_2$  und 20 %  $\text{ZrO}_2$ .
- Anfangstemperatur der Schmelze: 300 K über Liquidus (2928 K).
- Strahldurchmesser (= Durchmesser RDB-Leck): 30 cm.
- Vollständiger Druckausgleich zwischen RDB und Containment; Containmentdruck: 0,2 MPa.
- Tiefe des Wasserpools: 3,6 m bei anfänglich 50 K Unterkühlung
- Durchmesser der Reaktorgrube: 4,9 m
- Freie Fallhöhe des Schmelzestrahls zwischen RDB und Wasserpool: 0,4 m.



**Abb. 4.2** Anfangs- und Randbedingungen für das DWR-Szenario (2D) im OECD-SERENA2-Projekt /PIL 14/

#### 4.2.1.3 Fragestellungen für die Modellierung in COCOSYS

Ein zukünftiges Modell in COCOSYS sollte zu folgenden Fragestellungen Aussagen in Abhängigkeit von den im konkreten Szenario gegebenen Anfangs- und Randbedingungen ermöglichen:

1. Ist beim Eintrag von Schmelze in einen Wasserpool mit einer hoch-energetischen Wechselwirkung (Dampfexplosion) zu rechnen? Diese Fragestellung soll – wie eingangs erwähnt – nicht im Rahmen dieses Vorhabens behandelt werden.
2. Wie ist das Schüttbett charakterisiert, das sich durch Fragmentation des Schmelzestrahls beim Absturz in die Wasservorlage bildet? Zur Charakterisierung zählen folgende Parameter: Geometrische Konfiguration des Schüttbettes (Höhe, Kegel- oder Zylinderform, ggf. Kegelwinkel, Partikelgrößenverteilung, Porosität, Homogenität bzw. Schichtungen von verschiedenen Materialien)
3. Kommt es bei der Schüttbettbildung zur Agglomeration und wenn ja, wie umfangreich erfolgt eine solche Agglomeration?
4. Ist das entstandene Schüttbett unter quasi-stationärer Betrachtungsweise kühlbar?

5. Sofern das gebildete Schüttbett quasi-stationär kühlbar ist, kommt es bei dem transienten Vordringen der Wasserfront nach Bildung des Schüttbettes bis hin zur vollständigen Benetzung der Partikel möglicherweise zu einem lokalen Wiederaufschmelzen der Partikel?
6. Die Spitze der Freisetzung von Wasserdampf beim ersten Kontakt der Schmelze mit Wasser sollte für die Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter berücksichtigt werden.
7. Für den Fall der Kühlbarkeit des Schüttbettes: Berücksichtigung der langzeitigen Quellen von Wärme und Spaltprodukten und deren Lokalisierung innerhalb der COCOSYS-Simulation eines Kernschmelzunfalls. Diese Zielsetzung entspricht in etwa der Zielsetzung eines Kernfängermodells für COCOSYS, mit dem Unterschied, dass beim Kernfängermodell die Konfiguration der Schmelze einem kompakten Schmelzesee entspricht.
8. Für den Fall, dass das Schüttbett nicht kühlbar ist: Überführung des Schüttbettes zum Schmelze-Beton-Wechselwirkungsmodell CCI. Ggf. muss eine endlich große Zeitspanne (Schüttbettphase) betrachtet werden, bevor CCI mit der Schmelzepoolsituation weiterrechnet. Anfangs- und Randbedingungen für CCI müssen als Ergebnis der Schüttbettphase angenähert werden. Quellen von Wärme und Spaltprodukten während der Schüttbettphase sind gegebenenfalls für die COCOSYS-Simulation zu berücksichtigen.

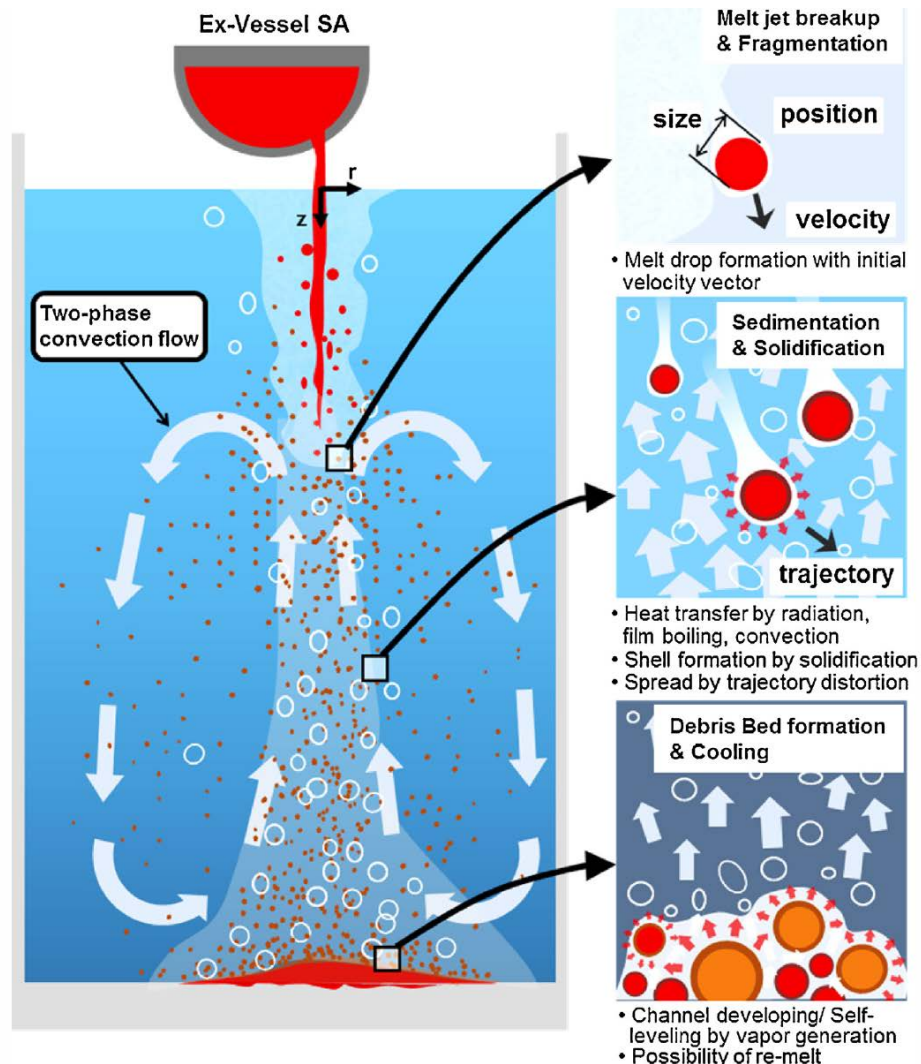
#### **4.2.1.4 Bewertung des Modellstands**

Aufgrund der engen Kopplung der Phänomene untereinander ist die Simulation aller beteiligten mechanistischen Vorgänge (siehe Abb. 4.3) sehr komplex.

Zur Charakterisierung des Schüttbettes, Fragestellungen 2 und 3 in der Liste oben, müssen folgende Phänomene realistisch simuliert werden:

- Simulation des Schmelzestrahls und dessen Aufbrechen („Melt Jet Breakup“)
- Bewegung und Verhalten (Wärmeübergänge; Schmelzen und Erstarren) der Schmelzetropfen bzw. -partikel im umgebenden Medium (Wasser/Dampf)
- Mehrphasen-Strömung des Wassers

Das Ablösen einzelner Tropfen aus dem Strahl wird in der Modellvorstellung auf das Abstreifen von Wellenbergen zurückgeführt, was durch eine Kelvin-Helmholtz-Instabilität an der Schnittstelle zwischen Schmelzestrahls und umgebenden Kühlmedium ausgelöst wird, getrieben von der Relativbewegung.



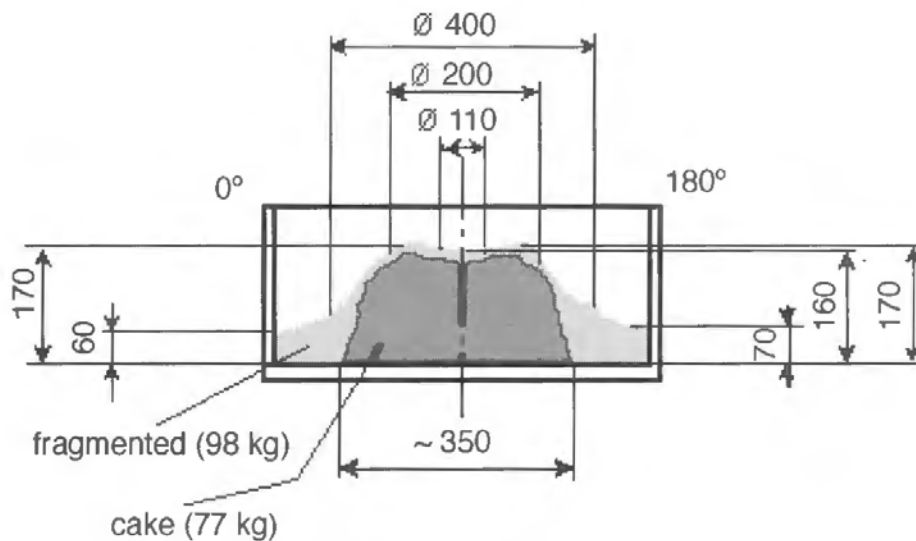
**Abb. 4.3** Schematische Darstellung der beteiligten Phänomene bei der Bildung eines Schüttbettes aus Schmelzpartikeln (aus /KIM 16/)

Der Validierungsstand zum Aufbrechen des Schmelzestrahls ist als schwierig zu beurteilen, wie nachfolgend erörtert:

Zum einen mangelt es an Experimenten, in denen sich ein Schmelzestrahls unter nahezu quasi-stationären Bedingungen ausbildet und in denen der Strahldurchmesser eine für den Reaktorfall repräsentative Größe aufweist ( $< \sim 40$  cm). Als Experimente mit höchster



Relevanz gelten (vgl. /SHE 12/) die FARO-Experimente /MAG 06/. Diese weisen Durchmesser der Ausströmöffnung von ca. 5 bzw. 10 cm auf. Im FARO-Experiment L-28 werden quasi-stationäre Bedingungen erreicht (von etwa 5 s Dauer), weswegen dieser Versuch für die Modellvalidierung von großer Bedeutung ist. Der Versuch L-28 wurde bei einem Systemdruck von 5 bar mit einem Wasserpool knapp unterhalb der Sättigungstemperatur durchgeführt. Was die Bewertung der Validierungsrechnungen zu L-28 erschwert, ist die Bildung eines großen Bereiches (~ 48 %) von zusammengebackener Schmelze („Cake“) auf der Bodenplatte des Experimentes. Während von Experimentatoren ursprünglich vermutet wurde, dass die verfügbare Wasserhöhe (1,44 m) nicht ausgereicht habe, um den Strahl komplett aufzubrechen, und dieser daher direkt bis zum Boden gelangt sei und so den Cake gebildet habe /MAG 06/, identifizieren verschiedene Experten in späteren Diskussionen des Experimentes – gestützt durch Simulationsrechnungen – ein komplettes Strahlaufbrechen im Experiment nach ca. 60...80 cm Falllänge /BUC 16/. Dieser neueren Sichtweise folgend habe sich der Cake auf der Bodenplatte erst durch Zusammenbacken von vormals vollständig fragmentierten Schmelzepartikeln gebildet, die entweder flüssig oder mit dünner Kruste am Boden aufgetroffen seien.



**Abb. 4.4** Konfiguration des Schüttbettes beim Versuch L-28, aus /MAG 06/

Als Anhaltspunkte für das vollständige Aufbrechen des Strahles werden experimentelle Daten für die Ankunft der Schmelzefront in der zentralen Fallachse des Strahls herangezogen. Nach Meinung der GRS (ohne genauere Kenntnis weiterer experimenteller Umstände, wie z. B. der absoluten Fehler bei den Ankunftszeiten bzw. Achsen-Positionen) lassen diese Daten jedoch im Hinblick auf ein mögliches, komplettes Strahlaufbrechen vor Erreichen der Bodenplatte keine gesicherte Interpretation zu.

Hinzu kommt, dass für erfolgreiche Simulationen der Experimente L-28 (mit Wasser bei Sättigungstemperatur) und L-31 (mit unterkühltem Wasser) umfangreiche Modellmodifikationen nötig gewesen waren, um die beteiligten Vorgänge für beide Randbedingungen in guter Übereinstimmung abbilden zu können. Von den Autoren des Modells COCOMO wird beklagt, dass man noch keinen einheitlichen Ansatz für beide Randbedingungen (d. h. für gasarmes sowie gasreiches umgebendes Medium) gefunden habe /BUC 16/.

Dagegen werden die Modelle zur Kühlbarkeit eines ausgebildeten Schüttbettes (dies betrifft die Fragestellung 4 und 5 in der Liste auf Seite 105) von den COCOMO-Autoren /BUC 16/ als deutlich ausgereifter angesehen: Die von den Modellen prognostizierten Dryout-Wärmestromdichten in Schüttbetten seien auf bis zu ca. 10 – 15 % genau und die wichtigsten Effekte würden in guter Übereinstimmung zu den Experimenten wiedergegeben. Allerdings zeigten die Modelle eine (konservative) Unterschätzung der Kühlbarkeit für kleine Partikeldurchmesser von ca. < 1 mm /BUC 16/.

Die beschriebenen Einschätzungen geben eine Orientierungshilfe für die Abarbeitung der oben genannten Fragestellungen im Hinblick auf eine Modellbildung in COCOSYS:

- Fragestellung 1 (Dampfexplosion) wird zunächst ausgeklammert.
- Fragestellung 2 und 3 (Schüttbettbildung und Agglomeration) bezeichnet ein Themenfeld, das noch durch große Unsicherheiten in Kenntnis und Modellbildung gekennzeichnet ist. Dieses Themenfeld sollten mit geringerer Priorität bearbeitet werden, da die Modelle noch stark in Diskussion sind.
- Fragestellungen 4 und 5 (Kühlbarkeit eines Schüttbettes) betreffen ein Themenfeld mit weit fortgeschrittenem State-of-the-Art. Dieses Themenfeld kann mit höherer Priorität bearbeitet werden, da die Modelle ausgereift sind.
- Fragestellung 6 benötigt eine durchgehende mechanistische Rechnung über die gesamte Transiente bis zur stationären Kühlung des Schüttbettes und muss nachgelagert zu Fragestellungen 2 und 3 bearbeitet werden.
- Fragestellung 7 und 8 (Einbettung von Fragmentierungs-/Schüttbettmodellen in die Simulationskette) schließt sich an die gelösten Fragestellungen 2 – 5 bzw. 4 – 5 an.

#### **4.2.2 Referenzrechnung für das SERENA-Anlagenszenario**

Die Arbeiten wurden mit der Analyse der Kühlbarkeit eines Schüttbettes unter Verwendung des Rechencodes COCOMO in der Version 2.1 von April 2017 auf Basis eines von

IKE bereit gestellten Eingabebeispiels /BUC 17/ durchgeführt. Zunächst wurde eine Referenzrechnung zu dem in Abschnitt 4.2.1 vorgestellten Anlagenszenario aus dem OECD-SERENA2-Projekt erstellt. Da die Schüttbettbildung nicht modelliert wird, müssen die Parameter des entstandenen Schüttbettes zuvor festgelegt werden.

#### 4.2.2.1 2D-Rechnung zur Dryout-Wärmestromdichte

Benötigte Stoffdaten der Schmelzepartikel (Dichte, Wärmeleitfähigkeit, spezifische Wärme, Schmelzwärme, Solidus, Liquidus, Emissivität, Viskosität) werden wie im SERENA-Rechenfall für den DWR veranschlagt /PIL 14/. Der Systemdruck beträgt 0,2 MPa.

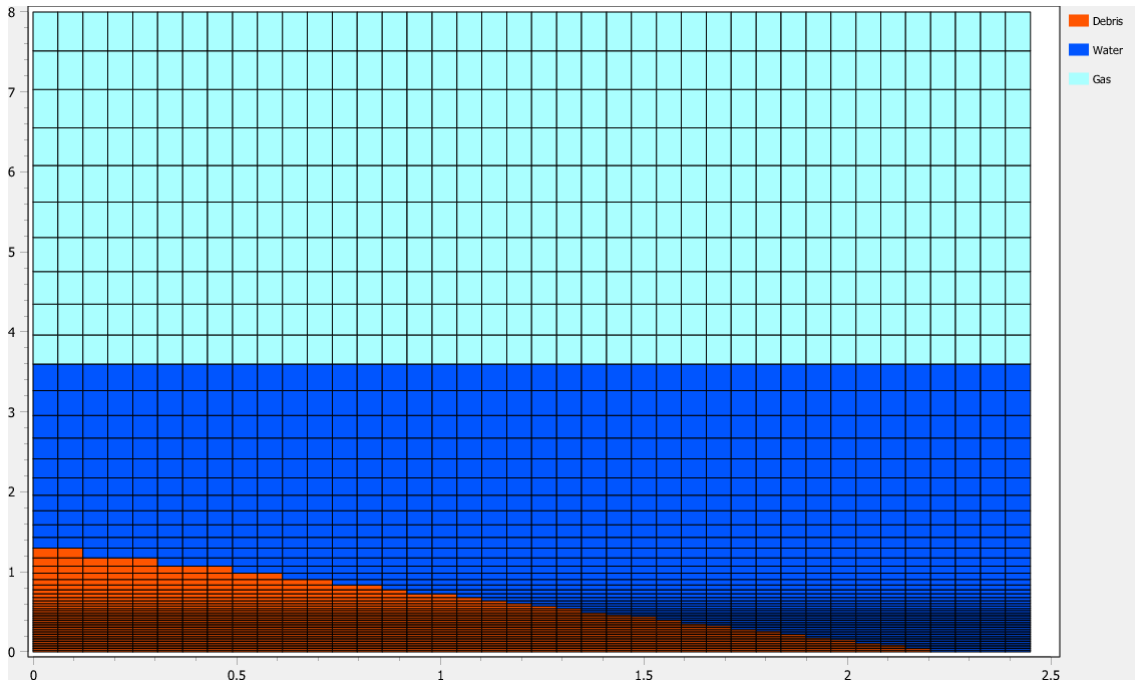
**Tab. 4.2** Parameter für die Schüttbettkonfiguration

Parameter	Wert
Schmelzemasse (kg)	30 000
Porosität (%)	40
Partikeldurchmesser (mm)	3
Böschungswinkel (°)	30
Anfängliche Höhe des Wasserpools (m)	3,6

Der Durchmesser der 8 m hohen Reaktorgrube wurde wie im SERENA-Rechenfall mit 4,9 m angenommen. Es wurde eine axialsymmetrische 2D-Rechnung mit 30 000 kg Schmelze durchgeführt. Die Porosität der angenommenen Partikelschüttung wurde auf 40 % festgelegt, ein Wert der sehr häufig in Untersuchungen zur Kühlbarkeit von Schüttbettkonfigurationen als Referenzwert verwendet wird. Zum Vergleich: Die maximale Packungsdichte einer monodispersen Kugelanordnung liegt bei 74 %, dies entspricht einer minimalen Porosität von 26 %. Für das Schüttbett wird eine kegelförmige Verteilung der Partikel mit einem Winkel der ansteigenden Flanke (Böschungswinkel) von 30° angenommen. Dieser Wert entspricht in etwa dem Winkel aus der Schüttbettkonfiguration beim Versuch FARO L-28, vgl. Abb. 4.4. Für den einheitlichen Kugeldurchmesser wurde ein Wert von 3 mm verwendet, dies entspricht dem mittleren Partikeldurchmesser bei FARO L-28.

Die Gittergröße für eine Hälfte der Reaktorgrube (unter Ausnutzung der Symmetrie) beträgt 40 × 56 Zellen, Abb. 4.5. Die Gittermaschen sind in z-Richtung leicht progressiv

gedehnt, um stark unterschiedliche Maschenausdehnungen von benachbarten Zellen zu vermeiden. Im Referenzfall mit 30 t Schmelzepartikeln ergibt sich mit den getroffenen Annahmen wie in Abb. 4.5 gezeigt ein idealer Kegel mit einer Schüttbetthöhe von 1,3 m in der zentralen Achse.



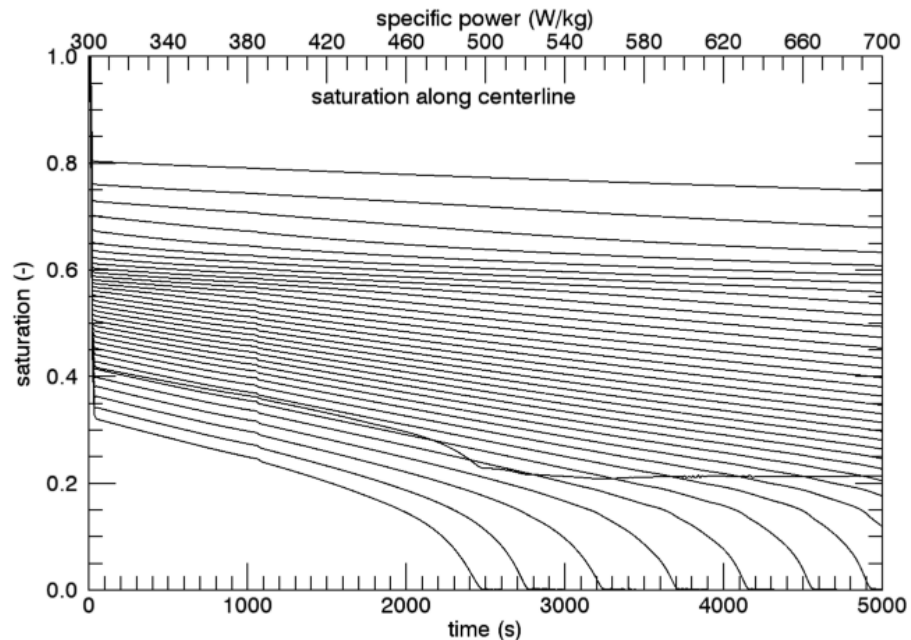
**Abb. 4.5** COCOMO-Rechengitter (2D) mit  $40 \times 56$  Maschen

Die Auswertung im Hinblick auf die Kühlbarkeit wird vom Verfahren her folgenderweise durchgeführt: Die Rechnung wird mit einem komplett abgekühlten Schüttbett bei Sättigungstemperatur begonnen, d. h. Wasser und Schmelzepartikel befinden sich identisch und homogen auf Sättigungstemperatur (393 K bei 2 bar). Die freien Poren werden durch Wasser ausgefüllt. Nun wird die Leistungsdichte allmählich erhöht, im Idealfall mit konstanten Stufen. Dabei wird das verdampfte Wasservolumen durch Einspeisung eines entsprechend abgeschätzten Wassermassenstroms im oberen Bereich des Pools näherungsweise ersetzt. Dies erfolgt in dieser Rechnung entlang der Seitenwand der Reaktorgrube im oberen Bereich des Wasserpools. Die Dryout-Wärmestromdichte ist dann erreicht, wenn an der für die Kühlung ungünstigsten Position in der Schüttbettkonfiguration (in der Regel an der Kegelspitze) trocken gelegte Bereiche entstehen und dadurch die Nachzerfallswärme nicht mehr abgeführt werden kann, d. h. dass die lokalen Temperaturen der Schmelzepartikel ansteigen.

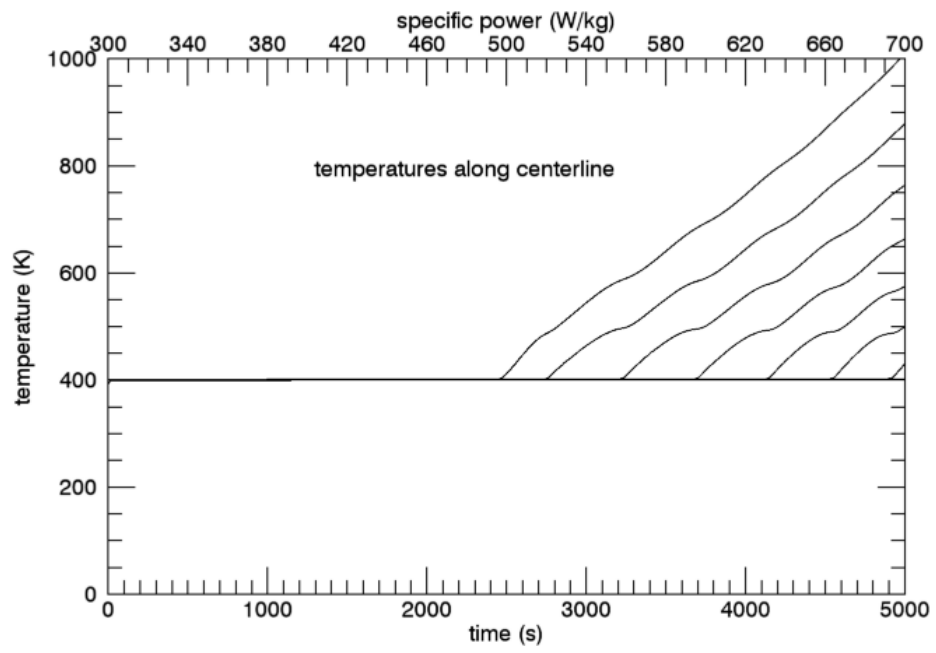
Für den hier gerechneten Referenzfall wird in einem Zeitraum von 5000 s die Wärmeleistung von 300 W/kg bis auf 700 W/kg konstant hochgefahren. Das Trockenfallen der

oberen Kegelbereiche wird bei einer Leistungsdichte von ca. 500 W/kg berechnet. Wie die Rechnung zeigt (Abb. 4.6) wird für die obersten Bereiche des Schüttbettes die Sättigung bei ca.  $t = 2450$  s auf nahezu 0 % reduziert. Zu diesem Zeitpunkt beträgt die spezifische Leistung ca. 500 W/kg. Die obersten Stellen des Schüttbettes zeigen dabei einen raschen Anstieg der Temperatur (Abb. 4.7).

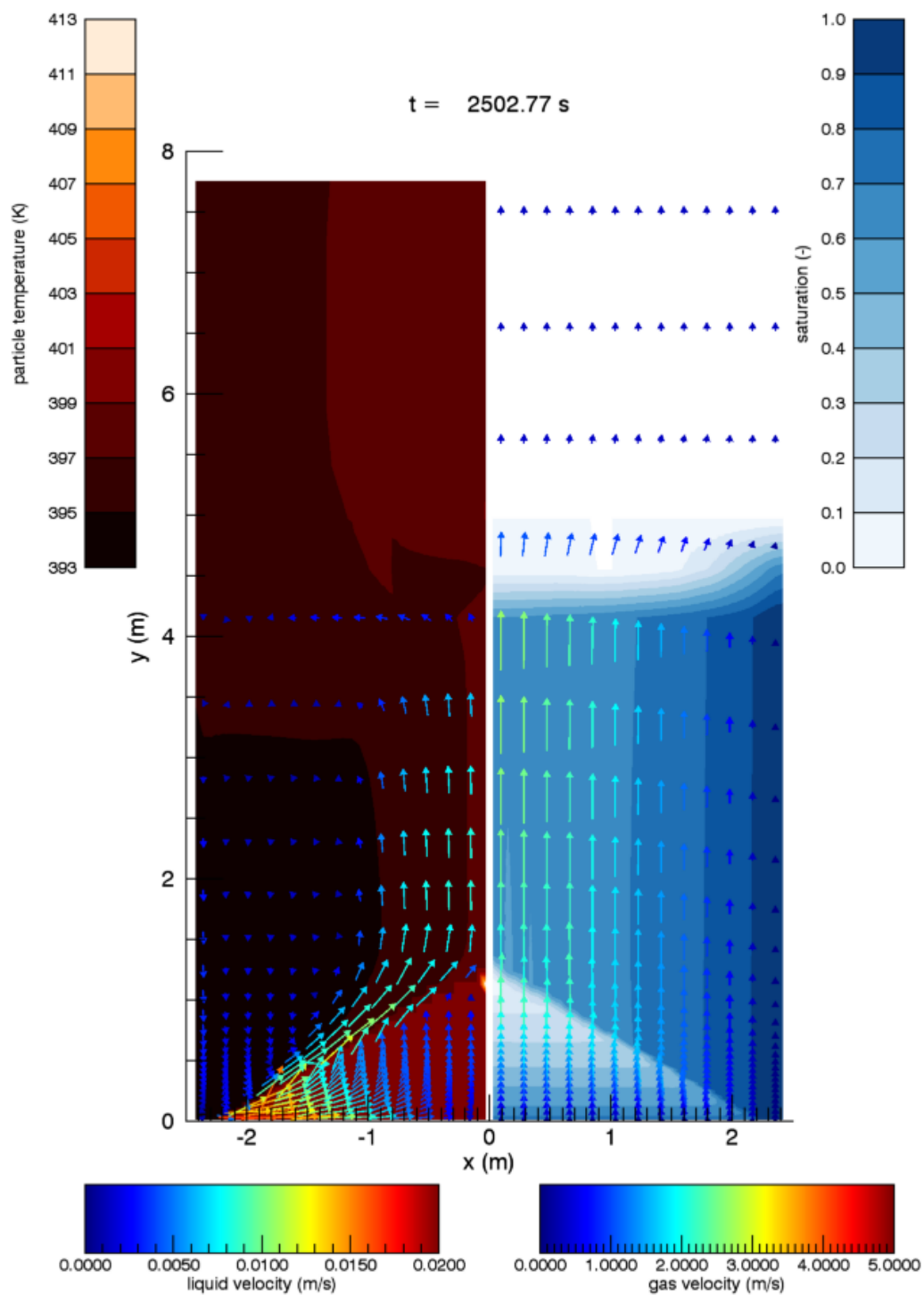
Aufgrund der im SERENA-Rechenfall angenommenen Schmelzezusammensetzung von 80 %  $\text{UO}_2$  zu 20 %  $\text{ZrO}_2$  entspricht die Leistungsdichte von 500 W/kg Schmelze einer auf das  $\text{UO}_2$  bezogenen Leistungsdichte von 625 W/kg  $\text{UO}_2$ . Einschlägige Werte der auf den Brennstoff bezogenen Leistungsdichte zum Zeitpunkt von 2 h nach Schnellabschaltung liegen bei ca. 300 W/kg  $\text{UO}_2$ . Das hier angenommene Schüttbett würde somit ausreichend Reserven für eine Kühlbarkeit aufweisen.



**Abb. 4.6** Berechnete Sättigung in den Maschen entlang der zentralen Achse



**Abb. 4.7** Berechnete Temperaturen in den Maschen entlang der zentralen Achse

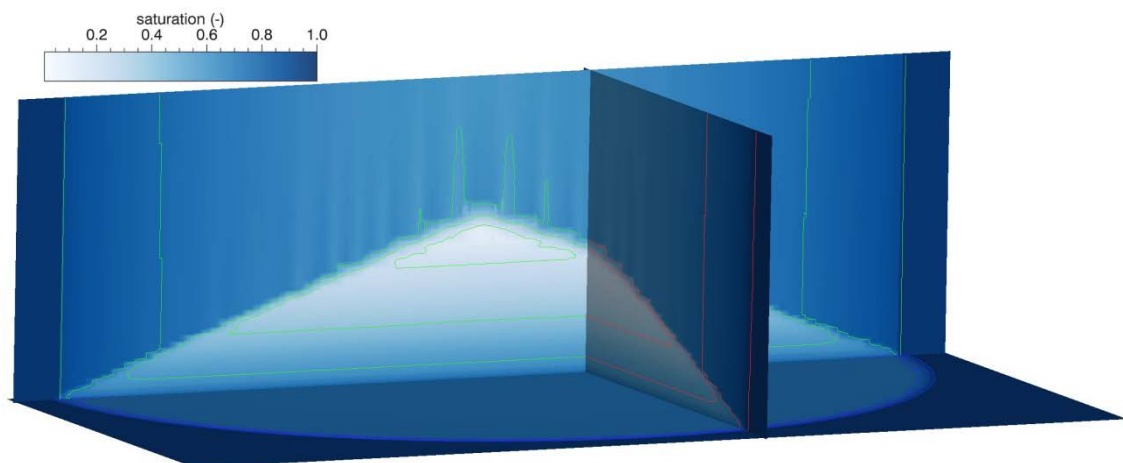


**Abb. 4.8** Rechenergebnis der 2D-Rechnung für Schmelzpartikeltemperaturen (links) und Sättigung (rechts) bei  $t = 2500 \text{ s}$

#### 4.2.2.2 Überprüfung der 2D-Rechnung zur Dryout-Wärmeleistungsdichte durch eine 3D-Rechnung

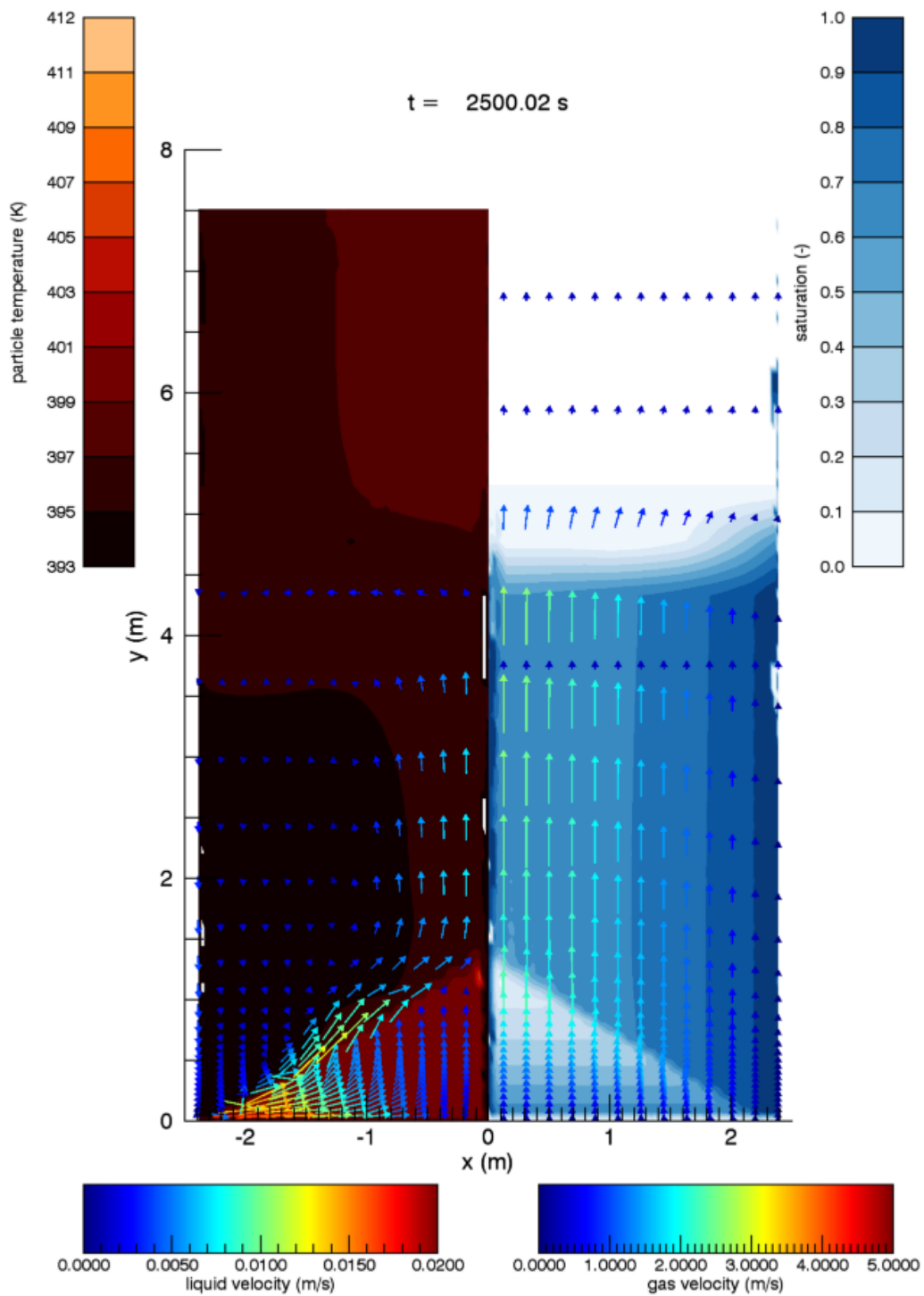
Die in der 2D-Rechnung ermittelte Austrocknung des Schüttbettes bei langsam angehobener Leistungsdichte wurde in einer 3D-Rechnung überprüft. Dazu wurde ein 3D-Gitter, bestehend aus  $40 \times 40 \times 56$  Maschen in zylindrischen ( $r, \varphi, z$ )-Koordinaten erstellt:  $r$  variiert zwischen 0 und 2,45 m,  $\varphi$  variiert zwischen 0 und  $180^\circ$ ,  $z$  variiert zwischen 0 und 8 m.

Die 3D-Rechnung (Abb. 4.9, Abb. 4.10) stimmt sehr gut mit der 2D-Rechnung (vgl. Abb. 4.8) überein. Ein Aufheizen der Schmelzepartikel wird ab ca.  $t = 2\,460$  s berechnet. Zu diesem Zeitpunkt liegt eine Wärmestromdichte von ca.  $497$  W/kg Schmelze vor.



**Abb. 4.9** Konturdarstellung der Sättigung in der 3D-Rechnung für das Rechengebiet von Schüttbett und Wasserpool ( $< 2,5$  m Höhe) zum Zeitpunkt  $t = 2\,500$  s





**Abb. 4.10** Rechenergebnis der 3D-Rechnung für Schmelzepartikeltemperaturen (links) und Sättigung (rechts) bei  $t = 2\,500 \text{ s}$

#### 4.2.2.3 Überprüfung der 2D-Rechnung zur Dryout-Wärmeleistungsdichte mit feinerer Gitterauflösung

Als nächstes wurde untersucht, in welchem Maß eine Gitterabhängigkeit der Ergebnisse besteht. Dazu wurde die Anzahl der Gittermaschen in x- und y-Richtung jeweils verdoppelt bzw. vervierfacht.

**Tab. 4.3** Einfluss der Maschenweite auf die berechnete Dryout-Leistungsdichte

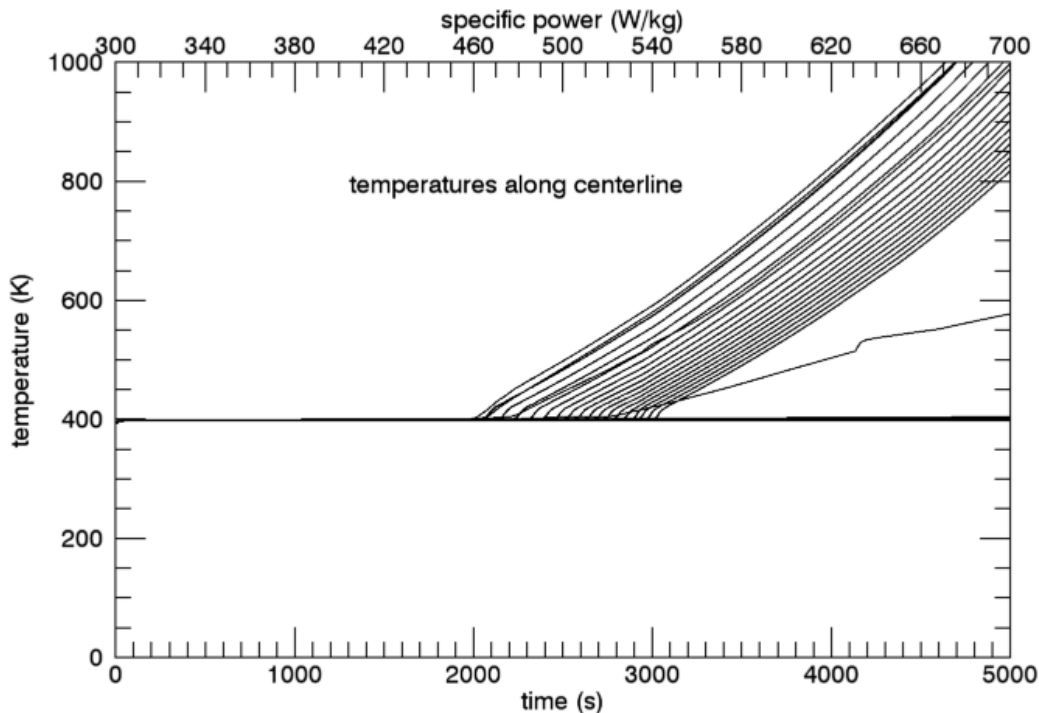
Faktor der Gitterverfeinerung	Dryout-Zeit (s)	Dryout-Leistungsdichte (W/kg)	rel. Abweichung (%)
1	2462	497	+6,9
2	2211	477	+2,6
4	2063	465	0

Die Ergebnisse für die Dryout-Zeitpunkte bzw. für die spezifische Wärmeleistung der Tab. 4.3 zeigen, dass für orientierende Rechnungen die grobe Gitterauflösung der Referenzrechnung ausreichend ist. Die hierbei verwendete Maschenweite beträgt im Bereich des Schüttbetts etwa 6 cm in radialer Richtung und 4 cm in z-Richtung. Hierbei wird allerdings – bedingt durch die grobe Maschenweite – die Dryout-Leistungsdichte um ca. 7 % gegenüber der um Faktor 4 verfeinerten Gitterweite überschätzt (s. Tab. 4.3).

Abb. 4.11 zeigt ein Ergebnis der Rechnung mit dem verfeinerten Gitter. Die obersten Stellen des Schüttbettes zeigen bei ca.  $t = 2\,063$  s einen raschen Anstieg der Temperatur. Zu diesem Zeitpunkt beträgt die spezifische Leistung ca. 465 W/kg.

Zwischen der Verfeinerung von Faktor 2 auf Faktor 4 ändert sich die berechnete Dryout-Leistungsdichte nur noch um 2,6 %, damit würde ein weiterer Genauigkeitsgewinn durch eine Verfeinerung der Maschenweite auf Faktor 8 nur noch im Bereich von 1 % erwartet.

Ferner sollte auf die zu erwartende Genauigkeit des Modells insgesamt hingewiesen werden, diese liegt für die Berechnung der Dryout-Leistungsdichte nach Angaben des Entwicklerteams bei ca. 10 % /BUC 15/.

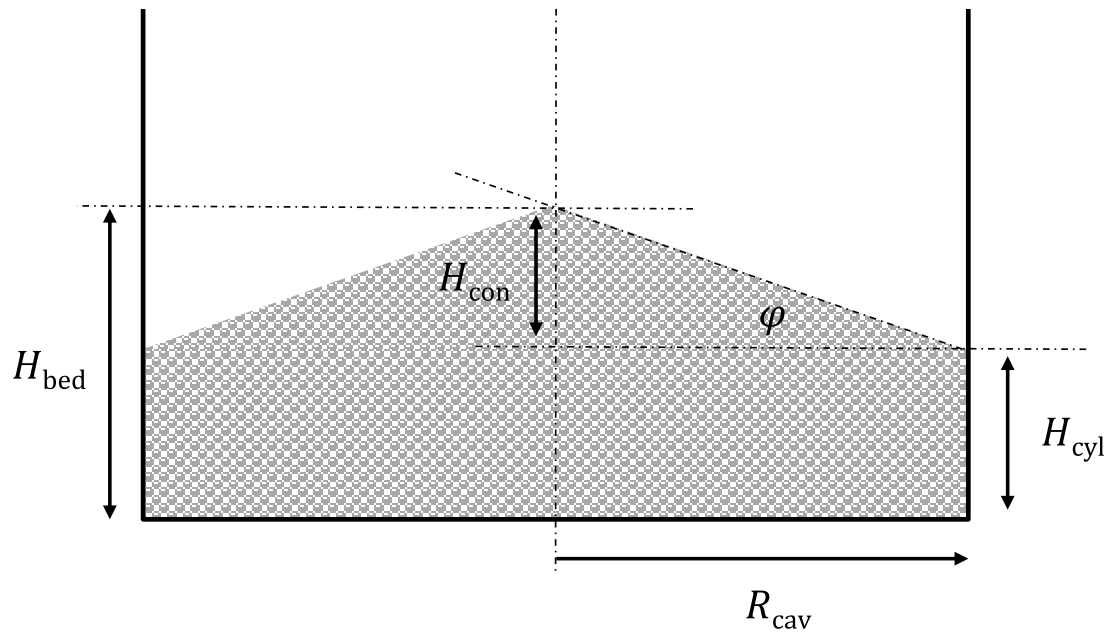


**Abb. 4.11** Berechnete Temperaturen in den Maschen entlang der zentralen Achse bei Gitterverfeinerung um Faktor 4 in beide Achsenrichtungen

#### 4.2.3 Einfluss von Hauptparametern auf die Dryout-Leistungsdichte eines Schüttbettes

Einige der wichtigsten Parameter für die Schüttbettkonfiguration sind bereits in Tab. 4.2 gelistet: Schmelzmasse  $m$ , Porosität  $\varepsilon$ , Partikeldurchmesser  $d$ , Böschungswinkel  $\varphi$ . Die Höhe des zylindrischen Teils des Schüttbettes  $H_{\text{cyl}}$  wird durch die Gesamtmasse  $m$ , durch den Radius  $R_{\text{cav}}$  der Cavity, durch die Porosität  $\varepsilon$  und durch den Böschungswinkel  $\varphi$  beeinflusst (Abb. 4.12). Die Höhe des Kegels oberhalb des zylindrischen Teils wird durch den Böschungswinkel  $\varphi$  und durch den Kavernenradius  $R_{\text{cav}}$  sowie auch ggf. durch die Schmelzmasse  $m$  bestimmt.

Für diese Hauptparameter wurden jeweils Variationsrechnungen entsprechend der Tab. 4.4 erstellt, um den ungefähren Einfluss der Parameter zu untersuchen. Die variierten Werte sollen dabei ungefähr den möglichen, erwarteten Wertebereich abdecken. Dabei stellt der konkrete Wert für die Schmelzmasse im Referenzfall einen unteren Variationspunkt dar. Für den Schmelzeaustrag in pessimistischen MCCI-Szenarien beispielsweise werden weitaus größere Schmelzmassen in der Reaktorgrube unterstellt, als wie mit den 30 000 kg im SERENA-Fall angenommen.

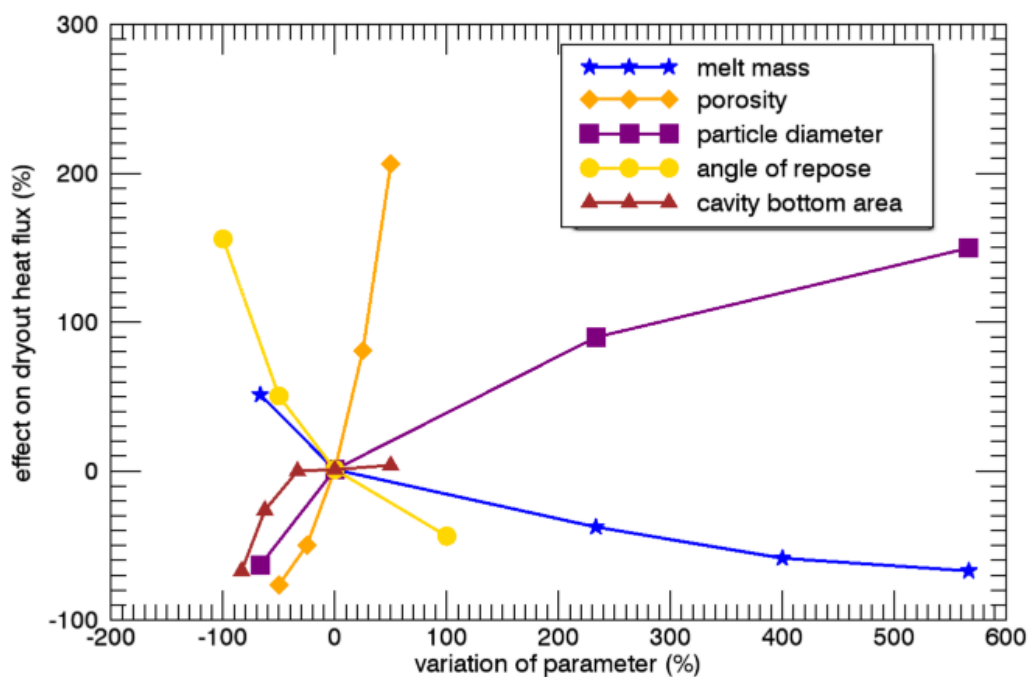


**Abb. 4.12** Geometrische Konfiguration des Schüttbettes

**Tab. 4.4** Parametervariation für die Schüttbettkonfiguration. Referenzwerte sind fettgedruckt

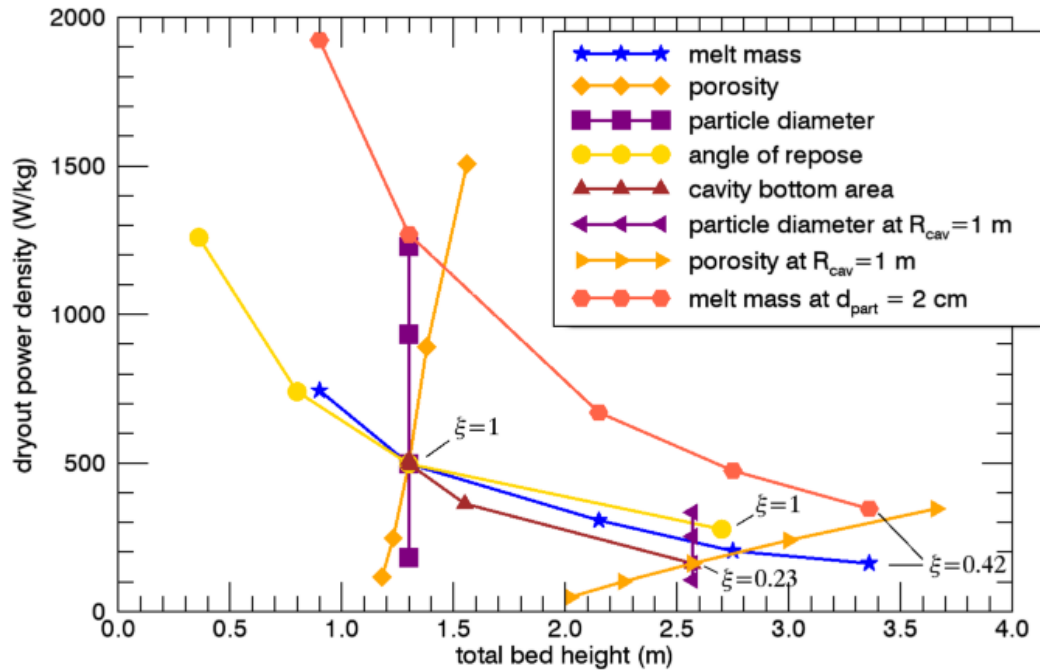
Parameter	Werte	$H_{cyl}; H_{con}; H_{bed}$ (m)	Dryout-Leistungsdichte (W/kg)	
$m$ (kg)	10 000	0; 0,9; 0,9	744	
	<b>30 000</b>	<b>0; 1,3; 1,3</b>	<b>497</b>	
	100 000	0,74; 1,41; 2,15	307	
	150 000	1,35; 1,41; 2,76	204	
	200 000	1,95; 1,41; 3,36	162	
Porosität (%)	20	0; 1,18; 1,18	116	
	30	0; 1,23; 1,23	247	
	<b>40</b>	<b>0; 1,3; 1,3</b>	<b>497</b>	
	50	0; 1,38; 1,38	890	
	60	0,07; 1,49; 1,56	1507	
$d$ (mm)	0,5	0; 1,3; 1,3	-	
	1	0; 1,3; 1,3	181	
	<b>3</b>	<b>0; 1,3; 1,3</b>	<b>497</b>	
	10	0; 1,3; 1,3	934	
	20	0; 1,3; 1,3	1229	
$\varphi$ (°)	0,01	0,36; 0; 0,36	1259	
	15	0,14; 0,66; 0,8	740	

Parameter	Werte	$H_{cyl}$ ; $H_{con}$ ; $H_{bed}$ (m)	Dryout-Leistungsdichte (W/kg)	
	<b>30</b>	<b>0; 1,3; 1,3</b>	<b>497</b>	
	60	0; 2,7; 2,7	277	
$R_{cav}$ (m)	1,0	1,99; 0,58; 2,57	162	
	1,5	0,68; 0,87; 1,55	363	
	2,0	0,16; 1,15; 1,31	492	
	<b>2,45</b>	<b>0; 1,3; 1,3</b>	<b>497</b>	
	3	0; 1,3; 1,3	511	



**Abb. 4.13** Einfluss der Parametervariationen auf die Dryout-Wärmeleistung

Abb. 4.13 zeigt, dass bei separater Variation der fünf ausgewählten Parameter innerhalb ihrer individuellen Unsicherheitsbereiche (alle anderen Parameter bleiben jeweils konstant) ein Einfluss von ca. -100 % bis zu ca. + 200 % auf die Dryout-Leistungsdichte der Referenzrechnung zu erwarten ist. In der Kombination können entsprechend aufaddierte Einflüsse erwartet werden, z. B. ist bei gleichzeitiger Vorgabe von größerem Partikel-durchmesser, größerer Porosität und kleinerem Böschungswinkel eine um mehrere 100 % erhöhte Dryout-Leistungsdichte zu erwarten.



**Abb. 4.14** Dryout-Leistungsdichte in Abhängigkeit der totalen Schüttbetthöhe (zylindrischer Bereich + Kegel) bei separater Variation der gelisteten Parameter.  $\xi$  benennt die anteilige Höhe des Kegels an der totalen Schüttbetthöhe.

Die Auftragung der ermittelten Dryout-Leistungsdichten in Abhängigkeit der totalen Schüttbetthöhe  $H_{\text{bed}} = H_{\text{cyl}} + H_{\text{con}}$  in Abb. 4.14 zeigt interessante Abhängigkeiten:

- Die Dryout-Leistungsdichte fällt mit Zunahme der totalen Schüttbetthöhe hyperbolisch ab.
- Bei selber Schüttbetthöhe ist die reine Kegelform ( $\xi = H_{\text{con}}/H_{\text{bed}} = 1$ ) leichter zu kühlen (größere Dryout-Leistungsdichte) als Schüttbetten mit größerem Anteil an zylindrischer Form ( $\xi < 1$ ).
- Mit Zunahme von Partikeldurchmesser und Porosität wird bei konstanter totaler Schüttbetthöhe die Kühlbarkeit stark verbessert bzw. bei Abnahme entsprechend stark vermindert. In Abb. 4.14 weist der Graph für die Variation der Porosität einen Einfluss auf die Schüttbetthöhe auf (Zunahme der Schüttbetthöhe bei ansteigender Porosität), da hier die Schmelzmasse (genau wie die anderen Parameter) für die separate Variation des Parameters ‚Porosität‘ konstant gelassen wurde. Der Einfluss der Variation von Partikeldurchmesser und Porosität auf die Dryout-Leistungsdichte ist größer beim Ausgangspunkt mit kleiner Schüttbetthöhe ( $H_{\text{tot}} = 1,3 \text{ m}$ ) und reiner Kegelform ( $\xi = 1$ ) (Referenzfall) als für den Ausgangspunkt mit großer Schüttbetthöhe ( $H_{\text{tot}} = 2,57 \text{ m}$ ) und kleinerem Kegelanteil ( $\xi = 0,23$ ).

#### **4.2.4 Schlussfolgerung**

Die Kühlbarkeit eines Schüttbettes unter Annahme radialsymmetrischer Bedingungen könnte auf der Basis einer Vielzahl parametrischer Vorausrechnungen in 2D mit dem Rechencode COCOMO durch eine Korrelation angenähert werden. In dieser Korrelation sinkt die kritische Leistungsdichte hyperbolisch mit der maximalen Höhe des Schüttbettes. Dabei hat der Einfluss der Anteile von kegel- und zylinderförmigen Bereichen leichte Einflüsse bei konstant gelassener Schüttbetthöhe. Hingegen habe Porosität und Partikeldurchmesser großen Einfluss bei konstant gelassener Schüttbetthöhe. Diese wesentlichen Einflüsse müssen durch die Korrelation vernünftig abgebildet werden. Die Erstellung dieser Korrelation auf der Basis einer erweiterten Matrix von Vorausrechnungen mit COCOMO ist für ein Anschlussvorhaben geplant. Die durch spätere Verwendung der Korrelation in COCOSYS möglicherweise in Kauf genommenen Fehler sind im Hinblick auf noch bestehende Unsicherheiten bei der Freisetzung von Schmelze aus dem RDB sowie auch bei der Schüttbettenstehung akzeptabel.

#### **4.3 Modellerweiterung für Kernfänger**

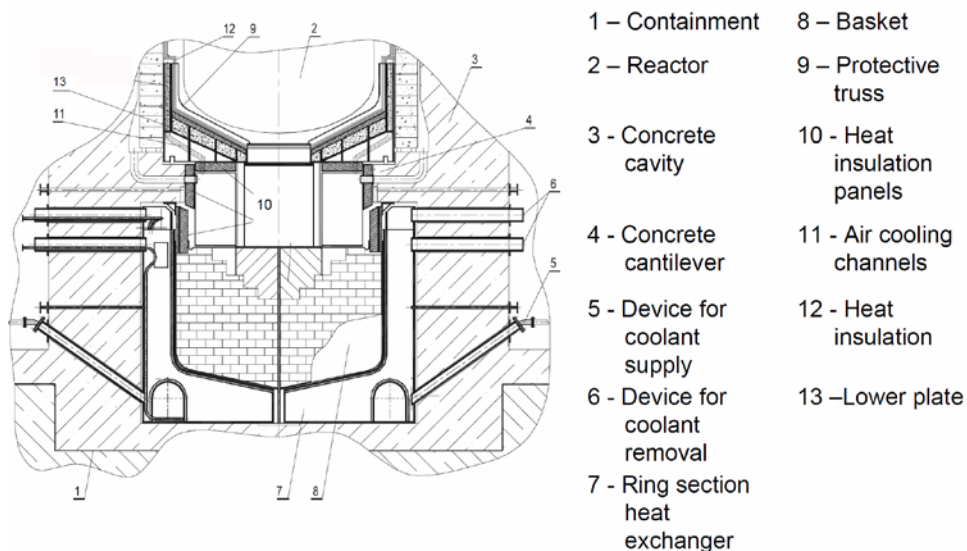
Gemeinsames Merkmal von Kernfängerkonzepten in Reaktoranlagen der Generation III+, bei denen das RDB-Versagen nicht durch eine externe Kühlung prinzipiell verhindert werden soll, ist die kontrollierte Überführung der Schmelze nach Versagen des RDB in eine Konfiguration (Geometrie, Zusammensetzung), bei der die Strukturen für die Eingrenzung der Schmelze (Behälter) bzw. die Schmelze selbst durch Wasser gekühlt – d. h. die Nachzerfallswärme abgeführt wird –, ohne dass diese Eingrenzungsstrukturen zerstört werden. Durchgehende Langzeit-Analysen mit COCOSYS für solche Anlagen erfordern die generelle Berücksichtigung des Kernfängers und der entsprechenden örtlichen Quellen von Wasserdampf und schwer flüchtigen Spaltprodukten.

In diesem Arbeitspunkt sind zunächst Grundlagen zusammengestellt worden, um für COCOSYS ein generisches Zonenmodell „Kernfänger“ bereit zu stellen, das die wesentlichen Prozesse in einem Kernfänger möglichst unabhängig vom speziellen Design beschreiben soll. Darauf aufbauend ist ein erstes Konzept ist ausgearbeitet worden.

### 4.3.1 Merkmale von aktuellen Kernfänger-Konzepten

#### 4.3.1.1 Neue russische Anlagen basierend auf dem WWER-1000

In neueren WWER-Anlagen der Baulinie 1000 oder höher, z. B. in den WWER-1000/428-Blöcken in Tianwan (AES-91), basiert der zylindrische Kernfänger auf einem Tiegelkonzept (Abb. 4.15). Der Kernfänger befindet sich in zentraler Position unter dem RDB und ist teilweise mit Opfermaterial gefüllt, welches erschmolzen wird und sich mit dem Corium aus dem Reaktorkern vermischt. Diese Opfermaterialien dienen dazu, den Schmelzpool während der Freisetzungsphase aus dem RDB zu konditionieren. Insbesondere sollen metallische Zr-Anteile im Corium möglichst vollständig oxidiert und die Dichte des Oxids unter die der Metallschicht abgesenkt werden, um eine Schichtungs-umkehr bei der Ablagerung von Oxid- und Metallschmelze im Kernfänger zu bewirken. Auf diese Weise werden sowohl die Dichte der Leistungsfreisetzung im Schmelzpool ( $W/m^3$ ) als auch die maximal abgegebene Wärmestromdichte auf der Oberfläche des Pools ( $W/m^2$ ) abgesenkt. Nach der Aufschmelzphase kommt der Schmelzpool mit den Seitenwänden und dem Boden des zylindrischen Stahlbehälters in Kontakt, der von außen mit Wasser im Naturumlauf gekühlt wird. Das Wasser kann auch direkt von oben auf die freie Oberfläche der Schmelze gelenkt werden und dort verdampfen. Der Zeitraum bis zur Erstarrung liegt aufgrund der kompakten Geometrie der Schmelze in der Größenordnung von einem Jahr.

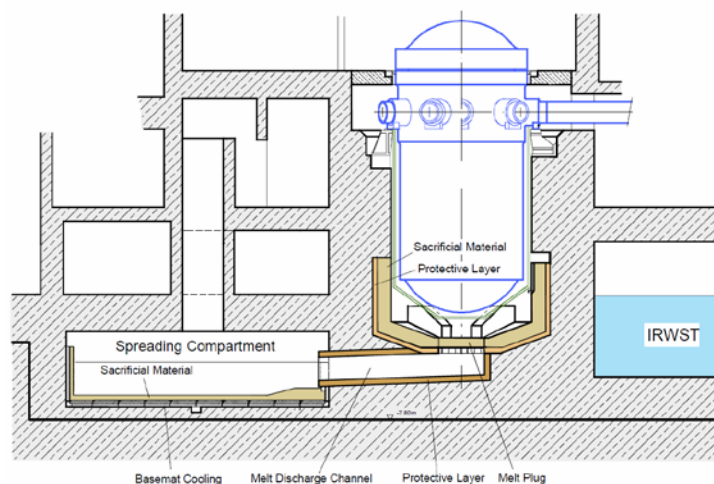


**Abb. 4.15** Konzept des Kernfängers im Design des WWER-1200/428 (AES-91)  
/CEA 06/



#### 4.3.1.2 Europäischer Druckwasserreaktor EPR

Das Kernschmelze-Stabilisierungssystem des EPR (Abb. 4.16) sieht zunächst eine kurzzeitige Rückhaltung der Schmelze in der Reaktorgrube unter dem RDB vor von ca. 1 – 2 h Dauer, während der eine Kernschmelze-Beton-Wechselwirkung mit vordefiniertem, sauerstoffreichem Beton bis zu einer axialen Erosionstiefe von ca. 50 cm stattfindet. Während dieser Zeit sollen weitere Corium-Freisetzen aus dem Reaktorkern vom Schmelzpool aufgenommen und das darin enthaltene Zirkonium in großem Maße oxidiert werden. Ferner soll aufgrund der Vermischung der Schmelze mit dem zerstörten Beton die Fließfähigkeit der Schmelze für die nachfolgende Schmelzeausbreitung erhöht werden. Nach der Schmelzeausbreitung befindet sich die Schmelze in einem großflächig (ca. 170 m<sup>2</sup>) angelegten Kernfänger aus einer Stahlstruktur, die mit einer ca. 10 cm dicken Opferbetonschicht ausgekleidet ist. Die Dicke der Stahlstruktur am Boden beträgt ca. 20 cm. Ein direkter Kontakt der Schmelze mit der Boden oder Seitenplatte des Kernfängers soll erst nach vollständiger Ausbreitung der Schmelze im Kernfänger und nach vollständiger Flutung der Kühlkanäle und der Oberfläche der Schmelze mit Wasser erfolgen. Dabei soll zuvor eine Umkehr der möglichen Schichtungsfolge (zu Beginn in der Reaktorgrube: Oxid unten, Metallschicht darüber; später: Metallschicht unten, Oxidschicht darüber) erfolgt haben um einen direkten Kontakt zwischen Metallschicht und Wasser auszuschließen. Das Wasser für die Kühlung des Kernfängers wird durch Naturumlauf oder durch Pumpbetrieb umgewälzt. Im Kernfänger wird aufgrund der großflächigen Ausbreitung der Schmelze eine niedrige Wärmestromdichte auf der gesamten Oberfläche des Pools erzielt, so dass der Schmelzpunkt der Stahlplatten mit ausreichendem Sicherheitsabstand nicht überschritten wird.



**Abb. 4.16** Kernfängerkonzept beim EPR /BIT 05/

#### 4.3.1.3 Kernfängerkonzept des ABWR von Toshiba

Das Toshiba-Konzept sieht einen zylindersymmetrischen Kernfänger unter dem RDB vor, bei welchem die ca. 1 cm dicken Boden- und Seitenwände aus Stahl mit Wasser gekühlt werden und eine direkte Flutung der Schmelze von oben vorgesehen ist (Abb. 4.17). Die geneigte Bodenplatte hat eine radiale Abmessung von ca. 4 m. Eine Naturkonvektion durch die axialsymmetrisch angeordneten, trapezförmigen Kühlkanäle in Boden und Seitenwandstruktur (Steigleitungen, „Riser“) soll in diesem Konzept durch den Einsatz einer ringraumförmigen Falleitung („Downcomer“) für die Wasserströmung ermöglicht werden. Die Flutung der Kühlkanäle und der Schmelze erfolgt zu Beginn mit Wasser aus der Kondensationskammer und im Langzeitbetrieb aus der Kondensatabflussleitung des passiven Containment-Kühlungssystems (PCCS). In diesem Konzept wird keine Konditionierung der Schmelze mit Opferbeton o. ä. Material vorgesehen. Stattdessen wird der Kernfänger mit einer ca. 20 cm dicken Schicht von refraktärem, hochschmelzendem Material (in Planung:  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /HAM 11/) ausgekleidet.

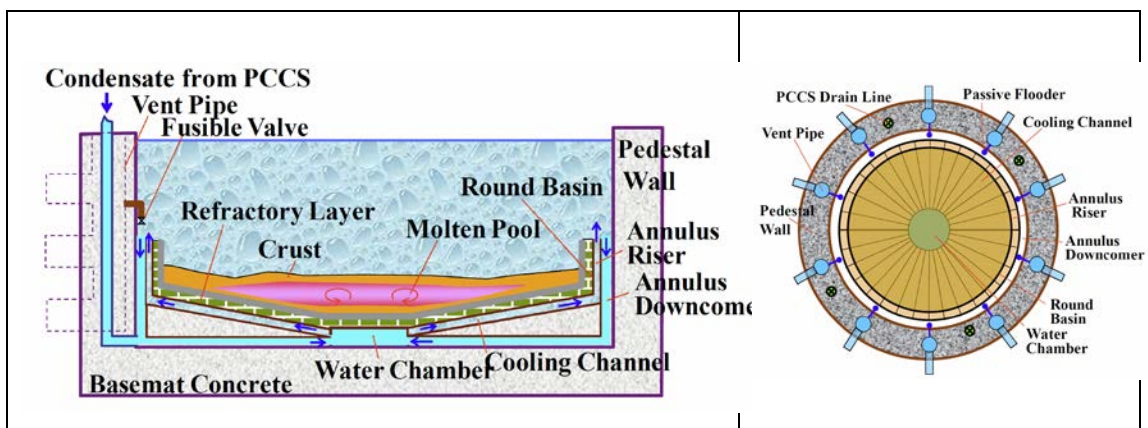


Abb. 4.17 Kernfängerkonzept des ABWR von Toshiba /HAM 11/

#### 4.3.1.4 Schlussfolgerungen für die Modellentwicklung

Aus den oben vorgestellten, aktuellen Designs von Kernfängersystemen lassen sich folgende Schlussfolgerungen im Hinblick auf generische Merkmale für die Modellentwicklung ziehen:

- Langfristiger Einschluss in Stahlstrukturen mit horizontalen oder geneigten Bodenflächen und vertikalen Seitenwänden und freier Oberfläche. Die Dicke der Stahlstrukturen bewegt sich in einer Größenordnung zwischen 1 cm und ca. 20 cm. Die

Situation könnte prinzipiell mit dem verfügbaren CCI-Modell in COCOSYS wiedergegeben werden, wenn die Wärmeströme an Boden und Seitenwänden abgeführt werden, ohne dass eine Zerstörung (Aufschmelzen) dieser Strukturen berechnet wird. Dazu müsste das Material dieser Boden- und Seitenwandstruktur als refraktär, d. h. unzerstörbar definiert und beim Ansatz für die Wärmeübergänge aus der Schmelze berücksichtigt werden, dass die Schmelze langfristig nicht mit Blasen wie bei MCCI durchsetzt wird. Wärmeleitung in festen Strukturen (z. B. im Beton) wird im CCI-Modell bislang nicht berücksichtigt, eine Annäherung hierfür müsste ergänzt werden. Das Modell soll Rückschlüsse auf die Temperaturentwicklung in den Stahlstrukturen erlauben, um Hinweise auf verfügbare Sicherheitsmargen abzuleiten.

- Die Wasserführung entlang der Außenseite der Stahlstrukturen an Boden- und Seitenwänden des Kernfängers erfolgt in verschiedenen Konzepten durch unterschiedliche ausgelegte Kühlkanalgeometrien, in denen der Wärmeübergang unter Siedebedingungen erfolgt und es folglich zu einer Zweiphasenströmung kommt. Der Stoff- und Wärmetransport durch diese Kühlkanäle soll vom Kernfängermodell nicht bis ins Detail der Mehrphasenströmung mechanistisch berechnet werden. Stattdessen sollen vereinfachte Ansätze zum Einsatz kommen, mit denen der Einfluss der Wasserzirkulation bei der Kühlung der Schmelze im Kernfänger insgesamt auf die Thermohydraulik im SB in guter Näherung berücksichtigt werden kann.
- Nach oben gibt es direkten Kontakt zwischen Schmelze und Wasser. Diese Schnittstelle ist vergleichbar mit der gefluteten Situation bei MCCI und könnte prinzipiell vom MCCI-Modell in COCOSYS wiedergegeben werden, wenn beim Ansatz für den nach oben gerichteten Wärmeübergang aus der Schmelze berücksichtigt wird, dass die Schmelze langfristig nicht mit Gasblasen wie bei MCCI durchsetzt wird. Ferner muss berücksichtigt werden, dass langfristig freigesetzte Spaltprodukte aus der Schmelze diese in der Wasservorlage über der Schmelze zurückgehalten werden können (Pool Scrubbing).
- Im Kernfänger von EPR oder WWER werden Opfermaterialien vorgehalten, die nach Eintrag von Schmelze erschmolzen werden und Sauerstoff für die Oxidation von Metallen in die Schmelze einbringen und die Schmelze konditionieren. In Bezug auf die Konditionierung ist es wichtig, eine mögliche Schichtenumkehr aufgrund von Dichteänderungen der Schmelzeschichten sicher zu prognostizieren.
- Beim EPR gibt es zunächst eine zeitlich begrenzte MCCI-Phase in der Reaktorgrube, während der die Schmelze konditioniert wird, bevor sie in den Kernfänger überführt wird. Auch im Kernfänger gibt es eine begrenzte Phase von MCCI, bevor

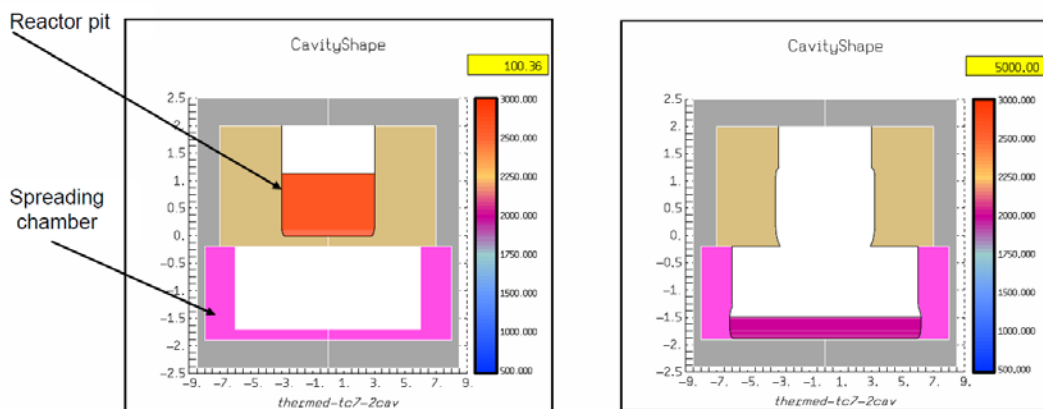
die Schmelze in Kontakt mit den gekühlten Strukturen tritt. Das Kernfängermodell hat somit einen deutlichen Bezug zum Vorgang der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI).

Es ist daher naheliegend, das verfügbare MCCI-Modell in COCOSYS für den Eintritt einer neuen Randbedingung, nämlich die Kontaktbildung zwischen Schmelze und gekühlten Strukturen im Boden und Seitenwandbereich, zu erweitern.

#### 4.3.2 Kernfängermodelle in ASTEC, MELCOR und SOCRAT

##### 4.3.2.1 ASTEC

In ASTEC V2.1 ist ein Kernfängermodell verfügbar, das speziell für Anwendungen auf den EPR entwickelt wurde. In diesem Modell wird die Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der Reaktorgrube des EPR und im Kernfänger mit dem MCCI-Modell MEDICIS berechnet, das auch Grundlage für das CCI-Modul in COCOSYS ist. Dazu war in ASTEC/MEDICIS die Funktionalität von MEDICIS entsprechend erweitert worden, um einen Übertrag von Schmelze zwischen zwei Kavernen (Kaverne 1: Reaktorgrube; Kaverne 2: Kernfänger) innerhalb einer einzigen laufenden MEDICIS-Rechnung durchzuführen. Nach Durchschmelzen des Opferbetons in der Reaktorgrube bis zum Erreichen des Verschlusses zum Ausbreitungskanal („Melt Discharge Channel“, vgl. Abb. 4.16) wird MCCI in einer erweiterten Kontur (Abb. 4.18, rechts) gerechnet.



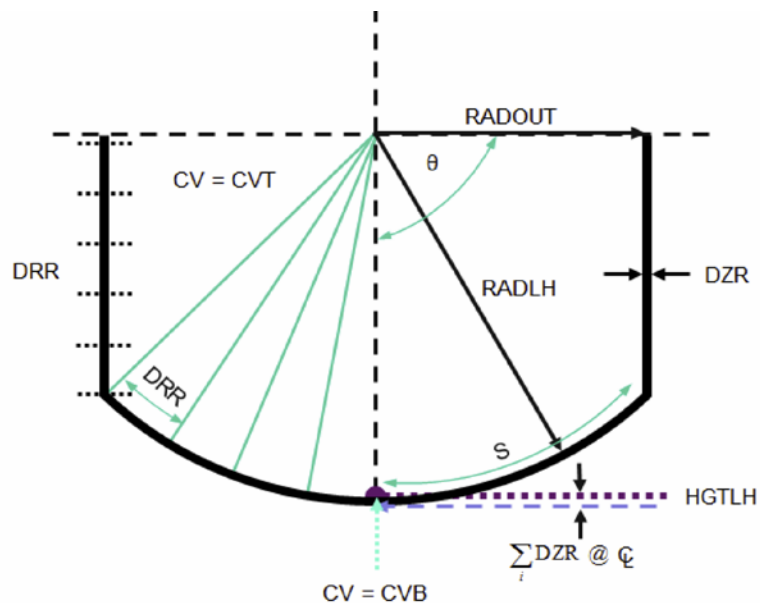
**Abb. 4.18** Konzept der zwei Kavernen in ASTEC für die Anwendung auf den EPR (aus /CRA 11/)

Der Schmelzpool wird in die neue Kontur verlagert und – je nach Nutzer-Eingabe – einer anderen thermohydraulischen Zone für den Massen- und Energieaustausch zugeordnet. Bei der Verlagerung wird im Hinblick auf besondere Fragestellungen beim EPR der Volumenstrom zwischen erster (Reaktorgrube) und zweiter Kaverne (Kernfänger) ausgewertet und zur Annäherung der Ausbreitungsfläche und des Flutungszeitpunktes über einen vereinfachten Ansatz benutzt. Diese Informationen sind rein diagnostischer Natur und haben keinen Rückfluss auf die MCCI-Simulation im Kernfänger. Eine atmosphärische Strömungsverbindung kann beim Durchschmelzen der ersten Kaverne und Umverlagerung der Schmelze in die zweite Cavity aktiviert werden. Gegenüber dem Mehr-Kavernen-Konzept in COCOSYS besteht bei dem Ansatz in ASTEC die Einschränkung, dass zu einer Zeit nur ein Schmelzpool „aktiv“ sein kann.

Zielsetzung der in ASTEC ermöglichten Anwendung ist die Auswertung des maximalen Wärmestroms auf die Stahlstruktur zum Zeitpunkt des Durchschmelzens. Diese Auswertung wird zu dem Zeitpunkt durchgeführt, in welchem die maximale Erosionstiefe (seitlich oder axial) die Dicke der Opferbetonschicht erreicht. Zu diesem Zeitpunkt wird ein Kontakt zwischen Schmelze und Stahlstruktur des Kernfängers unterstellt. Auf der Basis dieser Wärmestromdichte werden unter der Annahme stationärer Wärmeleitung maximale Temperaturen in der Stahlstruktur berechnet. Daraus ergibt sich eine Abschätzung für eine mögliche Schädigung der Stahlstruktur aufgrund von thermischer Belastung.

#### **4.3.2.2 MELCOR**

Das „Core Catcher“-Modell in MELCOR ermöglicht bei Nutzung des Lower-Head-Containment-Modellpaketes (LHC) /HUM 17/ die Berücksichtigung des Wärmeübergangs von aus dem RDB ausgetragenen Kern- und Strukturmaterial („Debris“) auf eine Kernfängerstruktur innerhalb der thermohydraulischen Simulation der entsprechenden Zone. Beim Kernfänger handelt es sich um eine axialsymmetrische Plattenstruktur, bestehend aus einem gekrümmten oder flachen Bodenteil und senkrechten Wänden.



**Abb. 4.19** Schematische Darstellung eines Kernfängers in MELCOR /HUM 17/

Das Kern- und Strukturmaterial des im Kernfänger abgelagerten Coriums wird als eine einheitliche, vermischte Schicht angenommen, in welcher an kalten Oberflächen (zur Atmosphäre und zur Plattenstruktur) Krustenbildung auftritt. Die Plattenstruktur tauscht nach oben und unten Wärme mit der Atmosphäre bzw. einem Wasserpool aus sowie nach oben mit dem Kernmaterial. Ein Versagen der Plattenstruktur wird anhand verschiedener Kriterien prognostiziert: Kriechen, Überdruck, Übertemperatur. Nach Versagen des Kernfängers wird eine Umverlagerung des Kernmaterials auf den Boden der Zone und Beginn der Schmelze-Beton-Wechselwirkung angenommen. Für die Plattenstruktur werden die Enthalpieströme entsprechend der vom Nutzer gewählten Randbedingungen und Gitterzellen integriert, um den Zustand des Kernfängers zu berechnen. Der Kernfänger kann auch mit anfänglich vorhandenem Material vorbeladen werden, was prinzipiell für die möglichen Aufschmelzprozesse zur Konditionierung der Schmelze wie z. B. beim EPR- oder WWER-Kernfänger von Interesse sein könnte. Aktuell können aber nur bestimmte Elemente und Verbindungen vorgegeben werden:  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , oxidierter Stahl ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ),  $\text{UO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ , Al, Stahl, U, und Zr.

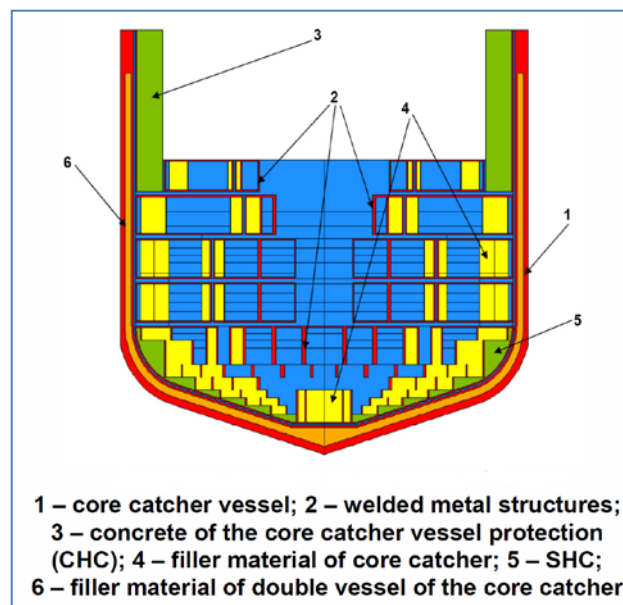
#### 4.3.2.3 SOKRAT

Bei dem Kernfänger der neuen Generation von WWER-Reaktoren handelt es sich um das weltweit einzige bislang in einer betriebenen Anlage realisierte Kernfängerkonzept überhaupt. Vom russischen Institut IBRAE wurde für Analysen dieses Kernfängerkon-

zeptes das Modell HEFEST für den Anlagencode SOKRAT mit verschiedenen Kooperationspartnern erstellt. Dieses Rechenmodell simuliert die folgenden Phänomene /AST 10/:

- Wechselwirkung zwischen Schmelze und Opfermaterial/Beton
- chemische Reaktionen in der Schmelze
- Ausbildung von Schichtungen und mögliche Inversion der Schichtungsfolge
- Wärmeaustausch zwischen Schmelze und Kernfängerstruktur
- Krustenbildung an den Oberflächen der Schmelze
- Wärmeaustausch zwischen Kernfängerstruktur und Kühlwasser mittels Wärmeübergangskorrelationen
- Wechselwirkung zwischen Wasser und Oberflächen
- Produktion von nicht-kondensierbaren Gasen (wie z. B. Sauerstoff und Wasserstoff)

Eine wichtige Eigenschaft dieses Codes ist es, dass die Volumen- und Flächenverhältnisse der verschiedenen Strukturen im Kernfänger, insbesondere die Vorgabe von Opfermaterial, in einer zweidimensional axialsymmetrischen Anordnung realitätsnah angenähert werden können, wie in Abb. 4.20 gezeigt.



**Abb. 4.20** Geometrisches Modell für die Analyse des Kernfängers mit SOKRAT/HEFEST /AST 10/

### 4.3.3 Grundzüge eines Modellkonzeptes für COCOSYS

Der Vergleich der Konzepte von Kernfängern in Abschnitt 4.3.1 mit bislang verfügbaren Modellen für die Analyse von Kernfängern in Abschnitt 4.3.2 lässt den Schluss zu, dass ein Kernfängermodell in COCOSYS basierend auf dem verfügbaren CCI-Modell erstellt werden kann. Das CCI-Modell beherrscht bereits einige wichtige Vorgänge wie das Aufschmelzen von Materialien, die Chemie in der Schmelze, freier Kontakt der Schmelzeoberfläche mit Wasser. Gegebenenfalls muss für die Simulation wichtiger spezieller Materialien die Datenbasis um diese erweitert werden. Dies ist sowohl in den Konzepten von CCI-Modell (die Berücksichtigung von Stoffen in der Energie und Massenerhaltung betreffend) und Datenbasis möglich, erfordert aber die detaillierte Kenntnis der verwendeten Materialien. Es ist auch prinzipiell möglich, die CCI-Simulation der Schmelze im Kontakt mit nicht-erodierten Strukturen fortzuführen. Diese Eigenschaft kann benutzt werden, um den Wärmeaustausch zwischen einer permanenten Struktur (Kernfänger), für die dann die Energiebilanz (Wärmeleitung) in COCOSYS/THY berechnet werden könnte, zukünftig mit der Simulation der darin befindlichen Schmelze durch das CCI-Modul zu koppeln. COCOSYS/THY müsste dann die Integrität des Kernfängers aufgrund verschiedener Kriterien ähnlich wie in MELCOR überwachen. Bei einem Versagen des Kernfängers sollte dann (je nach Design der Anlage) eine Umverlagerung der Schmelze entsprechend des Konzeptes für mehrere Schmelzepools in COCOSYS/CCI simuliert werden können, mit einem möglichen Beginn der Schmelze-Beton-Wechselwirkung unterhalb des Kernfängers.

Folgende Aussagen beschreiben demnach das Konzept eines Kernfängermodells für COCOSYS:

- Vorgabe von permanenten, plattenförmigen Strukturen (horizontal/vertikal) eines Kernfängers in COCOSYS/THY wie übliche Wärmestrukturen. Alle Oberflächen des Kernfängers sind entsprechend dem existierenden Modell für Wärmestrukturen einzelnen COCOSYS-Zonen zugeordnet.
- Wenn Schmelze in den Kernfänger gelangt (aus dem Primärkreis oder aus einem anderen CCI-Pool) wird im Kernfänger (d. h. in der Zone, in der der Kernfänger liegt) ein Schmelzepool mit dem CCI-Modell wie gehabt gestartet. Zu Beginn der CCI-Rechnung soll – ähnlich wie im reinen CCI-Modell – ein Ersetzen der horizontalen Oberfläche der Kernfängerstruktur in THY durch die in CCI gerechnete Oberfläche der freien Schmelze erfolgen.



- Die Präsenz von Opfermaterial wird intern, d. h. im CCI-Modell, als erodierbare Schicht in axialer Richtung dargestellt. Das Aufschmelzen des Materials erfolgt ein-dimensional, um die Interaktion an der freien Oberfläche der Schmelze nicht zu beeinflussen, d. h. die freie Oberfläche der Schmelze bleibt konstant. Das tatsächlich abweichende Flächenverhältnis zwischen Schmelze und Opfermaterial ist eine komplexe Funktion in Abhängigkeit des Füllstandes des Kernfängers mit Schmelze- und vom Fortschritt des Aufschmelzvorganges. Diese soll per Nutzereingabe vorgegeben werden und in der Berechnung des erschmolzenen Massenstroms von Opfermaterial als multiplikativer Parameter berücksichtigt werden. Ein genauere Berücksichtigung der tatsächlichen Geometrie der Einlagerung von Opfermaterial im Kernfänger wie mit SOKRAT/HEFEST in Abb. 4.20 dargestellt wird als nicht zielführend erachtet, da die Wärmeübergänge an vertikalen und horizontalen Strukturen nicht genau bekannt sind.
- Nach Erreichen eines kritischen Volumens bzw. einer kritischen Tiefe beim Aufschmelzen des Opfermaterials soll der CCI-Modus von „Erosion“ auf „Inert“ umgestellt werden, d. h. der Schmelzepool wird in der Folge ohne weiteren Aufschmelzvorgang simuliert.
- Die inneren Flächen der Wärmestruktur „Kernfänger“ werden ab diesem Zeitpunkt mit dem nicht-erodierenden Schmelzepool, aus welchem weiterhin Wärmeabgabe erfolgt, gekoppelt, da jetzt ein direkter Kontakt angenommen wird. Die vorausseilende Wärmeleitung bis zu diesem Zeitpunkt wird vernachlässigt. Die Außenflächen des Kernfängers sind bereits mit COCOSYS-Zonen gekoppelt. Die Aufheizung der Struktur wird in COCOSYS/THY gerechnet.
- Die Flutung der Zone und die Zirkulation von Wasser in der Zone muss im Hinblick auf die Einbindung des Kernfängers ertüchtigt werden. Für die Vorgabe von Wärmeübergängen zwischen Kernfängerstrukturen und Atmosphäre/Wasser sollen Nutzereinflüsse möglich sein. Insbesondere kann für die Kühlung mit Wasser auf der Außenseite (z. B. in den Kühlkanälen beim EPR) eine andere Fläche zur Verfügung stehen als für die schmelzezugewandte Seite der Kernfängerstruktur. Für die Wärmeübergänge zwischen Wasser und Kernfängerstruktur (Siedewärmeübergang) sollten spezifische Modelle für das jeweilige Design (unterschieden nach Boden, Seitenwand) zum Einsatz kommen. Hier liegen der GRS zurzeit keine Informationen vor.
- Nach Erreichen bestimmter Versagenskriterien für die Kernfängerstruktur (durch COCOSYS/THY überwacht) muss durch COCOSYS ein Versagen des Kernfängers

angezeigt werden und an den CCI-Pool übermittelt werden. Je nach Design der Anlage bzw. Nutzervorgabe kann dann eine Umverlagerung der Schmelze in einen neuen Pool (in der gleichen oder in einer anderen Zone) erfolgen mit einem erneuten Beginn der Interaktion zwischen Schmelze und Strukturen (MCCI).

- Die Diskussionen zu verfügbaren Kernfängermodellen in Rechenprogrammen für schwere Störfälle (z. B. beim IAEA Technical Meeting zum Stand und Evaluierung von Severe Accident Codes, 2017) zeigt, dass die Entwicklung von detaillierten Modellen aufgrund mangelnder Verfügbarkeit von spezifischen Daten (zu konstruktiven technischen Details und zu verwendeten Materialien), die proprietär sind, nicht möglich ist.
- Die detaillierten thermo-dynamischen Vorgänge (Bildung von Gleichgewichten, komplexen Schichtungsabfolgen etc.) sollen nicht betrachtet werden, weil die damit verbundenen Unsicherheiten zu groß für die hier beabsichtigte Modellbildung sind.

Auf der Basis dieses Konzeptes sollen die Arbeiten zur Implementation eines Modells in COCOSYS im geplanten Anschlussvorhaben durchgeführt werden.

#### **4.4 Modellerweiterungen für die Ausbreitung von Schmelze aus der Reaktorgrube in angrenzende Raumbereiche mit Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (Modul CCI)**

Für die durchgängige und realitätsnahe Simulation von Phänomenen nach Austrag von Schmelze in die Reaktorgrube im Sicherheitsbehälter sowie ggf. einer weiteren Ausbreitung in benachbarte Räume (z. B. nach Durchschmelzen von Wand- oder Bodenstrukturen) ist eine sukzessive oder auch parallele Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI) in verschiedenen Räumen im Containment erforderlich. Hierzu sind in dem Vorhaben entsprechende Erweiterungen durchgeführt worden, sodass die Funktionalität für Anwendungsrechnungen in COCOSYS zur Verfügung steht.

##### **4.4.1 Grundzüge der Implementation und benötigte Eingabedaten**

Die Anbindung von COCOSYS-Modulen an den COCOSYS-Haupttreiber mittels Prozesskommunikation erlaubt prinzipiell das mehrfache Aufrufen eines Moduls. Die verschiedenen Instanzen des CCI-Moduls zur Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung sind eigene Prozesse, wobei dem Prozess nur alle prozesseigenen Daten sowie alle Daten, die mit dem COCOSYS-Treiber ausgetauscht werden, zur Verfügung stehen.

Im ursprünglichen Konzept der Anbindung des CCI-Moduls an COCOSYS muss das CCI-Modul als Hauptmodul im Abschnitt unterhalb des Kontrollwortes C---- STR\_MODULE aufgeführt werden. Dort wird dieser Instanz des CCI-Modules als Parameter ein Verzeichnisname mitgegeben, in welchem nach Aktivierung des CCI-Moduls (sobald Schmelze in die Reaktorgrube gelangt) detaillierte CCI-spezifische Ausgabedaten geschrieben werden. Dieses Konzept bleibt erhalten und für mehrere mögliche CCI-Pools müssen unterhalb des Kontrollwortes C---- STR\_MODULE dann mehrere Einträge gelistet werden:

```
C---- STR_MODULE
  THY  ramain      PCxxxx
  AFP  afpmain    PCxxxx
  CCI  'ccimain.exe  ccidata'    PCxxxx
  CCI  'ccimain.exe  ccidata2'   PCxxxx
  CCI  'ccimain.exe  ccidata3'   PCxxxx
```

In dem Beispiel oben werden drei Instanzen des CCI-Moduls „ccimain.exe“ vorgesehen, deren Ausgabedateien in drei verschiedene Verzeichnisse geschrieben werden. Für jede Instanz muss zusätzlich eine Synchronisierungsregel im Abschnitt unterhalb des Kontrollwortes C---- SYNCHRON aufgestellt werden.

Im Beispiel unten wird für alle drei Instanzen, die im Falle von mehr als einer Instanz zur Unterscheidung im Namen den Unterstrich ‚\_‘, gefolgt von der Modulnummer >1 tragen, die Regel ‚INCY‘ gewählt:

```
C---- SYNCHRON
@
  MAIN
@
K---- MAIN
@
  DTRULE
  MIN_B
@
  MODULE  LEVEL  RULE  MAXSTEP
  THY     1     REDU
  CCI     2     INCY
  CCI_2   2     INCY
  CCI_3   2     INCY
  AFP     2     INCY
```

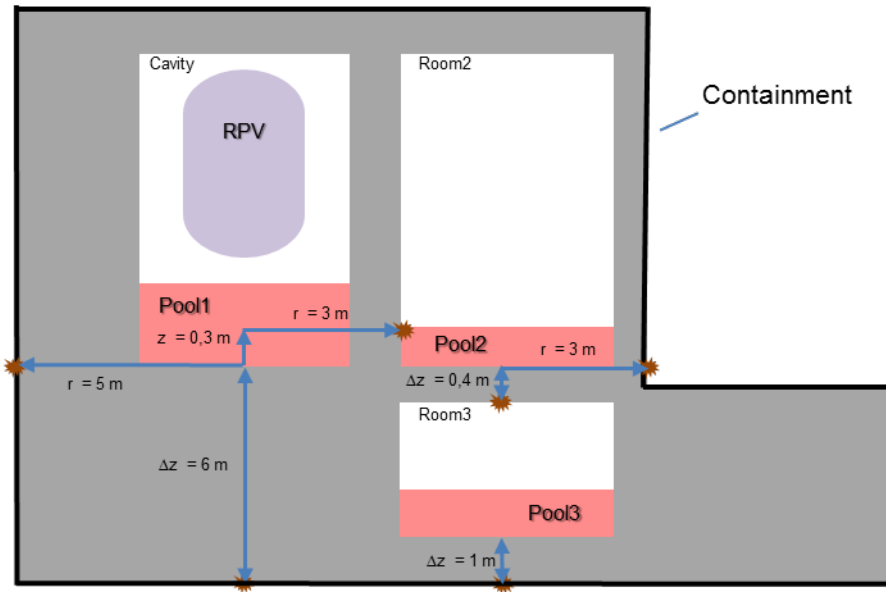
Die Synchronisierung von COCOSYS unter Verwendung des CCI-Moduls ist bislang nur für die Regel ‚INCY‘ für CCI möglich. Dabei werden die CCI-Module auf der Synchronisierungsebene zwei gestartet, d. h. sie berechnen den Zeitschritt nach THY. ‚INCY‘ bedeutet „Inner Cycling“: Nur die Ergebnisse zu den Synchronisierungszeitpunkten werden ausgetauscht.

Für jede Instanz eines CCI-Moduls gibt es im Eingabedatensatz einen eigenen Abschnitt mit eigenen Eingabedaten. Diese Liste von CCI-Pool-Abschnitten wird eingeleitet durch das Kontrollwort `C---- CAVITY`. Jeder CCI-Pool-Abschnitt wird eingeleitet durch ein frei wählbares Pseudokeyword, das den entsprechenden Pool mit einem eigenen Namen innerhalb des Eingabedatensatzes kennzeichnet.

Beispiel: `P---- Pool1`, `P---- Pool2`, ...

Für jeden Pool wird eine Startbedingung, eingeleitet durch das Kontrollwort `SEQ_STA`, und eine Stop-Bedingung, eingeleitet durch das Kontrollwort `SEQ_STO`, für die Einbettung in der möglichen Sequenz von CCI-Pools definiert. Gestartet werden kann die Simulation eines MCCI-Pools entweder – in der Reaktorgrube – durch den Input (in diesem Fall muss die Zeit `TRUPT` des RDB-Versagens vorgegeben werden) oder durch den gekoppelten Code `ATHLET-CD` mit dem von `ATHLET-CD` berechneten Versagenszeitpunkt des RDB. Des Weiteren – in allen Räumen – durch Übertrag von Schmelze aus einer anderen CCI-Instanz, wenn von dort eine vorher definierte maximale axiale oder seitliche Erosionstiefe bis zur Durchdringung in den Zielraum erreicht wurde. In letzterem Fall wird im Input unter `SEQ_STA` bzw. `SEQ_STO` auf den Namen von Start- und Zielpool Bezug genommen.

Als Beispiel wird eine Anordnung von drei Räumen `Cavity`, `Room2`, `Room3` entsprechend der Abb. 4.21 betrachtet. Aufgabe des Anwenders ist es hier, aus der Art der Nachbarschaft der drei Räume zueinander entsprechende Daten bereitzustellen die den zu erwartenden Erosionsfortschritt in radiale und axiale Richtung berücksichtigen. Im Beispiel kommt es zu einem seitlichen Übertrag von Schmelze zwischen `Cavity` und `Room2` und sukzessiv nach Durchdringung der Decke in `Room2` nach `Room3`. Ferner kann es eine Containment-Durchdringung aus `Room2` in radialer Richtung sowie aus `Room3` in axialer Richtung geben. Für den seitlichen Übergang von Schmelze zwischen `Cavity` und `Room2` sollte der Anwender abschätzen, in welcher Höhe vom Boden der anfänglichen `Cavity` aus gesehen eine Penetration wahrscheinlich wäre ( $z = 0,3$  m in Abb. 4.21, diese Koordinate kann auch  $< 0$  sein), oder diese aus einer vorlaufenden Rechnung mit nur einer Grube ermitteln.



**Abb. 4.21** Beispiel für eine Sequenz von MCCI-Pools in den Räumen eines Containments. Das Symbol  $\star$  kennzeichnet einen Pfad der Durchdringung zu Nachbarräumen / zur Umgebung.

```

C----- CAVITY
@
@
P----- Pool1
@
----- SEQ_STA
@   START
    INP
@   TRUPT
    10719.0
----- SEQ_STO
@   STOP
    3.0    0.3    RAD    Pool2    MT1
    5.0    0.0    RAD    RUP
    0.0   -6.0    AXI    RUP
@
----- ZONES
    Cavity
----- SURFACE
    Cavity Cavity Cavfloor 1
...
...
P----- Pool2
@
----- SEQ_STA
@   START
    CCI
@   STARTPOOL
    Pool1
----- SEQ_STO
@   STOP
    0.0   -0.4    AXI    Pool3    MT3
    3.0    0.0    RAD    RUP
@

```

```

----- ZONES
Room2
----- SURFACE
Room2 Room2 Cavfloor2 1
...
...
P----- Pool3
@
----- SEQ_STA
@ START
CCI
@ STARTPOOL
Pool2
----- SEQ_STO
@ STOP
0.0 -1.0 AXI RUP
@
----- ZONES
Room3
----- SURFACE
Room3 Room3 Cavfloor3 1

```

Im genannten Beispiel startet CCI in der Cavity (Pool1) bei  $t = 10719$  s. Die Schmelze-Beton-Wechselwirkung in Room2 (Pool2) kann durch Versagen der Cavity (Pool1) im Falle eines seitlichen Schmelzedurchbruchs initiiert werden (vgl. SEQ\_STA von Pool2). Wenn die seitliche Erosionskontur in der Cavity (Pool1) eine radiale Koordinate von  $r = 3$  m erreicht, gibt es einen Durchbruch von Schmelze in den Room2 (Pool2) auf der Höhe  $z = 0,3$  m.

Bei einer axialen Erosionstiefe von  $z = -0,4$  m in Room2 (Pool2) kann die Schmelze in den Room3 (Pool3) abfließen, in dem nachfolgend die Schmelze-Beton-Wechselwirkung gestartet wird (vgl. SEQ\_STO von Pool2 und SEQ\_STA von Pool3). Bei einer radialen Erosion bis auf  $r = 3,0$  m in Room2 (Pool2) erfolgt der Stopp der Rechnung, da ein Containment-Versagen (RUP) angenommen wird. In Room3 (Pool3) kann ein Containment-Versagen (RUP) bei einer axialen Erosionstiefe von  $z = -1$  m erreicht werden. Die radiale Erosionstiefe in Room3 (Pool3) hat keinen Einfluss auf die gerechnete Sequenz.

Eine Instanz des CCI-Moduls ist an eine Wärmestruktur in einer Zone angebunden. Diese Wärmestruktur tauscht mit der thermohydraulischen Zone bzw. mit anderen Strukturen in dieser Zone Wärme über Konvektion und Strahlung aus, und wird nach Aktivierung des CCI-Moduls im Fall des Eintrags von Schmelze in den Pool durch die Oberfläche der Schmelze ersetzt. Der Link zwischen CCI-Modul, Zone und Struktur erfolgt mit der Eingabestruktur ----- ZONES bzw. ----- SURFACE. Unter dem Kontrollwort ZONES werden die Zonen aufgelistet, aus denen der Raum der Reaktorgrube besteht. Diese Liste von Zonen wird zur Berechnung gemittelter thermohydraulischer Daten für

den gesamten Raum der Reaktorgrube benutzt, die als Randbedingung für den MCCI-Pool von Bedeutung sind, z. B. der Druck in der Reaktorgrube. Unter dem Kontrollwort `SURFACE` wird die Zone innerhalb der Cavity bestimmt (Eingabeparameter `ZBMELT0` und `ZBMELT` müssen laut Benutzer-Handbuch identisch für die Verwendung des CCI-Moduls sein!), in der das CCI-Modul konvektiv übertragene Wärme und Gase in COCOSYS einspeist.

#### **4.4.2 Massen- und Leistungsübertrag zwischen Schmelzepools**

Eine derzeitige Einschränkung des Modells ist noch darin zu sehen, dass der Massenübertrag zwischen zwei Schmelzepools nur einmalig berechnet wird, und zwar ausschließlich vom „sendenden“ Schmelzepool zu dem „empfangenden“ Schmelzepool. Die simulierten Schmelzepools sind nach ihrem Entstehen weitgehend entkoppelt. Ferner wird noch keine Transportzeit zwischen den beiden Schmelzepools berücksichtigt, d. h. die Schmelze-Beton-Wechselwirkung im empfangenden Raum beginnt sofort nach Übertrag, vorausgesetzt, dass die Mindestmasse an Schmelze erreicht wird. Diese einschränkenden Annahmen wurden aus Gründen der numerischen Stabilität getroffen: Eine Modellierung des Massentransports in Abhängigkeit des sich einstellenden geodätischen Höhenniveaus der Schmelzeoberfläche in zwei verbundenen Räumen (die prinzipiell realistischer wäre) müsste mit großem Aufwand auch die sich ggf. einstellenden, starken Rückkopplungen zwischen den Schmelzepools beherrschen. Starke Rückkopplungen in Form von Stabilitätsproblemen sind zu erwarten, da die freie Oberfläche der Schmelze sich durch den Gasgehalt in der Schmelze einstellt und dieser abhängig von der Erosionsgeschwindigkeit ist. Die Erosionsgeschwindigkeit wiederum hängt von der inneren Leistung, der Kontaktfläche zum Beton hin und insbesondere von der angenommenen Konfiguration der Schmelze (vermischt oder geschichtet ab). Da bereits bei IRSN erhebliche Stabilitätsprobleme mit MEDICIS unter Verwendung des dynamischen Konfigurations-Evolutionsmodells aufgetreten sind (Oszillationen zwischen zwei Konfigurationszuständen), wurde in Anbetracht von weiteren Unsicherheiten bei Anfangs- und Randbedingungen von einer engeren Kopplung zwischen den parallelen bzw. sukzessiven MCCI-Pools zunächst abgesehen. Anwendungsrechnungen werden zeigen, inwiefern Verbesserungen nötig sind.

Der Massenübertrag wird in Abhängigkeit der Richtung (axial oder radial) bei der Strukturdurchdringung berechnet:

- In axialer Richtung (ORI = AXI im Abschnitt unter SEQ\_STO) wird angenommen, dass der sendende Pool sich komplett entleert. Die gesamte Masse wird an den empfangenden Pool übertragen. Der sendende Pool geht auf Leerlaufbetrieb.
- In radialer Richtung (ORI = RAD im Abschnitt unter SEQ\_STO) wird nur der Massenanteil an Schmelze übertragen, der oberhalb der für den Ort der Durchdringung angenommenen axialen Koordinate steht ( $z = 0,3$  m für den Übergang von Schmelze zwischen Cavity und Room1 in Abb. 4.21). Dabei wird die Konfiguration der Schmelze im sendenden Pool berücksichtigt, d. h. wenn der Durchdringungsort im Bereich der oberen Schicht liegt, gibt es nur einen Masseübertrag aus der oberen Schicht. Wenn der Durchdringungsort im Bereich der unteren Schicht liegt, gibt es einen vollen Übertrag der oberen Schicht und einen Teil der unteren Schicht.

Die im Schmelzepool freigesetzte Nachzerfallswärmeleistung kann prinzipiell mittels FIPISO und FIPHOST in COCOSYS berechnet werden, wenn das Inventar an Spaltprodukten bekannt ist. Diese Funktionalität steht derzeit für gekoppelte Schmelzepools noch nicht zur Verfügung. Derzeit erfolgt der Übertrag der Nachzerfallswärmeleistung zwischen den Schmelzepools nach folgendem vereinfachten Ansatz:

- Wird der Schmelzeaustrag in die Cavity (Pool1) über ATHLET-CD gestartet, so wird die integrale Nachzerfallswärmeleistung der ausgetragenen Schmelze zum Zeitpunkt des RDB-Versagens von ATHLET-CD nach COCOSYS übermittelt. In COCOSYS kann eine zeitliche Abnahme der Leistung über eine Zeittabelle, die für die Schmelze in Pool1 vom Anwender im Eingabedatensatz vorgegeben werden kann, berücksichtigt werden. Diese explizite Zeittabelle in der Form (Zeit, Leistung) wird relativ auf den zum Start des MCCI von ATHLET-CD übertragenen Leistungswert angerechnet. Z. B. ein Rückgang der Leistung in der Zeittabelle innerhalb von 24 h um 5 % bedeutet ein fünfprozentiges Abklingen der von ATHLET-CD bereitgestellten Leistung innerhalb desselben Zeitraumes.
- Wird der Schmelzeaustrag in die Cavity (Pool1) über den User-Input gestartet, erhält Pool1 im Input bereits eine explizite Zeittabelle für die Leistung integral oder getrennt nach den beiden Schmelzeschichten (Oxid und Metall).
- Liegt die Nachzerfallswärmeleistung für den sendenden Pool als integrale Zeittabelle (als Integral über beide Schichten) vor, so wird für den empfangenden Pool diese auf den relativen Anteil der in den empfangenden Pool übertragenen Schmelze gesetzt. Die Leistung im sendenden Pool wird auf den komplementären Anteil gekürzt.



- Liegt die Nachzerfallswärmeleistung für den sendenden Pool für beide Schichten getrennt vor, so wird für den empfangenden Pool eine integrale Tabelle basierend auf dem relativen Anteil der in den empfangenden Pool übertragenen, jeweiligen Schmelzefraktionen angelegt. Die Leistungstabellen im sendenden Pool werden auf den jeweils komplementären Anteil gekürzt.
- Für alle dynamisch in der Sequenz später (nach Durchdringung von Strukturen) entstehenden Schmelzepools muss die Option PDECAY = 2 gesetzt werden, d. h., dass die Leistungsverteilung auf die möglicherweise entstehenden Schichten relativ zu den Elementvorkommen in den beiden Schichten entsprechend der gesondert im Eingabedatensatz vorzugebenden Atomwichtungen erfolgt. Falls nur ein durchmischter Pool angenommen wird, wird alle Leistung in der einen Schicht entbunden.

#### 4.4.3 Konfiguration der Schmelzepools

Für jeden Schmelzepool in der möglichen Abfolge der Sequenz müssen in weiteren Eingabedaten Annahmen über die Konfiguration dieses Pools festgelegt werden. Der Schmelzepool kann entweder homogen vermischt (MIXED) oder stratifiziert vorgegeben werden. In der stratifizierten Variante kann eine stationäre Schichtung Oxid unter dem Metall (O/M, bei geringem Anteil von Beton im Oxid realistisch) oder Oxid über dem Metall (M/O, bei höherem Anteil von Beton im Oxid realistisch) vorgegeben werden. Soll die Konfiguration vom Code dynamisch über das eingebaute Schichtungskriterium berechnet werden, muss für den Pool das dynamische Konfigurationmodell mit EVOL = 1 angewählt werden, und es müssen zwei initiale Schichten vorgegeben werden:

1. Eine Stellvertreter-Schicht (Dummy) vom Typ STRAT, welche später ggf. eine entstehende Metallschicht aufnehmen kann.
2. Eine vermischte Schicht vom Typ OXID, in der anfänglich die gesamte Schmelze (Oxide und Metalle) eingetragen wird.

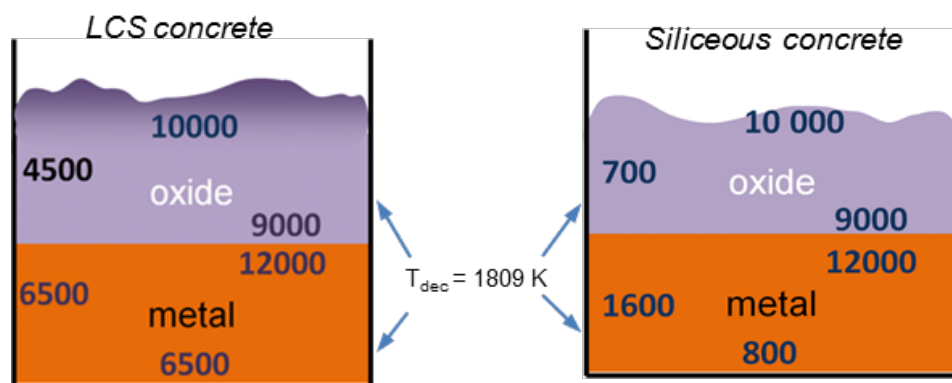
Beginnend mit einem vermischten Zustand (MIXED in Fall 4, Tab. 4.5) geht das Modell bei Eintreffen des Entmischungskriteriums (d. h. bei Unterschreiten der kritischen Gasgeschwindigkeit in dem vermischten Layer) in den geschichteten Zustand. Dabei wird die Abfolge von Schichten durch das Verhältnis der Dichten zwischen den beiden Schichten bestimmt. Hierbei kann es dann noch zu einer Umschichtung aufgrund veränderlicher Dichteverhältnisse kommen.

Bei z. B. zwei definierten Pools in Abfolge und jeweils 4 möglichen Konfigurationen (vgl. Tab. 4.5) für einen Pool können die Vorgaben im Eingabedatensatz bereits 16 verschiedene Kombinationen aufweisen. Der Einfluss der Auswahl von Kombinationen bei der Poolkonfiguration ist noch unklar und sollte gut bedacht werden.

**Tab. 4.5** Mögliche Konfiguration eines CCI-Pools im Eingabedatensatz

	EVOL	SCHICHTUNG
1	0	O/M
2	0	M/O
3	0	MIXED
4	1	MIXED

Für jede Schicht muss in der Eingabedatei ein Satz von Wärmeübergangskoeffizienten angegeben werden. In Nachrechnungen zu MOCKA-Versuchen mit einer geschichteten Schmelze (M/O) und Bewehrungseisen im Beton haben sich Wärmeübergangskoeffizienten entsprechend der Abb. 4.22 als geeignet erwiesen. Hierbei ist zu beachten, dass für prototypische,  $UO_2$ -haltige Oxidschmelzen aufgrund niedrigerer Wärmeleitfähigkeit im Vergleich zu der MOCKA-Schmelze kleinere Wärmeübergangskoeffizienten erwartet werden können und dass die Unsicherheiten insgesamt relativ groß sind. Dies gilt insbesondere für die Wärmeübergänge zwischen den Schichten. Die Modellunsicherheiten sollen in einer Sensitivitäts- und Unsicherheitsstudie zum CCI-Modul in COCOSYS im Rahmen des Validierungsvorhabens RS1544 untersucht werden.



**Abb. 4.22** Empirisch ermittelte Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze in Nachrechnung der MOCKA-Versuche bei KIT /BAK 17/

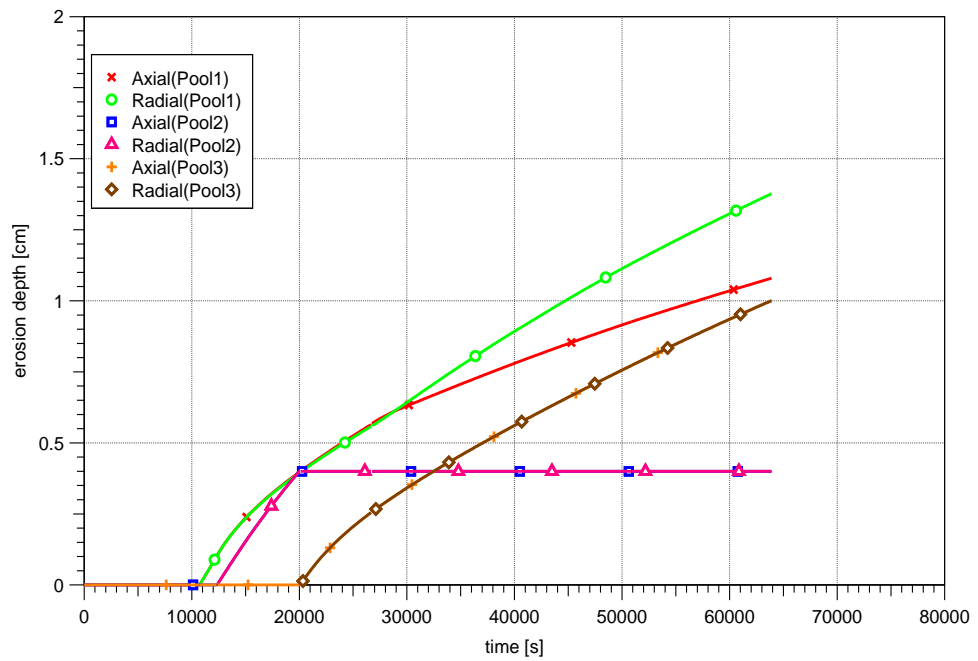
#### 4.4.4 Beispielrechnung

Das oben besprochene Beispiel der Abb. 4.21 wurde in einer COCOSYS-Rechnung (im Stand-alone-Betrieb) erfolgreich überprüft. Nach Freisetzung von ca. 100 000 kg Schmelze in die Cavity zu dem im Eingabedatensatz angegebenen Versagenszeitpunkt des RDB (TRUPT = 10 719 s) wird eine willkürlich angenommene Leistung von etwa 28 MW in der Schmelze erzeugt. Die zeitlich vorgegebene Nachzerfallswärmeleistung sinkt von 30 MW bei  $t = 0$  s auf 10 MW bei  $t = 200\,000$  s. Zu Beginn weist die Temperatur bei ca.  $t = 11\,300$  s einen Peak auf, der das Ende der Zirconium-Oxidation markiert. Die angenommene Konfiguration von Pool1 ist anfänglich homogen vermischt, mit der Möglichkeit, sich entsprechend des Entmischungskriteriums zu entmischen (EVOL = 1, Fall 4 in Tab. 4.5). Die Wärmeübergänge sind in seitlicher wie axialer Richtung gleich groß gewählt. Die Entmischung wird aber erst später, bei ca.  $t = 27\,000$  s in Pool1 erreicht, danach liegt die Oxidschicht oberhalb der Metallschicht. Ab diesem Zeitpunkt zeigt die Abb. 4.25 unterschiedliche Temperaturen für Oxid- und Metallschicht in Pool1. Das erste Durchschmelzkriterium in Pool1 (radiale Erosionstiefe von 10 cm, ausgehend von einem anfänglichen Radius von  $r_0 = 2,9$  m, d. h. bei Ankunft der Erosionsfront bei  $r = 3$  m, wie in Abb. 4.21 angedeutet) wird bereits bei  $t = 12\,000$  s erreicht (Abb. 4.23). Beim Übertrag der Schmelze werden 56 000 kg Schmelze, die sich oberhalb der auf  $z = 0,3$  m angenommenen Durchschmelzhöhe (gemessen von dem ursprünglichen Bodenniveau der Kaverne) befinden, – d. h. etwas mehr als die Hälfte der anfänglichen Schmelze – nach Room2 übertragen. Damit teilt sich die integrale Leistung etwa gleichmäßig auf Pool1 und Pool2 auf (Abb. 4.24).

Die angenommene Konfiguration in Pool2 ist eine stationäre Oxidschicht unterhalb der Metallschicht (O/M mit EVOL = 0, Fall 1 in Tab. 4.5). Das erste Durchschmelzkriterium in Room2 (40 cm axiale Erosionstiefe) wird bei ca.  $t = 20\,000$  s erreicht. Weil es sich um ein axiales Durchschmelzkriterium handelt, fließt die gesamte Schmelze (und die gesamte Leistung, s. Abb. 4.24) aus Room2 in Room3 (ca. 92 000 kg).

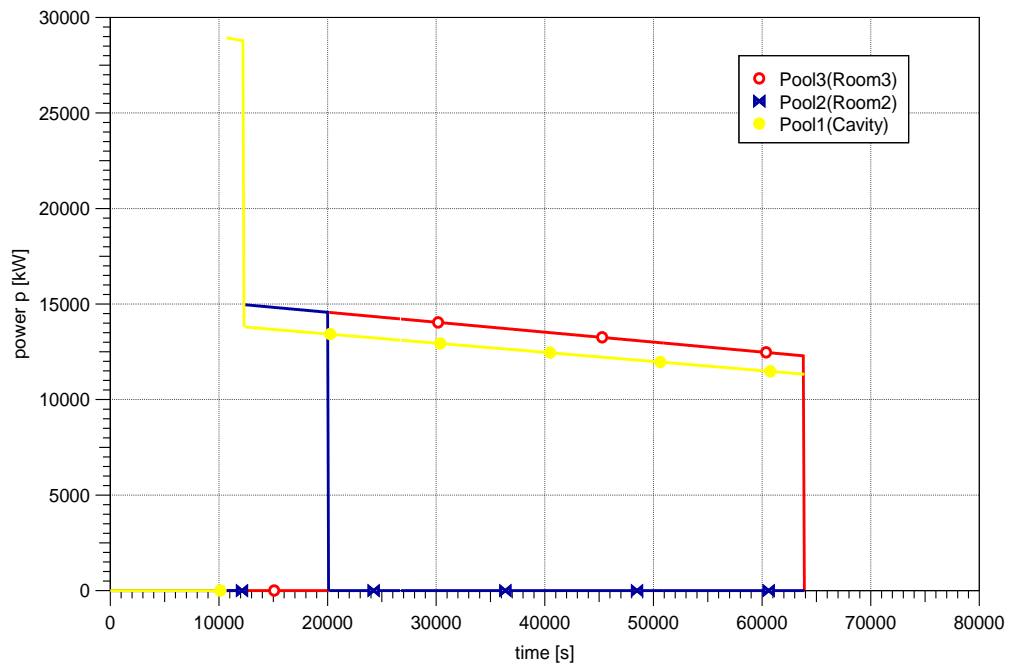
Die angenommene Konfiguration in Pool3 ist eine stationäre vermischte Schicht (MIXED mit EVOL = 0, Fall 3 in Tab. 4.5), daher zeigt Abb. 4.25 nur eine Oxidtemperatur. Auch hier sind die Wärmeübergänge in seitlicher wie in axialer Richtung gleich groß gewählt. Das Kriterium von einer 1 m starken, axialen Erosion in Raum 3 wird bei  $t = 64\,000$  s erreicht. Hier endet die Rechnung, da ein Containment-Versagen angenommen wird.

(COCOSYS) CCI Module

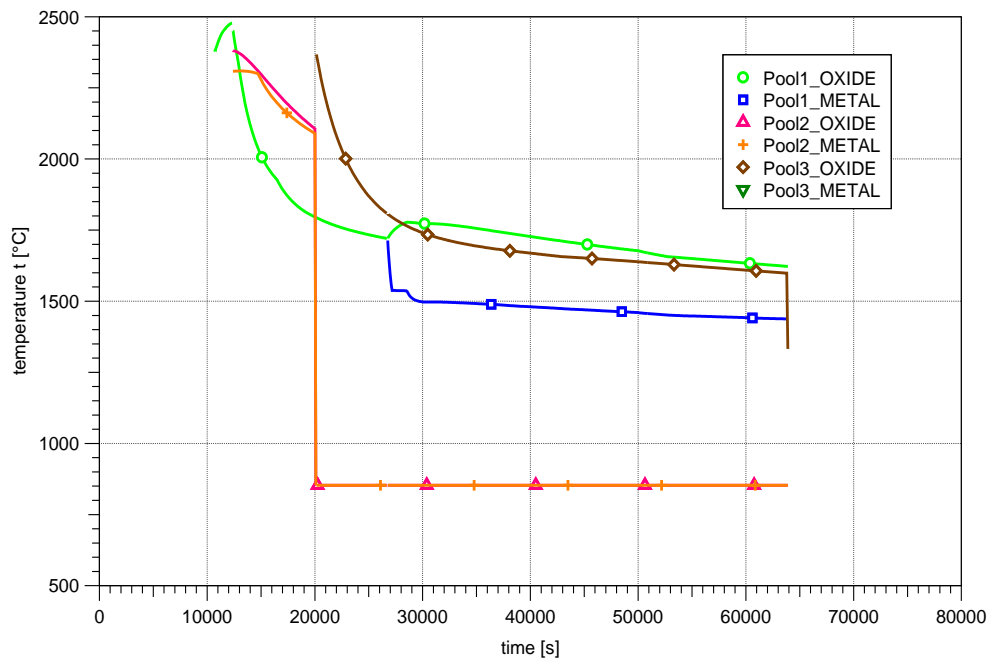


**Abb. 4.23** Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Erosionstiefen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf)

(COCOSYS) CCI Module



**Abb. 4.24** Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Leistungsfreisetzungen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf)



**Abb. 4.25** Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Schmelzetemperaturen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf)

#### 4.4.5 Fazit

Mit der vorgenommenen Modellerweiterung können Fragestellungen, die sich durch sukzessives Vordringen der Schmelze in den verschiedenen Räumen im Sicherheitsbehälter ergeben, in einer ersten Näherung untersucht werden. In einem gezeigten Beispiel der Abb. 4.21 wird die Fragestellung behandelt, wann der Sicherheitsbehälter durch Bodendurchdringung in Room3 versagt. Dazu muss im Beispiel die Schmelze zunächst eine seitliche Betonwand in der Cavity durchdringen, um in Room2 zu gelangen. Dort kann sie bei Durchschmelzen der Decke zwischen Room2 und Room3 in den Room3 abstürzen, von wo ein Freisetzungspfad an die Umgebung nach axialer Betonerosion möglich ist.

Da mit diesen Vorgängen insgesamt noch große Unsicherheiten, z. B. bezüglich der Kenntnis von Anfangs- und Randbedingungen oder bei der ausreichenden Berücksichtigung geometrischer Details, verbunden sind und die Gefahr komplexer numerischer Probleme besteht, wurde für den Umlagerungsprozess eine vereinfachte Darstellung benutzt: In dieser vereinfachten Darstellung kann Schmelze einmalig vom „sendenden“ Schmelzepool zum „empfangenden“ Schmelzepool fließen und ist dann entkoppelt vom

ursprünglichen Schmelzpool. Die einmaligen Umlagerungsvorgänge werden durch Kriterien für maximale Erosionsstärken getriggert und die Ausflussmenge wird auf die Schmelzhöhe über der angenommenen Durchschmelzverbindung im „sendenden“ Schmelzpool zurückgeführt.

Das Modell kann zurzeit nicht einen wiederholten bzw. kontinuierlichen Schmelze-transport zwischen einzelnen Räumen berücksichtigen. Hierbei würde das Aufschäumen der Schmelze einen großen Einfluss ausüben, da dieses die Höhe der freien Oberfläche der Schmelze in einem Schmelzpool beeinflusst. Das Aufschäumen ist von der Gasfreisetzung im jeweiligen Raum, d. h. von der Geschwindigkeit der Erosion und von dem Gasgehalt im Beton, abhängig. Hier gibt es Einflüsse von Schichtungsvorgängen in der Schmelze, die aktuell noch relativ unklar sind. Auch gibt es nach Vergleich mit experimentellen Daten noch Vorbehalte gegenüber dem im CCI-Modul verwendeten Modell für die Ermittlung des Gasgehaltes („Void Fraction“) im Schmelzpool.

Bei einer weiteren Modelleigenschaft, die im Hinblick auf eine zukünftige Verbesserung des Modells wünschenswert wäre, handelt es sich um die Möglichkeit, einen größeren Schmelzpool an mehr als eine thermohydraulische Zelle anzubinden, mit welcher er dann energetisch und stofflich (in Form der Gasfreisetzung) wechselwirken kann. Dies wird beispielsweise für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung im Unfallablauf in Fukushima gefordert, bei der sich die Schmelze wahrscheinlich in dem ringförmigen Bereich außerhalb des „Pedestal“ verteilt hat, welcher in horizontaler Richtung durch mehr als eine Zone im thermohydraulischen COCOSYS-Datensatz dargestellt wird.

Entsprechende Verbesserungen sollen in einem Anschlussvorhaben durchgeführt werden.



## **5 Konsolidierung von Quellcode und Dokumentation**

### **5.1 Konsolidierung von COCOSYS und Aktualisierung und Vervollständigung der Dokumentation**

Zielsetzung von AP4 ist im Wesentlichen die Verbesserung der Verständlichkeit des Quellcodes von COCOSYS mittels geeigneter Dokumentation sowie durch punktuelle Verbesserungen von existierendem Code im Hinblick auf leichtere Les- und Wartbarkeit/Fehleranfälligkeit.

#### **5.1.1 Dokumentation des Quellcodes**

Nach einer kurzen Erprobungsphase ist zu diesem Zwecke das frei verfügbare Werkzeug Doxygen ausgewählt worden und die Verwendung von Doxygen für die Kommentierung von Quelltexten der Module AFP und CCI gestartet worden.

Zunächst wurde das Skript vorbereitet, mit welchem Doxygen die Quellcode-Dokumentation (im Format HTML) auf Basis der im Quellcode vorhandenen Kommentare automatisch generiert. Das Skript wurde auf das Projekt COCOSYS angepasst und in die Versionsverwaltung eingepflegt. Die entsprechenden Quellcode-Kommentare müssen für die Verwendung durch Doxygen als Ergänzungen in den bestehenden Quelltext von COCOSYS eingebracht werden. Die Ergänzungen erklären die Verwendung der Datenstrukturen wie Variablen, abgeleitete Datentypen, Module, Unterprogramme etc. und können von Doxygen als solche den Quellcodestrukturen eindeutig zugeordnet werden. Mit der Ergänzung der Kommentare im Quellcode unter Verwendung der Doxygen-Formatierungsmöglichkeiten ist begonnen worden. Hierbei sind für die Module AFP und CCI Fortschritte in der Quellcodedokumentation erzielt worden. Der aktuelle Stand der Dokumentation kann jederzeit mittels der skriptbasierten Erzeugung mit Doxygen als eine Vielzahl von in einer Ordnerstruktur abgelegten, verlinkten HTML-Dateien bereitgestellt werden. Der Detaillierungsgrad der Kommentierung wurde dabei entsprechend den GRS-Richtlinien zum Qualitätsmanagement bei der Computerprogrammentwicklung angelegt. Zielsetzung ist dabei, dass jede Codepassage, die für die Simulation von Bedeutung ist, von mehr Personen als nur von dem jeweiligen Entwickler verstanden und entsprechend gepflegt werden kann.



### 5.1.2 Codepflegemaßnahmen

Die Verbesserung von Quelltexten erfolgt kontinuierlich, alle Änderungen am Quelltext (auch im Rahmen von Pflegemaßnahmen) sind ausführlich im Änderungsverwaltungssystem SVN dokumentiert.

Beispielhaft sei eine Umstrukturierung des Codeteils `Y_MASTER_MOD` genannt, der das Abarbeiten der Rechnungsschritte für die verschiedenen COCOSYS-Module festlegt. Grundgedanke der Kopplung von Modulen an den COCOSYS-Treiber ist, dass jedes Hauptmodul für jeden Zeitschritt eine Reihe von Teilschritten ausführt. Jeder Teilschritt kann ausgeführt werden, wenn alle vorhergehenden Teilschritte desselben Moduls bzw. anderer Module ausgeführt worden sind bzw. alle notwendigen Informationen vorhanden sind. Die entsprechenden Definitionen, welche Teilschritte für welches Hauptmodul in welcher Reihenfolge vorgesehen sind, werden in der FORTRAN-Datei `Y_MASTER_MOD` festgelegt. Um die Lesbarkeit zu verbessern, wurde diese Datei jetzt in mehrere separate Dateien mit dem Namen `Y_MASTER_X_MOD` aufgetrennt, in dem `X` für ein beliebiges Modul steht (AFP, ATH, CCI, DET, ...) und jeweils alle Master-Informationen für die Kontrolle der Rechnungsfolge des entsprechenden Moduls enthält. Änderungen am Code, die nur die Rechnungsabfolge für ein Modul betreffen, sind dann auf die entsprechende Quelltextdatei begrenzt, was die Wartbarkeit des Codes, insbesondere bei zukünftigen Änderungen am Synchronisations-Prozess der Module untereinander, verbessert.

### 5.1.3 Vervollständigung von Handbüchern

Des Weiteren ist mit der Vervollständigung der Handbücher (Benutzer und Referenzhandbuch) fortgefahren worden. Im Benutzerhandbuch der Entwicklerversion wurden Teile entsprechend des punktuellen Modellierungsfortschrittes aktualisiert (z. B. zur neuen Eingabestruktur des CCI-Moduls für die Verwendung des Übertrags von Schmelze zwischen Primärkreis und Sicherheitsbehälter sowie für die Verwendung mehrerer Schmelzepools im SB) bzw. hinzugefügt (neue Daten/Modellteile im neuen AFP-Modul). Ferner wurden Ergänzungen in der aktuellen Version des Referenzhandbuches vorgenommen. Hierbei musste eine Übernahme mathematischer Formeln aus einer früheren, nicht-MS-WORD-kompatiblen Version vorgenommen werden. Die Handbücher sind aber noch nicht vollständig. Insbesondere die Referenzhandbücher (für Entwickler- und Anwenderversion) müssen, basierend auf einer verfügbaren älteren Version in einem nicht-MS-WORD-kompatiblen Format, weiter aktualisiert und vervollständigt werden.

#### **5.1.4 Verbesserungen von Schnittstellen für Anwender**

Bei der Erstellung von COCOSYS-Datensätzen ist – insbesondere für weniger erfahrene Anwender – die für die Simulation von Wandstrukturen erforderliche Unterteilung der Wandmaterialien in Schichten eine anspruchsvolle Aufgabe. Zur Unterstützung der Wandunterteilung existiert in der GRS das Hilfsprogramm WALL\_LAYER, das bisher noch nicht an externe Anwender weitergegeben wurde. Um eine Nutzung durch externe Anwender zu ermöglichen, wurden entsprechende Arbeiten durchgeführt wie z. B. die Erstellung einer zugehörigen Beschreibung inklusive von Beispielen für das COCOSYS-V2.4-User-Manual. Die Unterteilung in Wandschichten erfolgt jetzt für einseitig adiabate Strukturen unabhängig von der gewählten Modellierungsrichtung (links/rechts). Das Hilfsprogramm WALL\_LAYER kann nun zur Unterstützung der Wandsimulation mit jeder freigegebenen COCOSYS-Version an externe Anwender verteilt werden.

#### **5.2 Aktualisierung und Vervollständigung der Dokumentation für ASTEC/CPA**

Im Rahmen der IRSN-GRS-Kooperation zur ASTEC-Entwicklung und -Validierung waren Arbeiten zur Aktualisierung der ASTEC/CPA Dokumentation vorgesehen. Die Arbeiten gliederten sich ursprünglich in unterschiedliche Einzelaspekte. Neben der Überprüfung und Ergänzung der vorliegenden Ein- und Ausgabebeschreibung für ASTEC/CPA stand u. a. auch die Aktualisierung des ASTEC/CPA-Benutzer-Handbuchs (User-Manual) an. Letzteres lag in einer älteren Form vor und orientierte sich am bis dato angelegten GRS-Standard für solche Programme. Dieser beinhaltet üblicherweise die Erstellung eines Benutzer- und eines Referenz-Handbuchs. Während ersteres die für die Erstellung des Eingabedatensatzes notwendige Beschreibung der Eingabeparameter und notwendige Syntaxregeln beinhaltet, stellt letzteres die eigentliche Beschreibung mathematisch-physikalischer Modellgrundlagen des Programms bereit. Das Referenz-Handbuch ist insofern wichtig, weil Kenntnisse über die zugrundeliegende Modellbasis für das Verständnis und die Bewertung der Rechnungsergebnisse durchaus wichtig sind, um z. B. Grenzen der Modellierung zu kennen, zu berücksichtigen und die Ergebnisse richtig einzuschätzen. Dies kann im Allgemeinen nicht allein mit einem Benutzer-Handbuch sichergestellt werden. Beide Dokumente werden dann als lesbare PDF-Dateien („Portable Document Format“) bereitgestellt.

Für ASTEC verfolgt IRSN allerdings eine andere Strategie. Dabei wird dem Anwender das Benutzer-Handbuch als sog. Online-User-Manual auf HTML-Basis zur Verfügung

gestellt, welches mit gängigen Webbrowsern geöffnet und gelesen werden kann. Es entspricht inhaltlich dem Benutzer-Handbuch. Unterschiedlich ist, dass diese Datei im Zuge der Entwicklung, üblicherweise vor einer neuen Freigabe, automatisch von IRSN erstellt wird. Dazu werden gesonderte Dateien, sog. „Rule“-Files, die im ASCII-Format vorliegen, ausgelesen und mit einem speziellen IRSN-Programm verarbeitet. Diese Dateien werden im Rahmen der Entwicklung für jedes einzelne ASTEC-Modul separat erstellt und gepflegt. Sie beinhalten neben den Informationen für alle Eingabeparameter teilweise auch Abfragen und Regeln („Rules“), die den Eingabedatensatz beim Start von ASTEC überprüfen und grob auf Fehleingaben checken. Im Unterschied dazu wird dies bei den GRS-Programmen im Quellcode selbst fest einprogrammiert.

Der Vorteil der ASTEC-Philosophie besteht dann darin, dass diese Rule-Files unabhängig vom Quellcode und dem ausführbaren Programm modifiziert werden können und damit recht flexibel zu handhaben sind. Der Nachteil besteht darin, dass manchmal veraltete Regeln angewendet werden, die nicht zur aktuellen Programmversion passen. Das kann dazu führen, dass solche Regeln eine Warnung bzw. Fehlermeldung generieren, wobei letztere meist einen Programmabsturz als Konsequenz hat. Im umgekehrten Fall kann es auch vorkommen, dass keine Warnung ausgegeben wird, obwohl ein Eingabeparameter entsprechend den Rule-Files definiert worden ist, die aktuelle Programmversion aber etwas anderes erwartet. Die Vorgehensweise erfordert somit einen hohen Aufwand bei der Pflege des Online-Manuals.

Mit Verfügbarkeit des Online-Benutzer-Handbuchs macht die gesonderte Erstellung eines weiteren Benutzer-Handbuchs als Textdokument keinen Sinn. Sinnvoll hingegen war es, das CPA-Referenz-Handbuch zu überarbeiten, das die Modellbeschreibung liefert und ebenfalls veraltet war. Nach Rücksprache mit IRSN wurde dann auch diesem Punkt höhere Priorität zugemessen und das Dokument vollständig überarbeitet /REN 15/. Dazu musste das Originaldokument, das noch mit einem aktuell nicht mehr verwendeten Textverarbeitungsprogramm erstellt worden war, zunächst auf das aktuellere Microsoft-Word-Format umgestellt werden. Dann wurde der Text inhaltlich und redaktionell überarbeitet. In diesem Zuge wurden auch alte Textteile verworfen und neue Modellbeschreibungen z. B. zur Wasserstoffverbrennung eingefügt. Das beinhaltete auch die Pflege der gesamten sonstigen Dokumentation zu CPA. Abschließend wurde das Dokument an IRSN übergeben und im Rahmen von CESAM allen CESAM-Partnern nutzbar gemacht. Das überarbeitete CPA-Referenz-Handbuch wird zukünftig in die allgemeine Programmdokumentation für neue ASTEC-Versionen eingepflegt.

## **6 Internationales**

### **6.1 Beteiligung am EU-Vorhaben JASMIN**

#### **6.1.1 Zielsetzung**

Zielsetzung im EU-Vorhaben JASMIN /GIR 17/ war es, den Modellstand von ASTEC-Na für die Simulation von Vorgängen und Phänomenen bei natriumgekühlten, schnellen Reaktoren (SFR = „Sodium-cooled Fast Reactor“) fortzuentwickeln. Die Aufgabenstellung der GRS bezog sich dabei auf Modellentwicklung für containmentseitige, quelltermrelevante Modelle (JASMIN WP2.3 „Source Term“) sowie auf das Management und die Pflege der Software (JASMIN WP 3 „Integration“). Die im Vorläufervorhaben begonnen Arbeiten wurden in diesem Vorhaben beendet.

Frankreich (ASTRID) und Japan investieren aktuell in die Entwicklung neuer Typen von natriumgekühlten, schnellen Reaktoren (SFR) im Rahmen der GEN-IV-Initiative. Während das französische Konzept ASTRID /LEZ 11/ eine Pool-Bauweise des Reaktors vorsieht, verfolgt das japanische JSFR-Konzept /YAM 11/ die Architektur einer Loop-Bauweise. Seit 2014 kooperiert Japan mit Frankreich in der SFR-Entwicklung; es ist zurzeit nicht abzusehen, ob Japan zukünftig das eigene Konzept weiter aufrechterhält. Bei ASTRID handelt es sich um ein Demonstrationsprojekt, für welches ein Baubeginn weit nach 2020 anvisiert wird.

Basierend auf Erkenntnissen aus dem früheren EU-Vorhaben CP-ESFR /FIO 11/, an dem die GRS nicht beteiligt war, gab es bezüglich der für eine Modellentwicklung in ASTEC-Na aufzugreifenden Phänomene in einem SFR vorrangiges Interesse der Projekt-Partner an der Erzeugung von Aerosolen aus Natriumbränden im Sicherheitsbehälter sowie am weiteren Verhalten dieser Natriumbrandaerosole im Sicherheitsbehälter, insbesondere deren Wechselwirkung mit der Atmosphäre (chemische Alterung).

Zu beiden Phänomenen wurde daran mitgewirkt, erste Modelle in ASTEC-Na/CPA\* verfügbar zu machen und in der Nachrechnung von vorhandenen Experimenten zu überprüfen. Diese Mitwirkung umfasste eine Durchsicht und Bewertung der von den Partnern vorgeschlagenen Modelle, die Implementation einer ggf. revidierten Modellversion im Quellcode von ASTEC-Na, das erste entwicklungsnahe Testen auf der Basis von Beispiel-Eingabedateien sowie die Mitwirkung einer vergleichenden Rechnung (Bench-

mark) unter Beteiligung der übrigen Projektpartner. Zu diesem Zwecke wurden aktualisierte, ausführbare Codeversionen von CPA\* in ASTEC-Na zusammen mit neu erstellten Eingabebeschreibungen auf der Projektseite grs.jasmin.de den Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

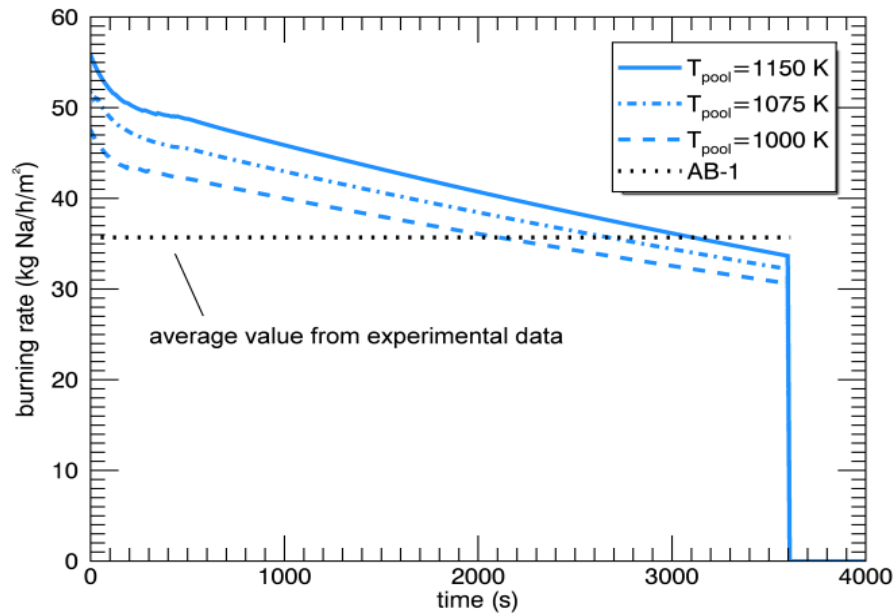
### **6.1.2 Freisetzung von Aerosolen aus Natrium-Lachenbränden**

In dem von CIEMAT in Form von Präsentationen auf Projekt-Meetings übermittelten Modellvorschlag zur Simulation der Aerosol-Erzeugung bei einem Natrium-Lachenbrand wurden durch die GRS einige offene Fragen identifiziert, die nicht abschließend geklärt werden konnten. Von der GRS wurde daher zunächst anstelle des Modells von CIEMAT das in der Literatur eingehend diskutierte SOFIREII-Modell zur Simulation von Natrium-Lachenbränden in ASTEC/CPA\* eingebaut, welches der GRS in einer Implementation im US-Containmentrechencode CONTAIN V2.0 vorliegt.

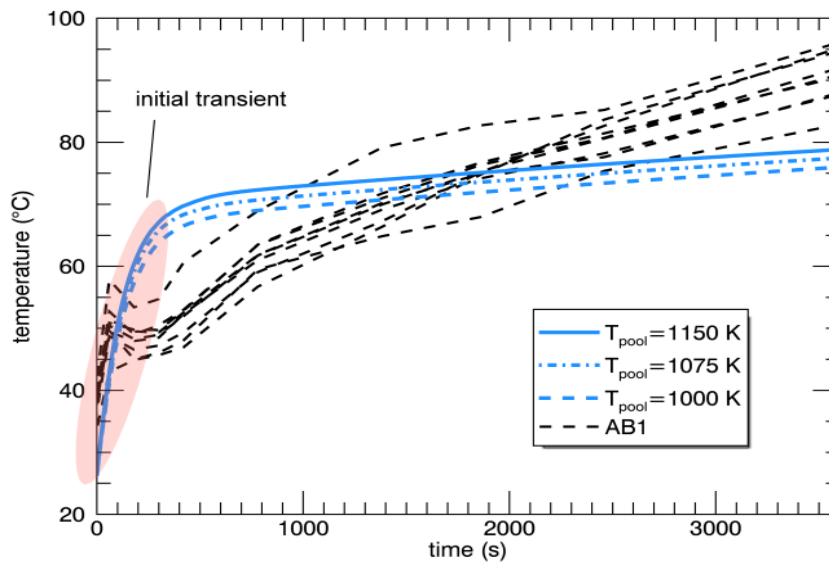
Das Brandmodell SOFIREII basiert auf einem Ansatz für die Diffusion von Sauerstoff an die Brandoberfläche. Der Stoffübergangskoeffizient hängt dabei u. a. von der Temperatur des Natriumpools und der Atmosphärentemperatur ab. Da Natrium nicht als kondensierbarer Stoff in CPA\* simuliert werden kann (in CPA\* ist wie auch in COCOSYS nur Wasser als Kühlmittel verfügbar), kann die Energiebilanz des Natriumpools und insbesondere dessen Temperatur vom Modell nicht realistisch vorhergesagt werden. Der Natriumpool wird in der Realisierung in CPA\* nur durch eine Wärmestruktur dargestellt, die die Stoffwerte von Natrium besitzt und in die ein Teil der Verbrennungsenergie eingespeist wird. Um eine quasi-stationäre Temperatur des Natriumpools knapp unterhalb der Siedetemperatur, die für den Lachenbrand realistisch ist, zu simulieren, muss der Natriumpool um ein entsprechendes Maß gekühlt werden. Alternativ kann mit einer konstant vorgegebenen Temperatur des Natriumpools gerechnet werden.

Mit diesem neu in ASTEC/CPA\* eingebauten Modell konnten die für den JASMIN-WP2.3-Benchmark ausgewählten Lachenbrand-Versuche analysiert werden. Zum Benchmark trug die GRS für die ausgewählten Versuche FAUNA-3, ABCOVE AB-1 und AB-2 mit Rechnungen mit ASTEC/CPA\* sowie mit der bei der GRS verfügbaren Version von CONTAIN bei. Die Benchmark-Ergebnisse mit ASTEC/CPA\* für die drei Na-Lachenbrand-Experimente zeigen für die meisten Parameter angemessene Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten. Brandraten können in ungefährender Übereinstimmung mit dem Experiment simuliert werden (Abb. 6.1). Der Anstieg der Atmosphärentemperatur (vgl. Abb. 6.2) fällt in den Rechnungen geringer aus, als im Experiment. Der Grund

konnte in weitergehenden Untersuchungen darin identifiziert werden, dass in der Realität ein Beitrag der Brandenergie direkt als Strahlung auf die Wände des Behälters übergeht, und daher die Gastemperatur während der stationären Verbrennung stärker gegenüber den ebenfalls steigenden Wandtemperaturen ansteigen muss als ohne rasche Aufheizung der Wände.



**Abb. 6.1** Vergleich der berechneten und gemessenen Brandrate und Einfluss der Natriumpooltemperatur auf die Brandrate, ABCOVE AB-1



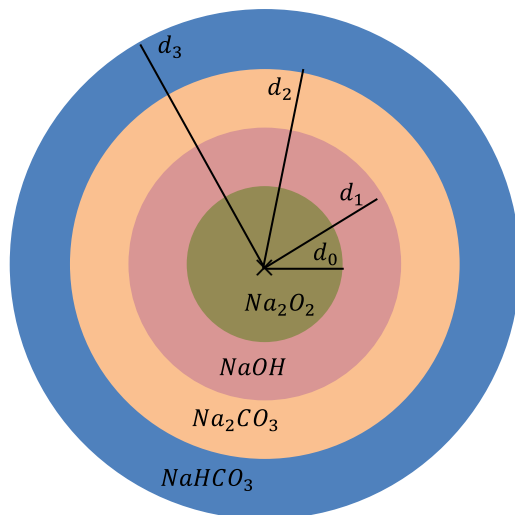
**Abb. 6.2** Vergleich der berechneten und gemessenen Gastemperatur im Versuchsbehälter und Einfluss der Natriumpooltemperatur (bzw. Brandrate) auf die Gastemperatur im Versuchsbehälter, ABCOVE AB-1

Allerdings werden bzgl. der Festlegung der Erzeugungsraten von Spezies ( $\text{Na}_2\text{O}$  oder  $\text{Na}_2\text{O}_2$ ) sowie für die Energiebilanz (Verteilung der Freisetzung von Brandenergie in Pool und Atmosphäre) starke empirische Parameter im Eingabedatensatz benötigt. Das thermische Verhalten des Pools sowie die Wärmeübertragung durch Strahlung in Gegenwart der Aerosolbelastung können nicht adäquat beschrieben werden. Deshalb wurde in CPA\* in einer modifizierten Version ein weiterer Parameter  $f_5$  eingeführt, der den nach oben abgeführten Energieteil aus dem Lachenbrand zwischen Wänden und Atmosphäre aufteilt. Bessere Übereinstimmungen wurden dann mit einem Parameter  $f_5 = 20\%$  erzielt, d. h. dass 20 % der nach oben abgeführten Energie sich auf die Wände entsprechend der Sichtfaktoren zwischen Natriumpool und Strukturen aufteilen.

Da das thermische Verhalten der Natrium-Lache in ASTEC/CPA\* zurzeit nicht dargestellt werden kann, gibt es entsprechende Abweichungen zwischen den ASTEC/CPA\* und CONTAIN-Rechnungen der GRS.

### **6.1.3 Chemische Alterung der Brandaerosole**

Von IRSN ist im Rahmen einer Doktorarbeit ein chemisches Transformationsmodell /MAT 14/ für die Wechselwirkung von Natrium-Aerosolen mit der Atmosphäre erstellt und für den Einbau in ASTEC-Na vorgeschlagen worden. Diese Wechselwirkungsvorgänge sind für einen möglichen Quellterm bei einem Unfall in SFR deshalb von Bedeutung, da Reaktionsprodukte des Natriumbrands (Natriumperoxid,  $\text{Na}_2\text{O}_2$ , sowie das nachfolgend gebildete Natriumhydroxid,  $\text{NaOH}$ ) größere Toxizität aufweisen, als die später infolge der Wechselwirkung mit dem  $\text{CO}_2$  gebildeten karbonatischen Reaktionsprodukte  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  und  $\text{NaHCO}_3$ .



**Abb. 6.3** Diffusionsansatz für die chemische Alterung mit schalenförmiger Ausbildung der Reaktionsprodukte, entsprechend des Modellvorschlags von IRSN /MAT 14/, /SPE 14a/

Basisannahme dieses Ansatzes ist ein Diffusionsansatz für den Transport der Reaktionspartner im Partikel sowie eine sukzessive, schalenförmige Ausbildung der Reaktionsprodukte um den Kern des Partikels, der in der Annahme aus Natriumperoxid ( $\text{Na}_2\text{O}_2$ ) besteht. Natriumperoxid entsteht zusammen mit Natriummonoxid ( $\text{Na}_2\text{O}$ ) beim Brand von Natrium mit dem Luftsauerstoff bzw. dem Dampf in der Atmosphäre.

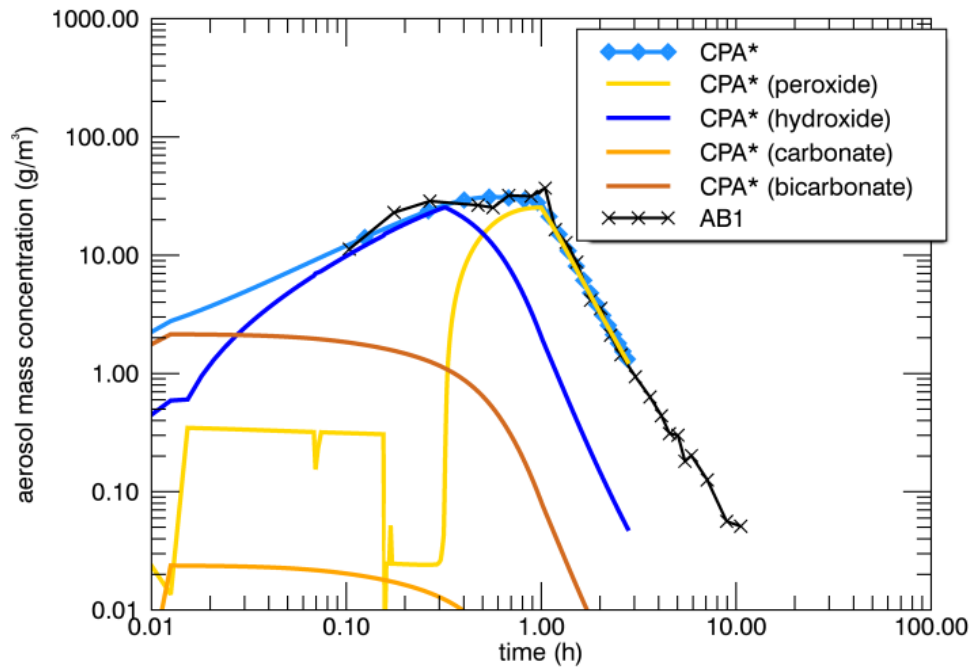
Die GRS hat den Vorschlag von IRSN ausgewertet und dazu eine detaillierte technische Notiz /SPE 14a/ verfasst, in der einige identifizierte Probleme angesprochen und offene Fragen zusammengestellt worden sind. Nach Klärung der offenen Punkte mit IRSN wurde von der GRS in ASTEC/CPA\* das IRSN-Modell in vereinfachter Form eingebaut, an einem Testdatensatz überprüft und eine Dokumentation für die Anwendung des Modells erstellt. Die von der GRS vorgenommene Vereinfachung betrifft im Wesentlichen das Weglassen des Mehr-Generationen-Ansatzes bei der Behandlung der Aerosol-Alterung. Den JASMIN-Partnern wurde eine ausführbare ASTEC/CPA\*-Version, ein Beispieldatensatz sowie die Dokumentation /SPE 15b/ für die Verwendung im Rahmen des anschließend durchgeführten Benchmarks überlassen. IRSN wurde zusätzlich auch der erweiterte Quellcode für dieses Modell überlassen.



#### 6.1.4 Anwendungsrechnung – Benchmark

Im Rahmen des Benchmarks sind berechnete Daten mit experimentellen Daten aus ABCOVE AB-1 verglichen worden. In AB-1 wurden Natriumbrandaerosole während eines ca. einstündigen Na-Lachenbrandes erzeugt. Die Anwendung der Aerosolalterung zeigt auf diesen Versuch im Vergleich zu den wenigen verfügbaren experimentellen Daten realistische Tendenzen (s. Abb. 6.5), die verfügbaren experimentellen Daten sind aber zurzeit zu spärlich, um eine belastbare Validierung dieses Modells angehen zu können. Die Arbeiten sind in zwei Konferenzbeiträgen zur ICAPP 2016 /SPE 16/, /HER 16/ zusammengefasst worden.

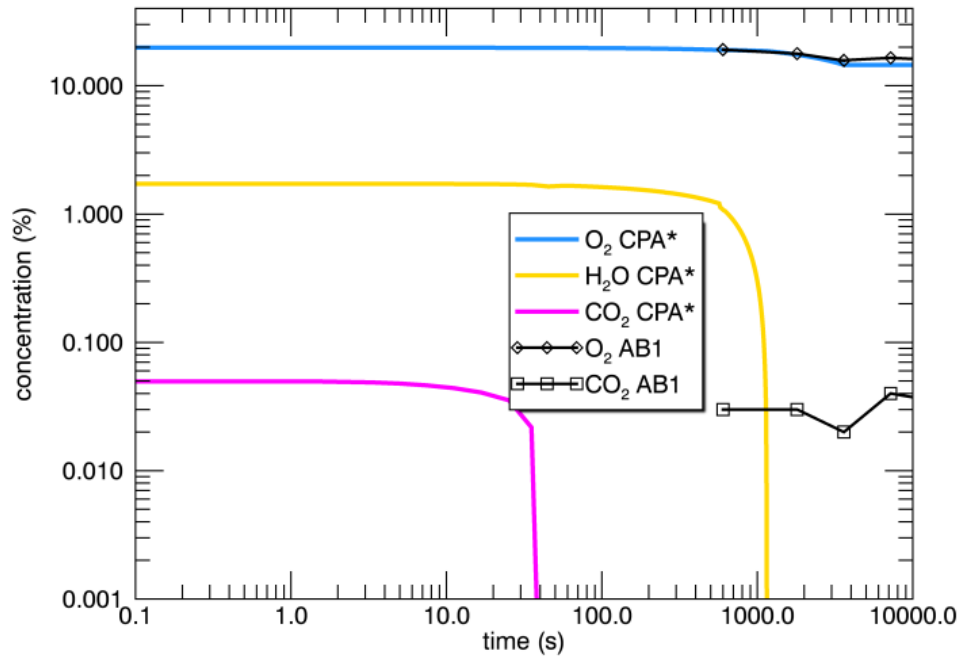
Die luftgetragene Aerosol-Konzentration (Abb. 6.4) wird von CPA\* gut getroffen. Experimentelle Daten zur chemischen Zusammensetzung des Aerosols sind nur für wenige Zeiten verfügbar, diese zeigen ähnlich hohe Massenanteile für Hydroxid und Peroxid im Zeitbereich von 16 min bis 190 min (Abb. 6.5). In der Rechnung dominiert im Aerosol für ca. 1 Minute das Natriumhydrogenkarbonat (oder -bikarbonat,  $\text{NaHCO}_3$ ), gefolgt von einer zwischenzeitlichen Dominanz des Hydroxids. Am Ende besteht das luftgetragene Aerosol vorwiegend aus dem Peroxid, da der Wasserdampf und das  $\text{CO}_2$  aus der Atmosphäre zu diesem Zeitpunkt verbraucht sind (Abb. 6.6). Gleich hohe Massenanteile von Hydroxid und Peroxid im luftgetragenen Aerosol werden in der Rechnung nur für einen kleinen Zeitbereich um  $t = 30$  min prognostiziert. Abb. 6.7 zeigt die berechnete Zusammensetzung aller Aerosole (inklusive der abgelagerten) als Funktion der Zeit. Diese ist nach ca. 1 h weitgehend konstant, mit etwa 60 % Peroxid und knapp 40 % Hydroxid. Die Schwierigkeiten bei der Bewertung dieser Rechenergebnisse im Vergleich zu den wenigen experimentellen Daten zeigen, dass eine erweiterte und verbesserte Datenbasis für eine belastbare Überprüfung des Modells nötig sind.



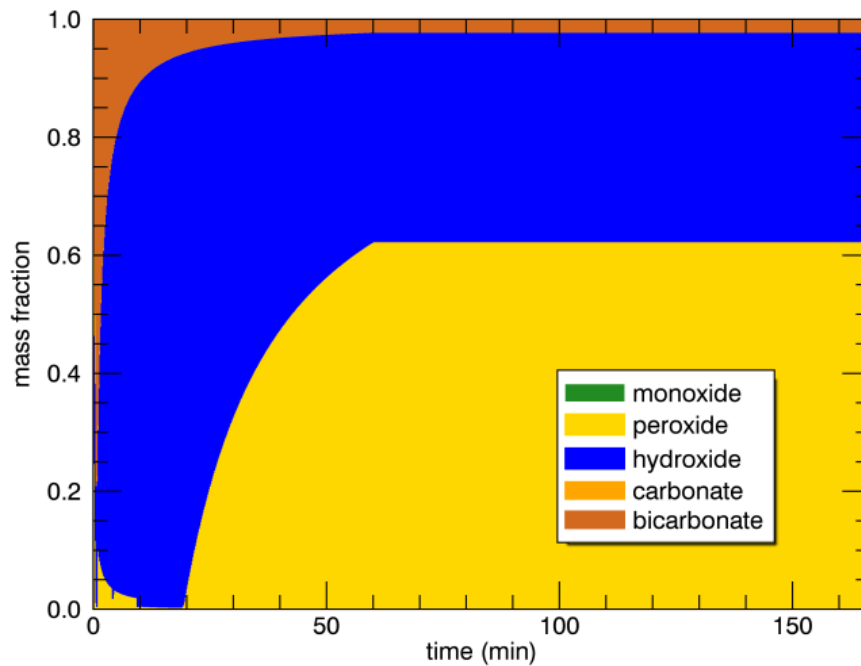
**Abb. 6.4** Vergleich der berechneten und gemessenen Aerosol-Konzentrationen, ABCOVE AB-1

Aerosol chemical Analysis - Suspended aerosol (mass fraction)						
Time (min)	Na <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	NaH	NaOH	H <sub>2</sub> O	
16	0.15	0.029	0.0001	0.821	0	
46	0.56	0.004	0.007	0.429	0	
190	0.43	0.018	0.0011	0.479	0.072	
610	0.35	0.061	0.011	0.421	0.097	
5 days	0.273	0.009	0.0008	0.67	0.047	

**Abb. 6.5** Zeitabhängige Aerosolzusammensetzung in ABCOVE AB-1



**Abb. 6.6** Verbrauch von CO<sub>2</sub> und Wasserdampf während der Bildung des Natriumhydrogenkarbonats bzw. des -peroxids



**Abb. 6.7** Berechnete Aerosolzusammensetzung als Funktion der Zeit

Die Arbeitsergebnisse der GRS zu EU-JASMIN wurden bei der Konferenz ICAPP 2016 in der Sitzung „Advanced Reactors – Safety and Licensing I“ einem Fachpublikum vorgestellt /SPE 16/. Es stellte sich heraus, dass sowohl in den USA, bei Sandia National

Laboratories, als auch in Frankreich, bei CEA, zurzeit ähnliche Fragestellungen bearbeitet werden. Bei SNL werden gegenwärtig Modelle von CONTAIN-LMR, einem älteren, von SNL entwickelten Rechencode für die Simulation von containmentrelevanten Phänomenen bei flüssigmetallgekühlten, schnellen Reaktoren (LMFR) in den Rechencode MELCOR übertragen. Die Ergebnisse des MELCOR-Teams erscheinen auf der Basis der Information aus den vor Ort geführten Gesprächen recht ähnlich zu den eigenen Ergebnissen. Bei CEA finden Modellentwicklungen für die Alterung von Natriumoxiden wie Natriummonoxid ( $\text{Na}_2\text{O}$ ) oder Natriumperoxid ( $\text{Na}_2\text{O}_2$ ) in Gegenwart von Luft statt, mit ähnlicher Zielsetzung wie bei den Arbeiten von IRSN/GRS im Rahmen von JASMIN. Die chemischen Transformationen führen generell zu einer geringeren chemischen Toxizität von Natriumbrandaerosolen im Falle eines Lecks an die Umgebung. Von CEA-Experten ist dazu eine Veröffentlichung von den CEA-Autoren Plantampa, Gilardia, Muhr und Perrais in der Zeitschrift „Aerosol Science and Technology“, 2016, eingereicht. Für mögliche weitere Arbeiten zu diesem Punkt erscheint es sinnvoll, die beiden Modellentwicklungen auf der Basis der öffentlich verfügbaren Literatur untereinander abzugleichen. Mit dem Ende des EU-JASMIN-Projektes im Mai 2016 sind die Arbeiten der GRS an ASTEC-Na beendet worden.

## **6.2 Beteiligung am EU-Vorhaben CESAM**

### **6.2.1 Zielsetzung**

Die GRS hat sich sowohl inhaltlich als auch in leitender Funktion an dem Projekt CESAM im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Kommission beteiligt. An diesem Projekt hatten zuletzt – nachdem EDF dem Konsortium beigetreten war – 19 internationalen Partner teilgenommen. Ziel von CESAM war es, im Nachgang zu Fukushima weitere Verbesserungen am Code ASTEC zu erzielen, um die Verlässlichkeit von ASTEC für die Auswertung von Notfallmaßnahmen und beim Einsatz in Notfallzentren zu erhöhen. Im Rahmen der Projektlaufzeit von CESAM hat der Code ASTEC einen Versions-Sprung von der Version V2.0 hin zur Version V2.1 gemacht. Im Projekt beinhaltete das Arbeitspaket 20 (WP20) „Modelling assessment, improvement and validation (ASSES)“ die gezielte Validierung von Fragestellungen, die für Analysen der Fukushima-Unfälle relevant sind. In WP30 „Integration of models in ASTEC (INTEG)“ sind einzelne Modellverbesserungen in die neue ASTEC-Version V2.1 eingeflossen. Weiterhin ist seitens IRSN der Code zu Diagnosezwecken bei Störfällen und für die Berechnung von Quelltermen an die Umgebung erweitert worden, womit die Anwendbarkeit in Notfallzentren deutlich verbessert

worden ist. In WP40 „Plant applications and Severe Accident Management“ sind generische ASTEC-Referenzdatensätze für alle in Europa betriebenen Reaktortypen (DWR, SWR, WWER, sowie für einen Schwerwasserreaktor) erstellt worden. Zusätzlich sind Arbeiten für die Modellierung von Brennelementlagerbecken durchgeführt worden, wobei diese Datensätze aufgrund des begrenzten Standes der Modellierung nicht das Niveau der Anlagendatensätze erreicht haben. Durch den Übergang zur Codeversion V2.1 ist ASTEC erstmals auch für nicht DWR-Reaktoren anwendbar geworden, d. h. für SWR und Schwerwasserreaktoren. Aufgrund der weitreichenden Verfügbarkeit von Anlagendatensätzen ist neuen Nutzern ein wichtiger Grundstein zur Erstellung ihrer eigenen Datensätze gegeben worden. Die in CESAM von Projektpartnern durchgeführten Rechnungen zu Notfallmaßnahmen unterstreichen die Eignung von ASTEC zur Beschreibung der wichtigsten Phänomene.

Mit Blick auf die Entwicklung von Modellen für Containmentphänomene sind im Wesentlichen die Arbeiten in WP20 von Bedeutung gewesen. Die GRS hatte hier auch die Verantwortung als Arbeitspaketleiter ausgeübt. Darüber hinaus hat die GRS die fachlichen Themenfelder MCCI, Filtersysteme und Pool-Scrubbing innerhalb dieses Arbeitspaketes bearbeitet. Modell-Erweiterungen in ASTEC sind im Rahmen von WP30 eingepflegt worden. Hierbei sind für die GRS speziell Themen für das Containment Modul CPA in ASTEC relevant gewesen, die in WP20 bearbeitet worden sind. Die Beteiligung an CESAM ist im Vorläuferprojekt RS1508 /SPE 14b/ begonnen worden und im Rahmen von RS1532 im März 2017 abgeschlossen worden.

### **6.2.2      Erstellte Berichte**

Im Rahmen von WP20 sind die Zuarbeiten der GRS an dem Bericht D20.23 „General specifications of new models or model improvements to be implemented into ASTEC V2.1 rev1“ /CHA 15/ und dem Bericht D20.24 „Synthesis of validation of ASTEC V2.0REV3 version“ /BUC 15b/ abgeschlossen worden. Die Berichte D20.23 und D20.24 sind von IRSN bzw. von der Universität Stuttgart federführend erstellt worden. D20.24 beschreibt den aktuellen Validierungsstand der Codeversion V2.0, die etwa gegen Mitte des CESAM-Projektzeitraums durch die Version V2.1 abgelöst worden ist.

Des Weiteren ist gegen Projektende an dem abschließenden Validierungsbericht für ASTEC V2.1, D20.25 „Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions“ /BUC 17b/, mitgearbeitet worden. Dieser Bericht stellt das abschließende Projektergebnis zur Validierung des neuen V2.1-Entwicklungsstrangs von ASTEC dar.

### **6.2.3 Durchgeführte Arbeiten**

#### **6.2.3.1 Direct Containment Heating (DCH)**

Als Folge eines RDB-Versagens und einer möglichen Freisetzung von Schmelze unter Druck in das Containment kann aufgrund von hochdynamischen, thermischen und chemischen Interaktionen der Containmentdruck rasch erhöht werden. Bereits früher war im ASTEC-Containmentmodul CPA ein Modell zur Beschreibung der Vorgänge beim RDB-Versagen unter Druck, als Themenkomplex unter der Abkürzung DCH – „Direct Containment Heating“ – bekannt, implementiert worden /ECK14/, /ECK14b/. Dieses DCH-Modell war bis dahin nur als Standalone-Modell verfügbar, d. h. nur zur Nachrechnung des Vorgangs selbst, z. B. bei spezifischen Experimenten, nicht aber im Kontext der Vor- und Nachgeschichte im Verlauf einer Anlagenrechnung. Im Bericht D20.23 /CHA 15/ wurde daher die Zielsetzung formuliert, dieses DCH-Modell an die übrigen ASTEC-Module in einer zukünftigen Version ASTEC V2.1 anzubinden. Von der GRS ist dementsprechend eine komplette Anwendung der Simulationskette für den Transport der Schmelze im Containment nach RDB-Versagen, inklusive Austrag aus dem ICARE-Modul, welches in ASTEC den Primärkreis bis hin zum möglichen RDB-Versagen simuliert, der DCH-Berechnung im Modul CPA sowie der anschließenden Schmelze-Beton-Wechselwirkung in der Grube mit dem Modul MEDICIS realisiert worden. Die Arbeiten sind in einem internen CESAM-Bericht /NOW 17/ festgehalten worden.

Für die Anbindung des DCH-Modells an ICARE sowie an MEDICIS war die Realisierung einer Kopplung mit diesen Modulen notwendig. Dies hatte erfordert, dass die Berechnungen des DCH-Modells mithilfe der entsprechenden Differentialgleichungen nur für den eigentlichen Zeitraum des DCH-Vorgangs an sich durchgeführt werden. Daher war neben der eigentlichen Kopplung auch das Erstellen geeigneter Ein bzw. Ausschaltkriterien nötig, die zum Ein- und Ausschalten des DCH-Modells benutzt werden. Nachfolgend wird das Prinzip dieser neuen Umschaltkriterien kurz erläutert, bevor auf die Kopplung mit MEDICIS und ICARE eingegangen wird und abschließend eine Testrechnung vorgestellt wird.

#### **6.2.3.2 Umschaltkriterien**

In dem ursprünglichen DCH-Modell von Eckel in CPA /ECK14/, /ECK14b/ wurde die DCH-Berechnung ausgeschaltet, sobald die luftgetragene Tröpfchen-Masse unter ein

bestimmtes Limit fiel. Dabei erfolgte das Umschalten für jede Zone separat. Dieses Vorgehen zeigte Probleme bei der Ankopplung an die übrigen Module, weshalb hier auf ein einzelnes globales Umschaltkriterium umgestellt worden ist.

Die DCH-Rechnung in CPA wird jetzt aktiviert, sobald die aus dem unteren Plenum von ICARE freigesetzte Massenstrom  $GD$  (kg/s) größer als ein kritischer Wert, der sich aus der in der Reaktorgrube abgelagerten Masse  $WD$  (kg), verrechnet mit einem Faktor von  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$  ergibt:

$$GD > 10^{-4} \frac{1}{\text{s}} WD.$$

Dieses ist normalerweise der Fall für den ersten Zeitschritt, wenn die erste Masse aus dem unteren Plenum freigesetzt wird, da zu diesem Zeitpunkt kein Corium abgelagert und damit  $WD = 0$  ist, aber  $GD$  größer als 0 wird. Der Fall  $WD > 0$  wird benötigt, falls das Modell ein weiteres Mal starten soll.

Das Kriterium zum Ausschalten des DCH-Modells basiert auf der gesamten abgelagerten Coriummasse  $M_D$  und der luftgetragenen Coriummasse  $M_A$ , summiert über alle Zonen und über alle Coriumkomponenten (U, Fe, ... und jeweilige Oxide). Weiter wird kontrolliert, ob der Mitriss bereits abgeschlossen ist, was in der Booleschen Variable „*entrain\_finished*“ kontrolliert wird. Folgende Bedingungen müssen alle erfüllt sein, um das Modell auszuschalten:

$$\begin{aligned} M_D &> 0 \\ M_A &> 0 \\ M_A &< 10^{-3} M_D \\ \textit{entrain\_finished} \end{aligned}$$

Die ersten beiden Kriterien dienen der Überprüfung, ob der gesamte DCH-Vorgang überhaupt schon angefangen hat. Das dritte Kriterium ist das Hauptausschaltkriterium; die Variable „*entrain\_finished*“ beinhaltet eine Überprüfung der Kutadeladze-Zahl, welche als Grenzwert für den Partikelmitriss benutzt wird und in Gleichung 3 in /ECK14b/ beschrieben wird. Nachdem alle Kriterien erreicht werden, werden die Differentialgleichungen für Massen- und Energietransport für die atmosphärisch getragene Schmelze im DCH-Modell ausgeschaltet. Außerdem wird die Variable „*dch\_finished*“ auf den Wert „wahr“ gesetzt.

### **6.2.3.3 Kopplung CPA – MEDICIS**

Die Variable „*dch\_finished*“ wird als Startsignal für eine nachfolgende Schmelze-Beton-Reaktion in MEDICIS benutzt. Der Datentransport erfolgt (analog der Freisetzung aus dem Modul RUPUICUV) über Ein- und Ausspeicherung in die bzw. aus der Sigal-Datenbank. Die Massen der einzelnen Metalle und Oxide werden so zusammen mit ihrer Temperatur an MEDICIS weitergeleitet. Daraufhin wird eine MEDICIS-Berechnung gestartet. Dieses Vorgehen bedeutet, dass MEDICIS erst nach Beendigung des DCH-Vorgangs startet und keine parallele Berechnung erfolgt. Eine eventuell verspätete MCCI-Rechnung wird auf Grund der kurzen DCH-Phase in Kauf genommen.

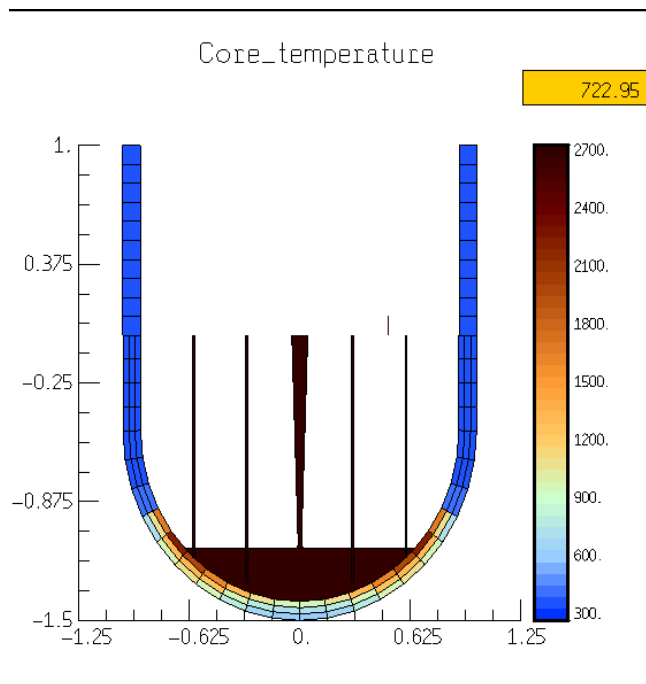
### **6.2.3.4 Kopplung ICARE – CPA**

In der Kopplung mit ICARE wird eine virtuelle Zone „RPV“ in der Nodalisierung für CPA verwendet, die als Quellzone den Reaktordruckbehälter samt Kühlkreislauf beinhaltet. Außerdem wird eine virtuelle Verbindung „RPV\_LEAK“ erzeugt, die den Transport in die Reaktorgrube simuliert. Der berechnete Massenstrom in dieser Verbindung dient dann der Berechnung der Mitrissströmung nachdem das DCH-Modell gestartet worden ist.

### **6.2.3.5 Testrechnung**

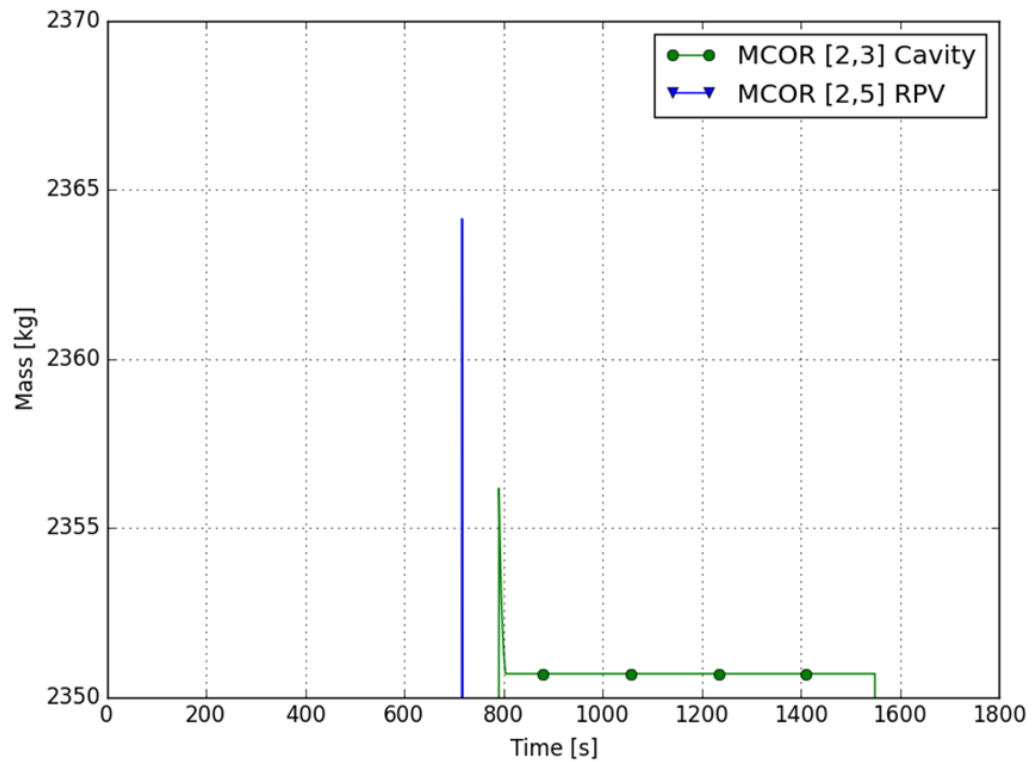
Basierend auf einem existierenden ICARE-Testdatensatz ist eine einfache Testrechnung für die gekoppelte Rechnung aufgesetzt worden, um die Anwendbarkeit der erfolgten Modellentwicklung zu zeigen. Abb. 6.8 zeigt die angenommene RDB-Modellierung mit ICARE. Das heiße Corium wird in dieser Rechnung vereinfacht in den RDB eingespeist (ohne den Störfallverlauf bis hin zum Niederschmelzen des Kerns zu simulieren) und fällt dann in das untere Plenum. Das heiße Material zerstört nachfolgend die RDB-Wand. Dargestellt ist der Zeitpunkt 722 s kurz vor dem berechneten RDB-Versagen.



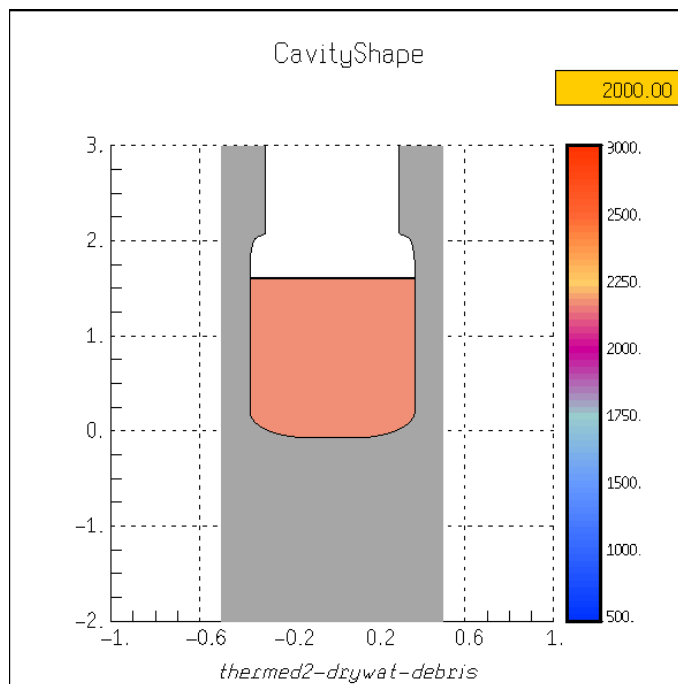


**Abb. 6.8** RDB-Modell für ICARE

Das aus dem RDB austretende Material wird in die Reaktorgrube verlagert und die ausströmenden Gase reißen das abgelagerte Material in die Atmosphäre und transportieren es in Tröpfchen in nachfolgende Zonen mit. In dem neuen Modell wird dieser Vorgang im Modul CPA berechnet. Als Folge des Tröpfchenmitrisses erhitzt sich die Containment-Atmosphäre in anliegenden Zonen. Der Massenausstrag aus dem unteren Plenum in die Reaktorgrube ist in Abb. 6.9 sichtbar. Zu Beginn der DCH-Rechnung bei 725 s werden die kompletten 2 364 kg Corium aus dem RDB in die Grube verlagert. In der betrachteten Rechnung geschieht die Ablagerung und der Mitriss parallel, weshalb das Maximum von 2 356 kg in der Grube nach 795 s nicht das komplette Material enthält. Der Mitriss dauert etwas länger und in der Reaktorgrube verbleiben etwa 2 351 kg. Die DCH-Rechnung ist erst beendet, wenn weniger als 0,01 % des freigesetzten Materials noch luftgetragen sind. Daher gibt es noch Ausgabewerte bis 1 550 s. Das ist eine nicht akzeptable Zeitdauer, während der bereits beträchtliche Einflüsse des MCCI-Vorganges zu erwarten sind. Die Simulation von MCCI müsste also frühzeitiger gestartet werden. Als Konsequenz aus dieser Testrechnung ergibt sich die Notwendigkeit, die Stoppkriterien entsprechend zu modifizieren. Solche Modifikationen wurden aber nicht mehr vorgenommen, da mit Ende des Projektes CESAM auch die Beteiligung der GRS an der ASTEC-Entwicklung endete.



**Abb. 6.9** Coriummassen in RPV und der Reaktorgrube



**Abb. 6.10** MCCI-Berechnung mit MEDICIS

Nach Beendigung der DCH-Rechnung wird das in der Grube verbleibende Material an MEDICIS zur Berechnung der Schmelze-Beton-Wechselwirkung weiter gegeben.

Abb. 6.10 zeigt die Kavernenkontur zum Ende der MEDICIS-Rechnung für diesen akademischen Testfall.

Die durchgeführte Testrechnung demonstriert die Möglichkeit einer vollständigen Modellierung des DCH-Phänomens in der ASTEC-Rechenkette ICARE-CPA-MEDICIS für einen akademischen Testfall. Einige Defizite wie der verzögerte MEDICIS-Start sind identifiziert worden, die in folgender Liste eingetragen sind:

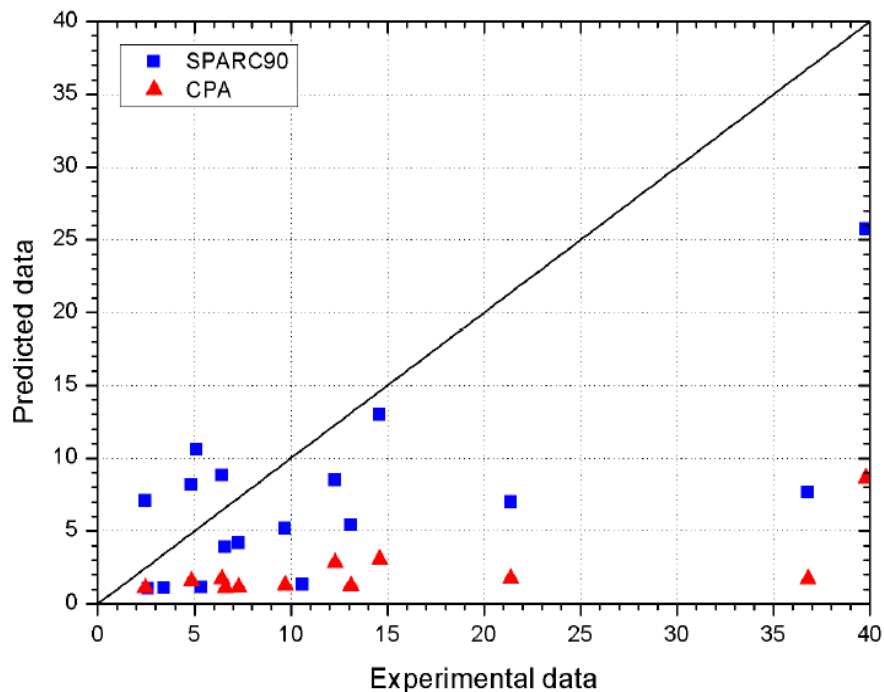
- Änderung des Verbindungsparameters, um die echte Leckgröße zu übertragen
- Spaltprodukt-Transport wird nicht behandelt
- Wärmetransport von abgelagertem Corium an die Atmosphäre fehlt
- Weiteres Abstürzen nach dem ersten Austrag nach Vessel-Versagen fehlt
- Ausschaltkriterien müssen an reale Experimente und Anlagenrechnungen angepasst werden

Unter Berücksichtigung dieser Liste kann der Status dieses Modells nur als Machbarkeitsstudie angesehen werden. Da die GRS mit Ende des CESAM-Vorhabens nicht mehr an der weiteren Entwicklung von ASTEC beteiligt ist, ist der Code inklusive der Testrechnung auf Basis der letzten zugänglichen ASTEC-Quellcodeversion an IRSN zur weiteren Verwendung übergeben worden. Das erarbeitete Know-how kann für Verbesserungen der eigenen Rechenkette AC<sup>2</sup> zukünftig genutzt werden (Kopplung Primärkreis ↔ Containment).

#### **6.2.4 Pool-Scrubbing**

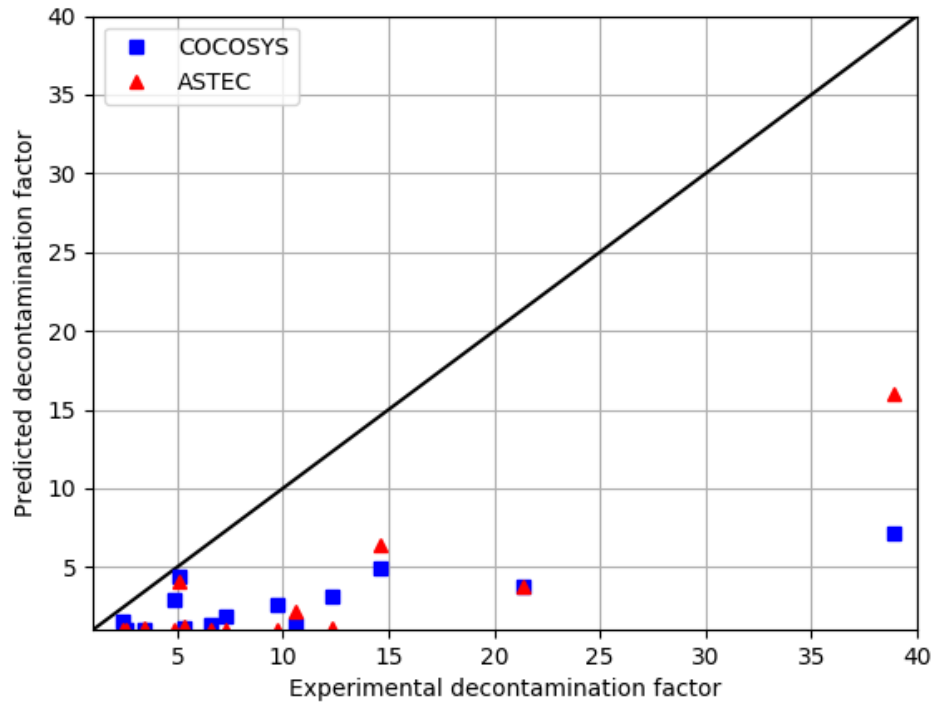
Durchströmen Gasblasen, welche Aerosole und/oder gasförmige Spaltprodukte wie z. B. Iod enthalten, eine Wasservorlage (im Leckmassenstrom bzw. beim Abblasen unter Wasser in die Kondensationskammer eines SWR), kommt es zu einem Übergang der Aerosole und von Gasen wie z. B. Iod aus den Blasen in das Wasser. Der Prozess wird generell als Pool-Scrubbing bezeichnet. Bereits in dem Validierungsbericht für die ASTEC-Version V2.0 /BUC 15b/ sind Arbeiten der GRS zum Pool-Scrubbing aufgeführt worden, die bereits in RS1508 durchgeführt worden waren. Dabei sind insbesondere die POSEIDON-Versuche neu mit ASTEC und COCOSYS berechnet worden. Im Folgenden fand eine vertiefte Diskussion insbesondere mit dem spanischen Partner CIEMAT statt, der das typische Verhalten des in ASTEC implementierten SPARC-Modells im Vergleich zum ursprünglichen SPARC90 bereits in SARNET 2 /CHA 11/ thematisiert hatte. Die

damaligen Ergebnisse von CIEMAT sind in Abb. 6.11 dargestellt. Dabei wird der Dekontaminationsfaktor DF, der als Verhältnis der in die Wasservorlage eintretenden Aerosolmasse zu der austretenden Aerosolmasse definiert ist, für verschiedene Experimente dargestellt.  $DF = 1$  bedeutet keine Rückhaltung und bei kompletter Rückhaltung in der Wasservorlage wird der DF unendlich. Auf der waagerechten Achse ist für verschiedene Experimente der gemessene DF aufgetragen, während auf der senkrechten Achse der berechnete DF mit SPARC90 bzw. SPARC in CPA aufgetragen ist. Bei idealer Berechnung liegen die Werte auf der eingezeichneten 45°-Geraden. Der Vergleich zeigt auf der einen Seite die begrenzte Prognose mit beiden SPARC-Versionen, zum anderen, dass die SPARC-Version in CPA den DF deutlich unterschätzt.



**Abb. 6.11** CIEMAT-Vergleich SPARC90 mit SPARC in COCOSYS

Ein derartiger Vergleich ist auch mit den in /BUC 15b/ dargestellten GRS-Ergebnissen mit SPARC in COCOSYS und SPARC in ASTEC-CPA erstellt worden. Das Ergebnis ist in Abb. 6.12 dargestellt. Der Vergleich zwischen COCOSYS und ASTEC zeigt für die verschiedenen Experimente nicht identische Ergebnisse, allerdings ist der Trend sehr ähnlich zu den CIEMAT-Ergebnissen, d. h. beide SPARC-Versionen liefern im Vergleich sehr konservative Ergebnisse.



**Abb. 6.12** GRS-Vergleich SPARC in COCOSYS und ASTEC CPA

Beide SPARC-Implementierungen in ASTEC und COCOSYS basieren auf der Version SPARC/B-98 /FIS 98/, welches bei Becker Technologies auf Basis des originalen Modells SPARC90 erstellt worden ist. COCOSYS und ASTEC liefern aufgrund unterschiedlicher Entwicklungsstränge nicht mehr dieselben Ergebnisse, aber der absolute Trend ist immer noch derselbe. Ein Ziel des Autors von SPARC/B-98 war es, einen Code zu schaffen, der in jedem Fall konservative Werte für das Pool-Scrubbing liefert.

Die Erfahrungen und der Austausch mit internationalen Experten auf dem Gebiet Pool-Scrubbing in CESAM sind sehr wichtig. Es besteht internationaler Konsens, dass wichtige Phänomene beim Pool-Scrubbing zurzeit nicht ausreichend verstanden werden. Derzeit läuft das IPRESKA-Projekt im NUGENIA-Rahmen, das eine weltweite Forschergruppe zu dem Thema vereint. IPRESKA wurde von Becker Technologies initiiert und die GRS wird sich mit Beiträgen zur Modellentwicklung und Anlagenrechnungen beteiligen, wodurch ein Anschluss zu den durchgeführten Arbeiten gegeben ist.

### 6.2.5 MOCKA-Versuche zu MCCI

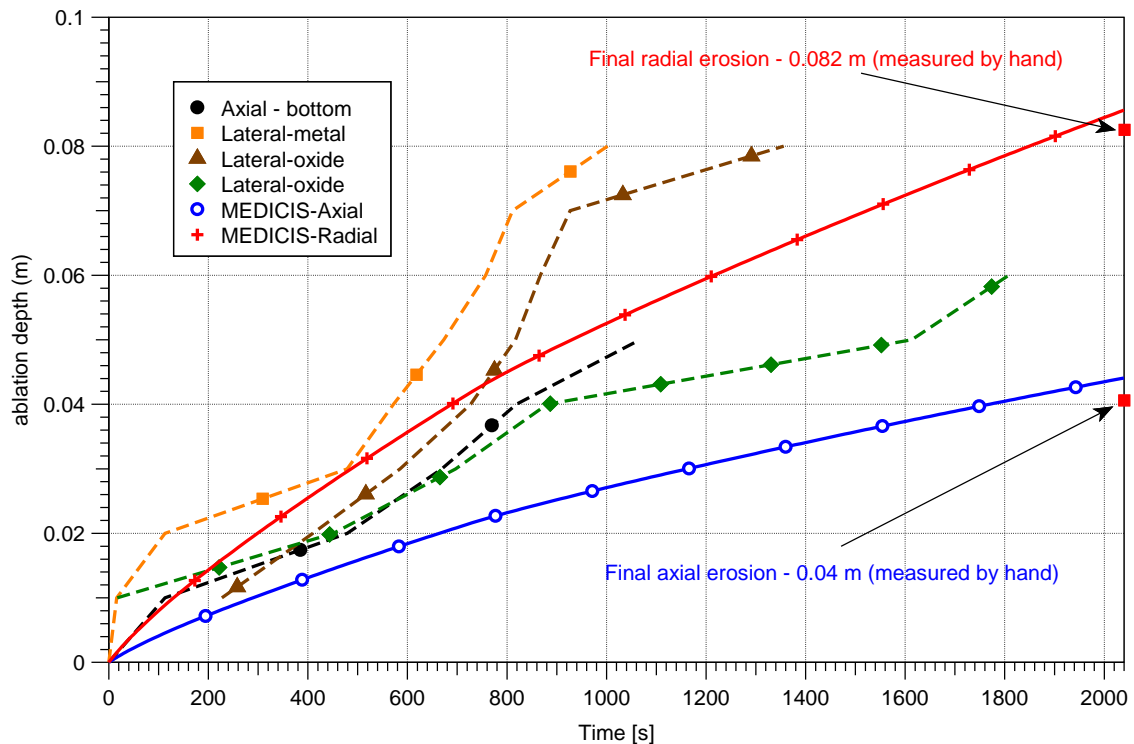
Im Rahmen von CESAM ist das ASTEC-Modul MEDICIS für die Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung anhand der MOCKA-Versuche 7.1 und 5.7 validiert worden. Diese Versuche sind beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) mit Eisen-

und Aluminiumoxidschmelzen durchgeführt worden, wobei im Versuch 7.1 Kalksandstein-Beton und in MOCKA 5.7 silikatischer Beton benutzt worden ist, um den Einfluss einer Bewehrung mit 12 Gew.-% zu untersuchen. Diese Versuche erlauben die Simulation eines Langzeit-MCCI-Vorgangs mithilfe einer kontinuierlichen Bespeisung des Schmelzepools im Tiegel mit chemisch reaktivem Material, um die interne Wärmequelle der Nachzerfallswärmeleistung von echtem Corium zu simulieren. Dabei sind für die genannten Versuche experimentell ermittelte Schmelze-Temperaturen verfügbar, im Unterschied zu früheren Versuche in der MOCKA-Anlage.

In den durchgeführten Simulationen wird die beschriebene Energiezufuhr und Energiebilanz in MEDICIS möglichst genau beschrieben. Die in den Experimenten angewendete Zuführung von Zirkonium und Thermit bringt Vorteile mit sich (z. B. die Möglichkeit, den Einfluss von Bewehrungen im Beton zu untersuchen), aber auch Komplikationen. Beispielsweise führt diese Beheizungstechnik zu einem Auswurf von Schmelze aus dem verwendeten Beton-Tiegel. Als erster Schritt ist in MEDICIS ein Grenzfall betrachtet worden, in dem die gesamte Maximalleistung, die aus den Schmelzeschichten an der Oberfläche und in den Beton abgegeben werden kann, bestimmt wird. In einem zweiten Schritt, ist eine „Best-Estimate“-Rechnung aufgesetzt worden, bei der die interne Energie simuliert durch die Zugabe einer angepassten Nettoleistung in die Oxidphase simuliert wird. Als wichtiges Ergebnis lassen die durchgeführten Untersuchungen auf eine höhere Zerstörungstemperatur des Betons (1536 °C) im Vergleich zu früheren Annahmen rückschließen.

In den durchgeführten Rechnungen für beide MOCKA-Experimente ist eine „Best-Estimate“-Annahme über die Verteilung der Wärmeübergangskoeffizienten an den Schmelze/Beton-Schnittstellen (unten / seitlich) identifiziert worden, welche eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten in Bezug auf Betonerosion und Schmelzetemperatur unter Berücksichtigung der Unsicherheiten der experimentellen Messungen und Randbedingungen liefert.

Als Beispiel der erzielten Ergebnisse ist in Abb. 6.13 ein Vergleich der berechneten und experimentellen Erosion in axialer und radialer Richtung für den Versuch 5.7 dargestellt. Ganz rechts am Rand ist auch die hinterher nach Aufschneiden der erstarrten Schmelze gemessene Erosionstiefe eingetragen. Die berechneten Werte zeigen eine nur leichte Überschätzung der Erosion in beide Richtungen.



**Abb. 6.13** MOCKA5.7, Vergleich berechneter und experimenteller Daten zum zeitlichen Fortschritt der Erosionstiefe in axialer und radialer Richtung.

## 6.3 Internationale Gremien und Querschnittsaktivitäten

### 6.3.1 IRSN-GRS-Kooperation zur ASTEC-Entwicklung und -Validierung

Seit 2013 zeichnete sich in der Kooperation zwischen IRSN und GRS zur ASTEC-Entwicklung und Validierung mittelfristig eine neue Positionierung der GRS hinsichtlich ihrer Rolle ab, insbesondere auch vor dem Hintergrund des Ausstiegs Deutschlands aus der Kerntechnik zum Zwecke der Stromerzeugung. Insbesondere floss in die Betrachtung ein, dass sich einerseits der Bedarf an Reaktorsicherheitsforschung für die deutschen Anlagen reduzieren würde und andererseits bei der GRS die Konzentration auf die eigenen Programmentwicklungen (ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS) notwendig war, insbesondere mit Blick auf die Bereitstellung einer gekoppelten Version zur vollständigen Analyse schwerer Unfälle in KKW. Dazu wiederum mussten die personellen Kräfte stark gebündelt werden, so dass die Beteiligung an der Kooperation zu ASTEC nicht sinnvoll mit entsprechender Personalstärke aufrechterhalten werden konnte. Hinzu kam auch, dass IRSN die Entwicklung in den zurückliegenden Jahren zunehmend eigenständig fortgeführt hatte und auch ursprünglich durch die GRS maßgeblich entwickelte Programmteile (CPA) unter eigener Regie veränderte und weiterentwickelte. So

hatte sich schon zu Beginn des Jahres 2014 gezeigt, dass IRSN das AFP-Modul für die Modellierung des Spaltprodukt- und Aerosolverhaltens („Aerosol- and Fission Product“) durch eine eigene Entwicklung ersetzt hatte. Damit reduzierte sich der durch GRS-Aktivitäten abgedeckte Anteil der ASTEC-Module noch weiter und Synergieeffekte aus der COCOSYS-Entwicklung verschwanden. Letztlich muss das Auslaufen der Kooperationsvereinbarung im März 2015 als offizielles Ende der Zusammenarbeit dokumentiert werden. Davon unbeeinflusst nahm die GRS die Verantwortung für die zugesagten Arbeiten in allen noch laufenden Forschungsvorhaben und Arbeitspunkten (siehe Beteiligung zu CESAM und JASMIN bzw. CPA-Manual) weiterhin konsequent wahr und führte die Arbeiten erfolgreich zu Ende. Mit Beendigung des CESAM-Vorhabens im März 2017 und Abschluss der Beiträge mit ASTEC im Rahmen eines BMU-Vorhabens sind dann alle Verpflichtungen erfüllt und die Aktivitäten mit ASTEC bei der GRS auch offiziell beendet worden.

### **6.3.2 WGAMA-State-of-the-Art (SOAR)-Bericht zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung (MCCI)**

Nach Ende des OECD-MCCI2-Projektes war als eine der Schlussfolgerungen dem CSNI empfohlen worden, einen State-of-the-Art-Bericht (SOAR) zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung, inklusive des Forschungsstands zur Kühlbarkeit eines MCCI-Pools durch Flutung mit Wasser, zu verfassen. Die Aktivität war von der WGAMA im Jahr 2012 aufgegriffen worden und die GRS hat sich hieran aktiv in einer entsprechenden Arbeitsgruppe beteiligt. Die Arbeitsgruppe war durch Mitarbeiter von folgenden Organisationen besetzt: ANL (USA), AREVA (Deutschland), CEA (Frankreich), CSN (Spanien), EDF (Frankreich), FAI (USA), GRS (Deutschland), IBRAE (Russland), IRSN (Frankreich), KIT (Deutschland), NRA (Japan), NRC (USA), RSE (Italien).

Die GRS hatte bereits im Rahmen des Projektes RS1508 bei der Erstellung eines ersten weitgehenden Entwurfes des SOAR bis Ende 2014 mitgewirkt und die redaktionelle Verantwortung des Kapitels 4 zum Status von Modellen und Modellunsicherheiten übernommen /SPE 14b/.

Im Rahmen von RS1532 wurden die redaktionellen Arbeiten zur Fertigstellung der endgültigen Fassung des SOAR bis hin zu seiner Verabschiedung auf der CSNI-Board-Sitzung im April 2016 durch die GRS begleitet und unterstützt. Im März 2015 fand ein Treffen der Schreibgruppe in Paris statt, bei welchem der aktuelle Stand der Kapitel fünf (Anwendung auf Reaktoranlagen) und sechs (Zusammenfassung und Empfehlungen)



besprochen wurde. Zu diesem Zeitpunkt waren diese zwei Kapitel noch auf frühem Entwurfsniveau. Bei Kapitel fünf gab es einen personellen Wechsel in der federführenden Autorenschaft. Weitere Verzögerungen entstanden durch verspätete Beiträge von japanischer Seite, bedingt durch personelle Wechsel bzw. Umstrukturierungen bei den japanischen Organisationen. Im Frühjahr 2016 wurde der abschließende Entwurf des SOAR fertiggestellt und gegengelesen. Der vollständige Entwurf wurde an CSNI übergeben und auf der Sitzung im April 2016 verabschiedet.

Die zuvor angestrebte Idee, das Kapitel fünf zu den Anwendungen von MCCI-Codes auf Reaktoranlagen als eine Art systematisches Kompendium zur Vorgehensweise bei der Anwendung von generisch ausgelegten Rechenwerkzeugen (MCCI-Codes) auf zumeist nicht-generische Randbedingungen (tatsächliche Gegebenheiten in Reaktoranlagen) anzulegen (vgl. /SPE 14b/), ist in der endgültigen Fassung nicht weiter verfolgt worden. Stattdessen zeigt das Kapitel fünf in seiner endgültigen Fassung illustrativ einige tatsächlich verfolgte Vorgehensweisen bei der Verwendung von MCCI-Codes zur Untersuchung von möglichen Unfallabläufen in Anlagen. Dies zeigt, dass es trotz gutem Validierungsstand der Rechencodes große Unsicherheiten bei der Bewertung von MCCI-Phänomenen in realen Szenarien gibt, da der Einfluss spezieller Gegebenheiten bei solchen Unfallabläufen schwierig einzuschätzen ist.

Im abschließenden Kapitel sechs wurden folgende Empfehlungen für die zukünftige Ausgestaltung von Forschung zum Thema MCCI zusammengestellt:

- Es werden noch experimentelle Daten für die Langzeitphase (niedrige Leistungsdichte in der Schmelze, große Pooloberfläche, großer Betonanteil in der Schmelze, quasi-stationäre Phase) benötigt.
- Zukünftige Experimente zur Flutung der Schmelze von oben mit Wasser sollten das Risiko minimieren, dass die obere Kruste auf der Schmelze sich mit den Seitenwänden verankert. Ferner sollten in zukünftigen Experimenten Artefakte aufgrund einer nicht prototypischen Beheizung des Materials nach Möglichkeit vermieden werden. Eine Einschränkung der verfügbaren Experimente war bislang, dass erstarrtes oxidisches Material nicht weiter beheizt werden konnte.
- Der Übergang von MCCI mit langsamem Fortschritt der Betonerzörung (Wärmeübergang aus der Schmelze in Gegenwart von Gasblasen) zum Stopp der Betonerzörung (Wärmeübergang aus der Schmelze durch freie Konvektion ohne Gas) ist experimentell nicht abgesichert.

- Es gibt Unsicherheiten bei MCCI mit größeren Mengen an metallischer Schmelze in Ergänzung zur oxidischen Schmelze (Bedingungen für Stratifikation, Wärmeübergang zwischen den Schichten, Oxidationsvorgänge). Auch der Einfluss der Bewehrung im Beton ist nicht ausreichend geklärt.
- Die Bedingungen für den Transport von Schmelze aus dem RDB in die Reaktorgrube sind unsicher. Hierzu zählen als mögliche Einflussfaktoren auch der Eintrag von Schmelze in eine mögliche Wasservorlage (evtl. Schüttbettbildung), die Schmelzeausbreitung unter Wasser, ein mögliches heterogenes Ergebnis der Schmelzeausbreitung in der Reaktorgrube sowie mehrere Ergüsse von Schmelze in die Reaktorgrube.
- Der mögliche Einfluss von Verunreinigungen im Wasser (wie beim Unfall in Fukushima unterstellt) auf den Unfallablauf während der Kühlung von MCCI nach Flutung der Schmelze wird als generisches Forschungsthema gesehen. Hierbei sind die Einflüsse auf die bei dem OECD-CCI-Projekt identifizierten Kühlmechanismen „Water Ingression“ und „Melt Eruption“ unklar, sowie auch auf die Spaltproduktrückhaltung in der Wasservorlage insgesamt.
- Die Kühlbarkeit einer Kernschmelze unter MCCI-Bedingungen kann im Hinblick auf existierende oder zukünftige Anlagen durch folgende Maßnahmen verbessert werden:
  - Möglichst frühe Flutung der Schmelze nach Beginn des MCCI
  - Verwendung eines Betons mit viel Gas

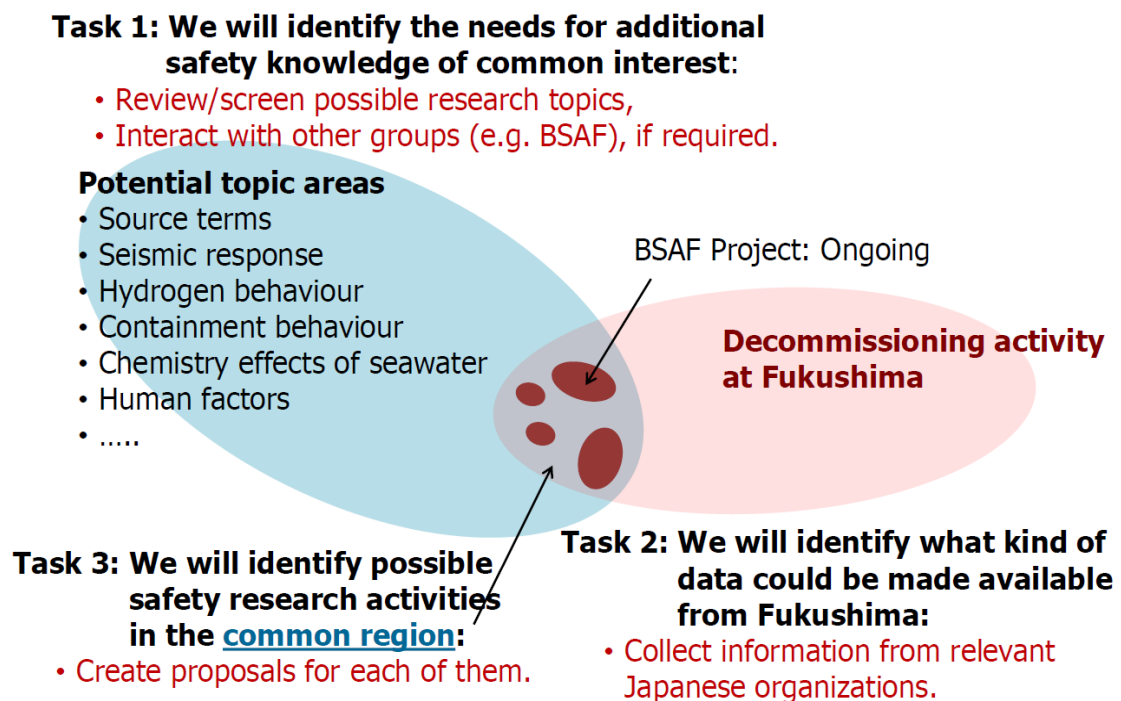
### **6.3.3 Teilnahme an der CSNI Senior Expert Group (SEG) zu Safety Research Opportunities post-Fukushima (SAREF)**

Im Rahmen des Vorhabens erfolgte die Beteiligung an der im November 2013 auf Betreiben verschiedener internationaler Organisationen und mit Empfehlung aus Japan von der OECD/CSNI ins Leben gerufenen „Senior Expert Group (SEG)“ zu „Safety Research Opportunities Post-Fukushima“. Die SEG bestand aus erfahrenen technischen Experten aus Aufsichtsbehörden und Technischen Safety Organisationen verschiedener Länder und Experten aus Japan, die an der Vorbereitung und Planung des Rückbaus der Anlagen in Fukushima Daiichi beteiligt sind. Die GRS vertrat im Auftrag des BMWi die deutschen Interessen in dieser Arbeitsgruppe des CSNI. Das Mandat der Arbeitsgruppe

wurde vom CSNI Ende 2013 für 2 Jahre ausgegeben. Die Gruppe soll offene Forschungsschwerpunkte erarbeiten, die im Zusammenhang mit den Ereignissen in Fukushima Daiichi stehen und ggf. durch den Rückbau bzw. beim Rückbau der Anlagen durch entsprechende Untersuchungen und Probenahmen etc. behandelt werden können:

„CSNI-Mandate: Create a process for the CSNI to identify and follow up on opportunities for addressing safety research gaps and advancing safety knowledge, based on information from Fukushima. This objective will also support safe and prompt decommissioning in Japan.“

Die wesentlichen Aktivitäten in der SEG on SAREF sind in Abb. 6.14 dargestellt.



**Abb. 6.14** Schema der wesentlichen Aktivitäten in der Senior Expert Group (SEG) zu Safety Research Opportunities Post-Fukushima (SAREF)

Die SEG zu SAREF identifizierte im Rahmen ihrer regelmäßigen Treffen unten aufgelistete Themen für die durch den Rückbau der Anlagen in Fukushima Daiichi wesentliche Informationen durch Probenahmen und Inspektionen gewonnen werden können und wo generell Forschungsbedarf besteht. Sie legte Verantwortliche fest, die für das Zusammentragen der wesentlichen Informationen zum bisherigen Stand des Wissens verantwortlich zeichnen, wobei GRS für Fragen des Containmentverhaltens und des Venting

des Containments als auch zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung verantwortlich zeichnete:

- Severe Accident Progression Recovery Phase
  
- 1. In-vessel Phenomena (France)
  
- 2. Primary System Failure (Sweden)
  
- 3. Primary Vessel Failure (Sweden)
  
- 4. Molten Core Concrete Interaction (Germany)
  
- 5. Pool-Scrubbing (Switzerland)
  
- 6. Containment Failure and Venting (Germany)
  
- 7. Fission Product Behaviour & Source Terms (Canada)
  
- 8. Hydrogen distribution & combustion (Switzerland)
  
- SSC Performance and Condition
  
- 9. Salt Water and concrete debris effects (USA)
  
- 10. Mission Time and System Survivability
  
- 10.1 Cable and sealing (Finland) - related to Containment Integrity
  
- 10.2 Instrumentation (USA)
  
- 10.3 Pump seals (USA)
  
- 10.4 Steam driven RCIC pump (USA)
  
- 10.5 Relief valve and piping (USA)
  
- 10.6 Instrumentation and Control (USA)
  
- Recovery Phase

11. Long-term Accident Management and Recovery (Japan)
12. Debris and Waste Management (Japan)
  - General/already Addressed
13. External Events and Multi-unit Risk, and Loss of Ultimate Heat Sink (Korea, Italy)
14. Robustness of Electrical Systems (France)
15. Human Performance (Korea)
16. Seismic Response (Japan)
17. Spent Fuel Pool (USA)
18. Aging and environmental qualification of Systems, Structures, and Components

Die SEG zu SAREF bewertete das Interesse – „safety research interest“ und „decommissioning interest“ – gemeinsam („consensual basis“). Es wurde bewertet, ob das Interesse an den spezifizierten Themen aus Sicht der beiden Themen hoch, mittel oder niedrig ist und inwiefern die Wissenslücken sicherheitsrelevant sind. Dabei wurde auch bewertet, welche Informationen aus dem Rückbau der Anlagen gewonnen werden können und welchen Aufwand dies ggf. erfordern könnte. Aus dieser Bewertung bzw. dem „Ranking“ ergaben sich folgende Themen:

- Severe accident progression:
  - in-vessel phenomena (H-H);
  - ex-vessel phenomena (H-H);
  - containment failure and venting (H-H);
  - fission product behaviour and source term (H-H).
- Stress corrosion cracking performance and conditions:
  - mission time and system survivability (H-L).
- Recovery phase:
  - long-term accident management and recovery (M-H).

Weitere Empfehlungen betrafen langzeitige als auch kurzzeitige gemeinsame internationale Aktivitäten. Die SEG zu SAREF empfahl langzeitige Aktivitäten zu folgenden Themen:

- In-vessel phenomena and Reactor Pressure Vessel failure;
- Ex-vessel phenomena;
- Fission Product database compilation and measurement;
- Mission time and system survivability.

Die SEG zu SAREF empfahl zunächst in Vorbereitung der langzeitigen Aktivitäten folgende zwei kurzzeitige Aktivitäten zu organisieren:

- Preparatory studies for fuel debris analysis (PreADES Projektvorschlag);
- Examinations inside reactor buildings (RBs) and PCVs and water sampling (ARC-F Projektvorschlag).

Der in 2016 erstellte Bericht der SEG fasst die laufenden Forschungsaktivitäten zusammen, enthält die von den Beteiligten erstellten Detailberichte als Anhang, zeigte die existierenden Lücken im Wissen zu den unterschiedlichen Themen auf und bewertete diese (Ranking), und beendete damit die Arbeit dieser SEG.

#### **6.3.4 Teilnahme an Treffen zum Coriumverhalten im Rahmen von NUGENIA**

Die Plattform NUGENIA ist das Ergebnis des Integrationsprozesses von drei großen Netzwerken im Bereich der Reaktorsicherheitsforschung:

- Säule eins der „Sustainable Nuclear Energy Technology Platform (SNETP)“, vgl. /SNE 17/, die sogenannte „Technology Working Group Gen II & III“
- Das NULIFE-Netzwerk zum Lebensdauer-Management von nuklearen Anlagen
- Das Netzwerk SARNET zu Kernschmelzunfällen

Das von der EU im sechsten und siebten Rahmenprogramm geförderte Forschungsnetzwerk SARNET zu Kernschmelzunfällen hatte u. a. als Zielsetzung, die Netzwerkverbindung auch ohne Förderung durch die EU aus sich selbst zu erhalten.

Der ehemalige Arbeitspunkt WP5 in SARNET2, „MCCI and Debris Coolability“, wird durch die unter dem Dach von NUGENIA angesiedelten Unterbereiche eins und zwei der Technical Area 2 (TA2) „Severe Accidents“ fortgeführt: TA2.1 „In-Vessel Corium/Debris Coolability“ und TA2.2 „Ex-Vessel Corium Interactions and Coolability“. Als Ausgestaltung des sich selbst erhaltenden Netzwerkes findet seit 2014 einmal jährlich ein Treffen der Gruppen TA2.1 und TA2.2 statt, auf dem die beteiligten Organisationen ihre Fortschritte auf dem jeweiligen Forschungsgebiet berichten und Überlegungen zu möglichen gemeinsamen Forschungsvorhaben diskutiert werden. Diese Treffen werden zeitnah am selben Tagungsort ausgerichtet, um den von den Organisationen entsandten Experten einen Besuch beider Fachgruppen zu ermöglichen. Die Beteiligung liegt bei ca. 40 Personen bei den beiden Treffen, darunter auch nicht-europäische Organisationen wie z. B. KAERI aus Korea, die über eine Mitgliedschaft bei NUGENIA verfügen.

In den beiden Fachgruppen TA2.1 und TA2.2 wurden Fortschritte aus den wichtigsten internationalen Gemeinschaftsprojekten, wie z. B. den von der EU im Rahmen von FP7 geförderten Forschungsvorhaben NUGENIA+ und CESAM, berichtet, wie auch Fortschritte aus nationalen oder bilateralen Forschungsaktivitäten. Ebenso wird über die Nutzung der in gemeinschaftlichen Forschungsvorhaben wie SAFEST und ALISA international zugänglich gemachten Experimentieranlagen berichtet.

Darüber hinaus wurden Ideen und Vorschläge für zukünftige gemeinsame Projekte besprochen. Mit Relevanz für die Modellentwicklung in COCOSYS hatte die GRS sich an einem gemeinsamen Projektentwurf E<sup>2</sup>VR zum Ex-Vessel-Verhalten von Kernschmelze beteiligt, der von CEA als Initiator vorbereitet wurde und auf die H2020-Ausschreibung der EU im Oktober 2016 eingereicht wurde. Der Projektvorschlag zu E<sup>2</sup>VR greift u. a. Empfehlungen des OECD-SOAR zu MCCI auf (vgl. Abschnitt 6.3.2), darunter die Verbesserung von Modellen für die Langzeit-Wechselwirkung zwischen Schmelze und Beton mit Übergang zum Stopp der Betonerosion sowie für die Ausbreitung von Schmelze unter Wasser. In der Entscheidung der EU vom März 2017 ist der Projektvorschlag zu E<sup>2</sup>VR abgelehnt worden. Der Projektvorschlag soll in überarbeiteter Fassung in eine zukünftige Ausschreibung der EU eingebracht werden.

Das nächste Treffen der Nugenia-TA2.1 und -TA2.2-Gruppen ist für das Frühjahr 2018 geplant.

## **7 Nutzerrückflüsse und Qualitätssicherung**

### **7.1 Benutzerunterstützung und Rückflüsse aus der Anwendung**

Das Interesse der Anwender an neu verfügbaren Modellen in COCOSYS ist generell sehr hoch, da die zugrunde liegenden Phänomene aktuell im Brennpunkt des Interesses internationaler Experten stehen und Analysen von Unfallvorgängen ohne Berücksichtigung dieser Phänomene dem Vorwurf entgegen treten müssen, dass diese möglicherweise nicht entsprechend dem internationalen Stand von Forschung und Technik durchgeführt worden sind. Obwohl der Qualitätssicherung (durch Validierung und intensiven Testen) eine hohe Priorität in den entsprechenden F&E-Programmen der GRS eingeräumt wird, ist aufgrund der Komplexität von Codes wie COCOSYS zu erwarten, dass zeitgleich zur Modellentwicklung Probleme mit neuen Modellen bei internen und externen Anwendern identifiziert werden, die in engem zeitlichem Kontext zu diesen Arbeiten behoben werden sollten. Es ist auch möglich, dass durch den Einbau neuer Modelle Seiteneffekte auf bestehende Berechnungsmethoden ausgelöst werden, die nicht durch das entwicklungsnahe Testen ausgefiltert worden sind. Der Informationsrückfluss von internen und externen Anwendern wird daher kontinuierlich im Hinblick auf solchen Modelländerungsbedarf aufgenommen und geprüft.

Im Bearbeitungszeitraum dieses Vorhabens wurde eine Vielzahl von Nutzerrückflüssen zu Problemen mit dem Code ausgewertet und für die Verbesserung des Codes genutzt. Nutzer sind mit einer Bereitstellung von korrigierten bzw. modifizierten Programmversionen und bei der Datensatzerstellung bzw. bei Auswertungen von Rechnungen unterstützt worden.

#### **7.1.1 Installationsprogramm**

Für das Betriebssystem Windows wurde ein gemeinsames Installationsprogramm für COCOSYS-ATHLET/ATHLET CD entwickelt. Der für COCOSYS zuständige Teil dieses Installationsprogramms stellt folgende Untereinheiten des Codesystems COCOSYS auf dem System des Anwenders bereit: Die verschiedenen COCOSYS-Hauptprogramme, die notwendigen Werkzeuge für die Kommunikation der COCOSYS-Hauptprogramme untereinander und die benötigten Werkzeuge für die Auswertung der Rechnungen. Darüber hinaus werden die für den Ablauf von COCOSYS benötigten Umgebungsvariablen erzeugt. Die Herausgabe der GRS-Programme mittels eines Windows-Installationsprogramms vereinfacht die Installation für den Nutzer wesentlich, gleichzeitig verringert sich



die Zahl von Problemen bei der ersten Anwendung der GRS-Programme. Die Entwickler können sich nun auf eine definierte Laufzeitumgebung beim Anwender verlassen, wodurch die Bereitstellung von Hilfsprogrammen und die Fehlersuche beim Anwender deutlich vereinfacht werden.

### **7.1.2 Restart-Fähigkeit**

Im Zuge der Arbeiten zur COCOSYS-CoPool-Kopplung wurde festgestellt, dass die Restart-Funktion (das ist diejenige Funktion in COCOSYS, die ein Wiederstart der Rechnung von vordefinierten Zeitpunkten erlaubt) für einzelne Modelle (FRONT zur H<sub>2</sub>-Verbrennung, die nasse Resuspension, die Iodatbildung, Ausgabe vom AFP-Modell) nicht ordnungsgemäß funktionierte. Korrekturen wurden durchgeführt und anhand eines komplexen Testbeispiels (in welchem viele Modelle angesprochen werden) erfolgreich überprüft.

### **7.1.3 COCOSYS-CoPool-Kopplung**

Weiterhin wurden einzelne, für die COCOSYS-CoPool-Kopplung benötigte Schnittstellenroutinen im Hinblick auf den Rechenzeitbedarf für gekoppelte Rechnungen verbessert. Der Rechenzeitbedarf für gekoppelte Rechnungen mit CoPool für einen THAI-Versuchs konnte beispielsweise um einen Faktor 7 reduziert werden.

### **7.1.4 Sprüh-Modell**

Für eine erfolgreiche Implementierung von Modellen in COCOSYS durch fremde Institute ist eine Unterstützung der GRS erforderlich, da häufig COCOSYS-spezifische Randbedingungen zu beachten sind. Das von der Ruhr-Universität Bochum (RUB) im Rahmen einer Dissertation entwickelte Modell zum sprühstrahlinduzierten Mitriss von Atmosphäre („Entrainment“) wurde von der GRS in die aktuelle COCOSYS-Version übernommen. Diese Modellerweiterung zum sprühstrahlinduzierten Atmosphärenmitriss ermöglicht jetzt in Verbindung mit dem sogenannten IVO-Sprühmodell und der instationären, inkompressiblen Impulsgleichung für Atmosphärenverbindungen sowie einer speziell angepassten Nodalisierung die Simulation der Wirkung von Sprühsystemen auf die Gasverteilung im Containment. Die Validierung dieses Modells durch RUB zeigt in den nachgerechneten Experimenten eine deutliche Verbesserung von Simulationen zur Schichtungsauflösung und somit zur Gasverteilung.

### **7.1.5 Rivulet-Modell**

Von KIT wird für COCOSYS ein Modell zum Verhalten von Rinnsalen (Rivulets) an einer Stahlschale entwickelt. Dieses Modell wird zur Simulation eines System zur Außenkühlung des Sicherheitsbehälters durch Berieselung mit Wasser, wie z. B. beim „Passive Containment Cooling Systems (PCCS)“ des von Westinghouse angebotenen AP-1000 verwendet. GRS leistete Unterstützung bei der Implementation des Modells im Thermohydraulik-Modul COCOSYS-THY. Das Modell liegt für die Nutzung der GRS in der Entwicklerversion von COCOSYS vor, muss aber noch für die Anwendung auf einen Testfall bzw. für eine erste Validierung ertüchtigt werden. Versuchsdaten für eine solche erste eigene Validierung des Rivulet-Modells könnten der GRS durch Nutzung von im Rahmen des EU-Projekts ALISA bereit gestellten Experimenten zur Verfügung gestellt werden.

### **7.1.6 Drainage an die Wand**

Von der RWTH Aachen wurden erhebliche Instabilitäten von Rechnungen bei Nutzung sogenannter DRAIN\_WALL-Verbindungen (Drainage an die Wand) festgestellt, so dass benötigte Rechenzeiten deutlich gestiegen waren bzw. auch Programmabbrüche auftraten. Ursache der Instabilitäten war die "symmetrische" Berechnung der partiellen Ableitungen in der Jakobimatrix, mit der Maßgabe, dass ein Tausch von Start- und Zielzone bei atmosphärischen Verbindungen zu identischen Resultaten führen muss. Eine Störung der Integrationsgröße in negativer Richtung führt bei Drainageverbindungen unter Umständen zu negativen Massenströmen und folglich zu einer Unterbrechung und Reduktion der Zeitschrittweite. Mittels der Einführung eines Flags wird die neue, symmetrische Berechnung der partiellen Ableitung nur noch für atmosphärische Verbindungen durchgeführt. Die betrachteten Testrechnungen laufen dann wieder stabil.

### **7.1.7 I<sub>2</sub>/Farbe-Modell**

AREVA hatte im Rahmen des Vorhabens 1501457 zur Spaltproduktverteilung im Containment festgestellt, dass Modellverbesserungen bei der trockenen Iod-Farbe-Wechselwirkung auch unerwünschte Auswirkungen auf die Wechselwirkung unter nassen Bedingungen hatten. So wurden für nasse Bedingungen teils unrealistische Ablagerungen an Farbe berechnet. Das Modell im COCOSYS-Modul AFP wurde nun so modifiziert, dass unter nassen Randbedingungen das frühere, in der Version V2.4v3 verfügbare Modell verwendet wird. Allerdings sind auch hier noch Modellverbesserungen notwendig. Die

Korrekturen wurden anhand OECD-BIP G-4, RTF-3B und THAI-Iod-24 überprüft. Unter nassen Randbedingungen werden im Iod-Farbe-Modell nun ähnliche Ergebnisse, wie sie bei der früheren Anwenderversion V2.4v3 erzielt wurden, berechnet. Ein Fehler bei der Organoiodbildung (Reaktionen 7 und 14) wurde ebenfalls behoben. Der Einfluss in Bezug auf die Organoiodbildung zeigte sich im Versuch RTF 3B als erheblich.

#### **7.1.8 Rückflüsse zu CCI**

Mit der COCOSYS-Version V2.4v4 wurde erstmals das CCI-Hauptmodul auch an externe Anwender weitergegeben. Es beinhaltet das Modell zur Simulation der Schmelze-Beton-Wechselwirkung. Die armenische TSO NRSC hatte CCI unter Nutzung einer speziellen Code-Version bereits vorher für das KKW Armenien-2 (WWER-440/W270) angewendet. Zwischen der von NRSC verwendeten und der aktuell freigegebenen Anwenderversion V2.4v4 wurden u. a. Modelloptionen in CCI geändert und die Eingabe für die Schmelze-Beton-Wechselwirkung auf die COCOSYS-typische Eingabe-Struktur geändert. Die Wiederholung der früheren NRSC-Rechnung mit COCOSYS V2.4v4 zeigte, dass einige Verbesserungen bei der Benutzerfreundlichkeit des CCI-Moduls erforderlich waren, u. a. funktionierten Restart-Rechnungen mit CCI nicht. Die Restart-Option wurde korrigiert und es erfolgen vorab erweiterte Tests auf Konsistenz der Nutzereingabe vor Starten der Simulation. In der nächsten COCOSYS-Version sind Restart-Rechnungen mit CCI wieder möglich, was insbesondere für CPU-aufwändige Anlagenrechnungen erforderlich ist. Weiterhin werden modulinterne Fehlermeldungen, die bisher u. U. verloren gingen, jetzt auch in COCOSYS-Ausgabedateien geschrieben. Als Konsequenz der Anwendung durch externe Nutzer wird zukünftig die Konsistenz von CCI und der zugehörigen Version der MDB in COCOSYS geprüft.

#### **7.1.9 Rückflüsse zu AFP**

Von AREVA wurde im Laufe der Arbeiten zum Vorhaben 1501457 festgestellt, dass eine kombinierte Verwendung der Eingabeoption für die systematische Variation von Modellparametern (oder von Anfangs- und Randbedingungen) unter Nutzung des Parameter-Moduls und des umstrukturierten AFP-Moduls Probleme bereitet. Das Parameter-Modul in COCOSYS wurde daraufhin erweitert. Ferner wurden noch zahlreiche Stabilitätsprobleme identifiziert. Diese wurden untersucht und größtenteils behoben. Die Korrektur zur Verwendung der Parameter-Option in Kombination mit Speziespfaden im neuen AFP wurde anhand eines einfachen Beispiels erfolgreich getestet. Eine entsprechend korrigierte Code-Version wurde an AREVA übergeben. Die Qualität des neuen AFP-Moduls

wurde weiter verbessert, allerdings ist in einzelnen Phasen die Rechenzeit erheblich. Ursache sind u. a. die hohen Transferraten bei gleichzeitig kleinen Volumina (z. B. Filmvolumina). Hier sind noch weitere Untersuchungen notwendig.

## **7.2 Qualitätssicherung**

Kernpunkte der Arbeiten zur Qualitätssicherung sind

- das Konfigurations- und Änderungsmanagement mittels SVN/Teamforge
- zeitnahe Aufarbeitung von Anwender-Rückflüssen (siehe Abschnitt 7.1)
- das parallel laufende Validierungsprojekt RS1544 sowie Vorgänger
- das Regressionstesten

Das Konfigurations- und Änderungsmanagement wurde im laufenden Vorhaben i. W. für drei COCOSYS-Versionen weiter verfolgt:

- für die aktuelle COCOSYS-Anwenderversion V2.4v4, die bei externen Anwendern verteilt ist
- für die in Vorbereitung befindliche Version V2.4v5 zur erstmaligen Integration von COCOSYS in das herauszugebende Softwarepaket AC<sup>2</sup>. Diese Version umfasst Korrekturen von Fehlern, die in V2.4v4 identifiziert und behoben wurden.
- für die aktuelle Entwickler-Version V3, welche den Fortschritt der Modelle aus diesem Vorhaben umfasst (z. B. neues AFP, mehrere MCCI-Pools, ...)

Alle Änderungen im COCOSYS-Programmsystem sind damit dokumentiert und daher nachvollziehbar.

### **7.2.1 Umstellung der Kommunikationstechnik zwischen Untermodulen in COCOSYS**

Die Kommunikation der COCOSYS-Module untereinander erfolgt bislang bis einschließlich der Version V2.4v4 mittels des Prozesskommunikationswerkzeugs "Parallel Virtual Machine" (PVM). Dieses Werkzeug wird nicht von der GRS entwickelt und ist frei verfügbar. Seit etwa 2010 wird PVM von den Autoren nicht mehr gepflegt, so dass PVM unter Windows 7 zwar noch funktioniert, sich trotz verfügbarem Quellcode aber nicht mehr

übersetzen lässt. Es zeigen sich bereits einzelne Probleme mit der vorhandenen Binärversion von PVM, zum Beispiel können einzelne Routinen der Bibliothek und die Bibliothek für die Programmiersprache FORTRAN nicht mehr verwendet werden. PVM wurde für die COCOSYS-Version V3 darum durch das Prozesskommunikationswerkzeug "Message Passing Interface" (MPI) ersetzt. COCOSYS greift auf die PVM-Bibliothek über in C geschriebene Unterprogramme zu. Diese wurden so angepasst, dass sie statt auf PVM nun auf MPI zugreifen. Der Übersetzungsprozess wurde entsprechend angepasst. Die so erweiterten Schnittstellenroutinen für MPI sind in den Entwicklungszweig von COCOSYS integriert worden. Zusätzlich wurde ein Quellcode geschrieben, der das Laufzeitverhalten von PVM nachstellt. Dadurch beschränken sich die Änderungen am eigentlichen Quellcode des COCOSYS-Haupttreibers und den Modulen auf ein Minimum.

## **7.2.2 Kopplung von ATHLET, ATHLET-CD und COCOSYS**

Für V2.4v5 wie auch für V3 wird eine Integration in AC<sup>2</sup> und daher die Kopplungsmöglichkeit mit ATHLET bzw. ATHLET-CD vorgesehen und es wurden entsprechende Arbeiten zum Erstellen gekoppelter Versionen sowie zur Sicherstellung derer Funktionsfähigkeit durchgeführt. Gekoppelte Rechnungen von ATHLET-CD und COCOSYS unter Verwendung der jeweils neuesten, verfügbaren Modelloptionen in der Entwicklerversion V3 (z. B. Zonenfluten, Schmelze- und Isotopenübertrag zwischen Primärkreis und Containment) werden zurzeit bei der GRS verstärkt u. a. im Rahmen des OECD-Projektes BSAF genutzt, um den Unfallablauf in Fukushima zu analysieren. Die GRS beabsichtigt, ihre beiden Codeentwicklungen ATHLET/ATHLET-CD für den Primärkreis und COCOSYS für das Containment unter dem Namen AC<sup>2</sup> enger aneinander zu binden und gemeinsam zu präsentieren und als ein Paket herauszugeben. Hierfür werden zurzeit verschiedene Kopplungstechniken erwogen. Im Hinblick auf die neue Code-Strategie der GRS und zur Unterstützung der internen Anwendung von gekoppelten Rechnungen unter der Verwendung der jeweils aktuellsten Codeversionen waren im Projektzeitraum aufwendige Arbeiten zur Erstellung gekoppelter Code-Versionen nötig. Dazu wurde zunächst das Software-Archiv von ATHLET/ATHLET-CD direkt in dasjenige von COCOSYS (und zwar jeweils für Anwenderversion V2.4v5 und Entwicklerversion V3) importiert. Dadurch wird sichergestellt, dass die verwendete Codebasis in der gekoppelten Version und den Standalone-Varianten (d. h. COCOSYS ohne Anbindung an ATHLET/-CD) die gleiche ist. Dabei werden sowohl die Spezifika in COCOSYS selbst mit der internen Kopplung seiner Module mittels der Prozesskommunikationswerkzeuge PVM (V2.4v5) bzw. MPI (V3.0) berücksichtigt und andererseits die Anbindung der Codes

ATHLET und ATHLET-CD untereinander. Mit Fortschreibung des Modellstandes von ATHLET-CD war auch die Anbindung zwischen ATHLET und ATHLET-CD geändert worden, was Auswirkungen auf die Anbindung an COCOSYS hatte. Die ausführbaren gekoppelten Rechencodes ATHLET(-CD)/COCOSYS wurden für jede entsprechend des Modellstandes der ATHLET-CD-Version benötigte Kopplungstechnik übersetzt und für Anwendungen bereitgestellt. Die dazu benötigten Erweiterungen/Ergänzungen in der Softwareprojekt-Verwaltung wurden separat in das SVN-Repository eingepflegt. Dadurch lassen sich gekoppelte ATHLET/CD/COCOSYS-Rechnungen zukünftig inklusive des neuesten Modellstandes von ATHLET-CD testen, wobei die freigegebene Version als Referenz erhalten bleibt. Durch den so synchronisierten Übersetzungsprozess von COCOSYS und ATHLET/ATHLET-CD können Probleme in der Kopplung früh erkannt und behoben werden. Die Veröffentlichung eines gemeinsamen, konsistenten GRS-Programmpakets AC<sup>2</sup> wird dadurch vereinfacht, und die gekoppelte Version ist über einen längeren Zeitraum bereits intern validiert worden.

### **7.2.3 Regressionstesten**

Ziel der Regression-Tests ist es einerseits, Verbesserungen im Programm zu zeigen, 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 Einzelmodellen 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.

#### **7.2.4 Kontinuierliche Integration von Modellen in das Codesystem**

Zur unabhängigen Überprüfung der Korrektheit von Änderungen am Quellcode betreibt die GRS einen Jenkins-Server. Der Jenkins-Server automatisiert Prozesse bei der Softwareentwicklung und trägt damit zur Qualitätssicherung in der Entwicklung bei. Damit wird sichergestellt, dass gewisse Tests immer durchgeführt werden. So werden verschiedene Probleme direkt entdeckt wie zum Beispiel: Code kann durch Entwickler A, nicht jedoch bei Entwickler B übersetzt werden. Oder: Code kann mit Compiler X, nicht aber mit Compiler Y übersetzt werden. Der Jenkins-Server kann automatisch das Übersetzen der neuen Softwareversion und definierte Testrechnungen durchführen, sobald ein Entwickler Änderungen am Quellcode (z. B. für ein neues Modell) an das Softwarearchiv überträgt. Bei durch die einzelne Änderung hervorgerufenen Problemen wird der Entwickler per E-Mail informiert. Für COCOSYS sind entsprechende Aktionen durchgeführt worden, um das automatisierte Übersetzen und Erstellen von Testrechnungen für die Betriebssysteme Windows und Linux mittels Jenkins durchführen zu lassen. Die Testrechnung stellt die Lauffähigkeit der Anwendung sicher. Die Automatisierung spart dem Entwickler Zeit, da die Tests nicht manuell gestartet und ausgewertet werden müssen.

#### **7.3 Herausgabe einer neuen COCOSYS Version**

Im Verlauf dieses Vorhabens RS1532 wurden, wie in Abschnitt 7.2 beschrieben, drei Programmversionen gepflegt bzw. weiterentwickelt: V2.4v4, V2.4v5 und V3.0.

Im Mai 2016 wurde eine neue Überarbeitung (Patch) der Anwenderversion, COCOSYS V2.4v4, nach erfolgtem Regressionstesten frei gegeben und an Lizenzinhaber zum Download bereitgestellt. Nachfolgende Korrekturen an der Anwenderversion nach Mai 2016 werden in den Zweig für den Patch V2.4v5 eingepflegt. Dieser Patch wird auch für die erstmalige Einbindung in das Programmsystem AC<sup>2</sup> vorbereitet und nach Freigabe als offizielle Version in der Kopplung zu ATHLET bzw. ATHLET-CD an externe Institute weitergegeben. Vor Freigabe von V2.4v5 ist zurzeit geplant, diese Version analog zur Entwicklerversion V3 auf die Kommunikationssoftware MPI umzustellen und abschließend in der Regression zu V2.4v4 zu überprüfen. Die Freigabe von V2.4v5 ist für Ende 2017 geplant.

Da wesentliche Programmfortschritte, die für die durchgehende Simulation eines Unfalls mit Kernschmelze benötigt werden, insbesondere der Übertrag der Kernschmelze aus

ATHLET-CD nach COCOSYS, nicht in der Version V2.4 enthalten sind, ist die derzeitige Planung der GRS, die Fertigstellung und Freigabe einer neuen Version V3 möglichst zeitnah (~ Ende 2018) anzuvisieren. Aus diesem Grund soll das Regressionstesten der Version V3 gegenüber V2.4v4 bzw. V2.4v v5 im Validierungsvorhaben bereits zu Beginn 2018 gestartet werden, um frühzeitig Probleme dieser neuen Version zu identifizieren und zu beheben.





## **8 Zusammenfassung**

Die GRS entwickelt für aktuelle Fragestellungen der Reaktorsicherheitsforschung im In- und Ausland eigene Analysemethoden. Hierzu gehören die Rechencodes COCOSYS und ASTEC als Simulationscodes für Stör- und Unfälle im Sicherheitsbehälter bzw. der Gesamtanlage. In diesem Vorhaben ist die Entwicklung von eigenen Modellen der GRS für Vorgänge im Containment für die genannten Simulationscodes – insbesondere COCOSYS – fortgesetzt worden. Entsprechend der übergeordneten Zielsetzung wurden hierzu relevante Modelle für die wichtigsten zurzeit untersuchten Themen gemäß internationalem Stand von Forschung und Entwicklung (F&E) aktualisiert und verbessert.

Im Kern des Vorhabens standen die Arbeiten zur Verbesserung von Einzelmodellen und zur Erweiterung des Anwendungsbereiches von COCOSYS. Die durchgeführten Arbeiten lassen sich entsprechend der Modulstruktur von COCOSYS (Abb. 1.1) in die nachfolgend genannten drei Themenbereiche untergliedern:

### **8.1 Iod- und Spaltprodukte**

Bei der Umstrukturierung des Moduls AFP für das Aerosol- und Spaltproduktverhalten sind viele wesentliche Modelle für das Aerosolverhalten und für die Iodchemie auf zentral geführte und daher konsistente Bilanzen unter Nutzung der neuen Datenstrukturen in AFP umgestellt worden. Mit der neuen Struktur des AFP-Moduls werden nunmehr Unklarheiten aufgrund von nicht-eindeutigen Bilanzen, wie sie in der alten Version des AFP-Moduls auftreten konnten, ausgeschlossen. Dieser wichtige Meilenstein erlaubt eine größere Zuverlässigkeit der Simulation und ist auch Grundlage für viele Modellerweiterungen wie z. B. für das Abwaschen von Aerosolen von Wandflächen und den Einfluss von aerosolförmigen Silberpartikeln als Senke für flüchtiges Iod. Die Nutzung der neuen Abwaschsimulation mit höherem Detaillierungsgrad in der Nodalisierung zeigt einerseits zwar eine erheblich verbesserte Auflösung der Phänomenbeschreibung, stellt jedoch auch eine große Herausforderung an die Stabilität der Simulation dar. In den Punkten Stabilität und Effizienz wären weitere Verbesserungen wünschenswert.

Das Modell für die Ablagerung von Iod auf Farbanstrichen auf Strukturen unter verschiedenen Feuchtebedingungen ist maßgeblich anhand der Erkenntnisse aus dem OECD-BIP-Vorhaben und den Versuchen in der THAI-Anlage überarbeitet worden. Der Feuchteinfluss wird jetzt basierend auf dem Dampfgehalt und gleichzeitiger Reaktion von

Physisorption und Chemisorption simuliert. Erst damit lässt sich die Ausbreitung und Ablagerung von  $I_2$  auf Strukturen mit Farbanstrichen schlüssig interpretieren.

Mit den aus diesem Arbeitspunkt resultierenden Modellverbesserungen wurde zum internationalen Wissensstand bei der Interpretation aktueller Versuche zum Themenkomplex Aerosole/Spaltprodukte (in der THAI-Anlage sowie bei OECD-BIP und -STEM) beigetragen.

## **8.2 Thermohydraulik im SB**

Modelle zur Thermohydraulik im SB sind die Basismodelle in COCOSYS und weitgehend validiert, so dass nur noch punktuelle Erweiterungen vorgenommen wurden.

Die Simulation von Temperaturverteilungen in Wasserpools ist für die korrekte Simulation der Thermohydraulik im Sicherheitsbehälter, z. B. aufgrund des Einflusses der Oberflächentemperatur eines Wasserpools auf Wärme- und Stoffübergänge, von großer Bedeutung. In Zusammenarbeit mit ITWM Kaiserslautern wurde in diesem Vorhaben das 3D-Simulationswerkzeug CoPool, das bei ITWM entwickelt wird, für die Berechnung von Strömungsvorgängen in tiefen Wasserpools in der Anbindung an COCOSYS weiter verbessert und in Testrechnungen erfolgreich überprüft.

Mit derselben Motivation wurde das Modell in COCOSYS zum kompletten Auffüllen von Raumbereichen mit Wasser weiter verbessert. Mit dieser Modellerweiterung ist es möglich, unter Verwendung einer geeigneten Diskretisierung des Raumbereichs in mehrere atmosphärische COCOSYS-Zonen das Fluten von Zonen mit Wasser sowie einen entsprechenden Stofftransport zwischen Zonen mit dem verfügbaren Strömungslöser in COCOSYS zu berechnen. Mit diesem Modell können ebenfalls Temperaturschichtungen in wassergefüllten Raumbereichen und verbesserte Abschätzungen der Oberflächentemperatur berechnet werden. Dieses Modell erlaubt für viele Anwendungsbereiche, gerade auch zur Simulation der Vorgänge im Sumpf von Druckwasserreaktoren (DWR), eine realitätsnahe Simulation der Containment-Thermohydraulik mit nur wenig Mehraufwand an benötigter Rechenleistung. Bei Anwendung auf SWR-Druckabbausysteme wie z. B. in den Analysen für Fukushima traten noch Schwierigkeiten während starker transienter Vorgänge mit Einblasen von Dampf über die Abblaseleitungen der Sicherheitsventile in den Wasserpool auf. Gegenüber dem 3D-Modell CoPool gibt es generell viele Vereinfachungen und die Auflösung ist entsprechend der Nodalisierung von Raumbereichen mit der typischen Größe von COCOSYS-Zonen sehr viel gröber.

### **8.3 Ex-Vessel-Schmelze-Verhalten**

Zwei elementare Fortschritte in der Simulationstechnik sind auf diesem Gebiet erzielt worden: Zum einen ist für den Übertrag von Schmelze und der darin enthaltenen Spaltprodukte zwischen Primärkreis (ATHLET-CD) und Containment (COCOSYS) zum Zeitpunkt des RDB-Versagens ein vereinfachtes Modell erstellt worden, sodass Unfallabläufe mit Freisetzung von Kernschmelze ins Containment zukünftig durchgehend mit einer gekoppelten Rechnung mit ATHLET-CD/COCOSYS bzw. mit AC<sup>2</sup> simuliert werden können. Zum anderen wurde COCOSYS ertüchtigt, um Unfallabläufe mit mehreren Schmelzepools in verschiedenen Räumen zu simulieren. An der Fortschreibung des internationalen Standes von F&E zum Schmelzeverhalten im Containment wurde intensiv durch substantielle Beteiligung bei der Erstellung des State-of-the-Art-Berichtes der OECD/NEA zur Schmelze-Beton-Wechselwirkung mitgewirkt.

Die Simulation der Kühlung einer Ex-Vessel Schüttung von Schmelzepartikeln mit dem Rechencode COCOMO-3D der Universität Stuttgart ist eingehend untersucht worden, und es sind auf dieser Basis Vorschläge für eine zukünftige, auf Korrelationen basierende Simulation in COCOSYS abgeleitet worden. Im Hinblick auf ein zukünftiges Kernfängermodell sind die wichtigsten Merkmale von aktuellen Kernfängersystemen in Anlagendesigns und von verfügbaren Modellen zusammengestellt worden. Auf dieser Grundlage ist ein erstes Modellkonzept für die Simulation eines Kernfängers in COCOSYS erstellt worden. Die Arbeiten zu den beiden letztgenannten Themen (Entstehung und Kühlung von Ex-Vessel-Schüttbetten, Kernfänger) sollen in einem nachfolgenden Vorhaben fortgesetzt werden.

### **8.4 Weitere Arbeiten**

Neben diesen fachlichen Themenschwerpunkten wurden Arbeiten zur Pflege und Konsolidierung des COCOSYS-Quellcodes und der Code-Dokumentation (AP4) fortgeführt, erfolgte die Beteiligung an internationalen Aktivitäten (AP5) wie den EU-Projekten CESAM und JASMIN (beide zur Weiterentwicklung von ASTEC) sowie an fachgebietsbezogenen Initiativen der OECD/NEA, und es wurden kontinuierliche Qualitätssicherungsarbeiten (AP6) wie z. B. die Auswertung von Informationsrückflüssen der Anwender der Rechencodes durchgeführt.

## 8.5 Ausblick

Aufgrund der intensiven Beteiligung der GRS in internationalen Vorhaben (OECD-THAI, -BIP, -STEM), speziell auch in ausgewählten Benchmark-Aktionen sowie zur Nachrechnung der Ereignisse in Fukushima (OECD-BSAF), haben sowohl der Rechencode COCOSYS als auch eine erste gekoppelte Version von ATHLET / ATHLET-CD / COCOSYS (zukünftig als AC<sup>2</sup> bezeichnet) kontinuierlich eine steigende internationale Anerkennung erworben und sind für die Untersuchung noch offener Fragestellungen in der nationalen und internationalen Reaktorsicherheitsforschung sowie für die Fortschreibung des internationalen Standes von F&E von großer Bedeutung.

Die Vorgänge, die für eine realistische Prognose des Quellterms zu berücksichtigen sind, sind zahlreich und ihre Abhängigkeiten untereinander – insbesondere auch in der Wechselwirkung mit der Thermohydraulik – sehr komplex. Daher gibt es in vielen Einzelmodellen noch große Unsicherheiten, die zurzeit international weiterhin Gegenstand von vertieften Untersuchungen sind. Wichtige Rückwirkungen für die Entwicklung von Modellen stammen aus Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Für das neue, umstrukturierte AFP-Modul in der COCOSYS-Entwicklerversion, das bereits eine Reihe der Modelle für das Iod- und Spaltproduktverhalten beherbergt, ist die Wiederholung einer solchen Analyse zum Iodquellterm im Validierungsvorhaben RS1544 zu einem späteren Zeitpunkt noch vorgesehen, um erzielte Fortschritte in der Modellierung zu hinterfragen.

Für viele Vorgänge im Zusammenhang mit dem Verhalten der Kernschmelze im SB sind Einzelmodelle in COCOSYS verfügbar. Der Validierungsstand der Einzelmodelle ist als gut zu bezeichnen, allerdings erreichen die Experimente oft Grenzen im Hinblick auf die technische Machbarkeit und einige wichtige Fragestellungen konnten deshalb noch nicht geklärt werden. Experimente und Modelle sind aus diesem Grund für idealisierte und generische Randbedingungen bzw. Geometrien ausgelegt. Hierzu wird zurzeit eine Sensitivitäts- und Unsicherheitsstudie in RS1544 durchgeführt, aus welcher mögliche Hinweise für weitere Modellverbesserungen abgeleitet werden sollen. Abgesehen davon ist die Verbesserung der Anwendung von den Modellen auf reale Anlagen ein zentraler Punkt für zukünftige Entwicklungsarbeiten.

Der gekoppelte Einsatz der Codes COCOSYS, ATHLET und ATHLET-CD ist bisher nicht die Standardanwendung. Beim gekoppelten Betrieb wurden oftmals Probleme identifiziert, die nach Rücksprache zwischen Anwender und Codeentwickler individuell behoben werden mussten, damit der Rechenlauf für die zugrunde liegende Fragestellung zu

Ende geführt werden konnte. Eine Einschränkung des gekoppelten Betriebes lag vor allem darin begründet, dass bislang wegen fehlender Modelle noch kein durchgängiges Rechnen der späten Kernzerstörungsphase inklusive Durchschmelzen des RDB mit Schmelzaustrag in das Containment möglich war. Diese Einschränkungen sind weitgehend abgebaut. Eine wichtige Zielsetzung ist es zukünftig, die gekoppelte Anwendung im Rahmen des neuen GRS-Codepakets AC<sup>2</sup> im Hinblick auf Verlässlichkeit, Robustheit und Nutzerfreundlichkeit des neuen Codes zu stärken.



## Literaturverzeichnis

- /ALB 17/ Albiol, T.: IRSN views on pool-scrubbing modelling for volatile iodine, IPRESKA Workshop, Frankfurt am Main, June 21-22, 2017.
- /AST 10/ Astafyeva, V., Bezlepkin, V., Kukhtevich, V., Semashko, S., Sidorov, V.: Computational Analysis of Core Catcher Behaviour During Corium Relocations From Reactor Vessel, Proceedings of the 18th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE18, Xi'an, China, May 17-21, 2010.
- /BAK 17/ Bakalov, I., Spengler, C.: Interpretation of Recent MOCKA Experiments on MCCI of a Stratified Melt with Reinforced Concrete by the MEDICIS module of ASTEC, Posterbeitrag zur ERMSAR (European Review Meeting on Severe Accident Research) Konferenz 2017, Warschau, 2017  
Posterbeitrag zur ERMSAR (European Review Meeting on Severe Accident Research) Konferenz 2017, Warschau, 2017.
- /BEC 14/ Beck, S.: Verbesserung des Iod/Farbe-Modells; hier: Feuchteinfluss, TN Dez. 2014.
- /BEG 17/ Beghi, I.: Experimental insights on elemental iodine behavior in wet scrubbers, Frankfurt am Main, June 21-22, 2017.
- /BIP 14/ <https://www.oecd-nea.org/jointproj/bip-2.html>.
- /BIT 05/ Bittermann, D.: Main Features of the Core Melt Stabilization System of the European Pressurized Water Reactor (EPR), 18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT 18), Peking, China, August 7-12, 2005.
- /BLA 17/ Bläsius, C., Arndt, J., Sievers, J.: Vorschläge zur Fehlerbehebung und Weiterentwicklung der in ATHLET und ATHLET-CD implementierten Methoden zur Bewertung der Strukturintegrität metallischer Komponenten bei auslegungsüberschreitenden Belastungen, Technische Notiz zu RS1532, GRS-V-RS1532-1/2017, GRS Köln, 2017.



- /BUC 15/ Buck, M., Pohlner, G., Rahman, S., Berkhan, A.: Kühlbarkeit im Rahmen von Kernschmelzunfällen bei Leichtwasserreaktoren – Modellentwicklung und Validierung für ATHLET-CD und ASTEC, Abschlussbericht Reaktorsicherheitsforschung Vorhaben Nr. 1501381 Universität Stuttgart 2015.
- /BUC 15b/ Buck, M., Nowack, H., Marchetto, C., Torano, I. G. G., Muscher, H., Bachraty, M., Matejovic, P., D'Alessandro, C., Gremme, F., Koch, M. K., Kljenak, I., Sangiorgi, M., Hermsmeyer, S.: Synthesis of Validation of ASTEC V2.0rev3 Version, Technischer Bericht D20.24, CESAM, 2015.
- /BUC 16/ Buck, M., Pohlner, G.: Ex-Vessel Debris Bed Formation and Coolability – Challenges and Chances for Severe Accident Mitigation, International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP 2016), San Francisco, CA, April 17-20, 2016.
- /BUC 17/ Buck, M.: Persönliche Kommunikation, IKE Stuttgart / GRS Köln, 2017.
- /BUC 17b/ Buck, M., D'Alessandro C. et al.: Synthesis of validation of ASTEC V2.1rev0 and rev1 versions, D20.25, CESAM, 2017.
- /CEA 06/ CEA: Mitigation Concepts for new VVER 1000-91/99 Plants (Tianwan), Severe Accident Phenomenology Short Course, Cadarache, France, January 9-13, 2006.
- /CHA 11/ Chatelard, P. et al.: Synthesis of ASTEC V2.0 assessment Revision 1, SARNET2-ASTECD4.3 – Revision 1, January 2011.
- /CHA 15/ Chatelard, P., Nowack, H., Belon, S., Brillant, G., Carénini, L., Chailan, L., Cousin, F., Fichot, F., Marchetto, C., Spengler, C.: General specifications of new models or model improvements to be implemented into ASTEC V2.1 rev1, D20.23, CESAM, 2015.
- /CHA 16/ Chan, H.-W.: Assessment Study for Energy Dose Rate Model in COCOSYS, Technische Notiz im Rahmen von RS1532, GRS-V-RS1532-1/2016, GRS Köln, 2016.

- /CRA 11/ Cranga, M., Marchetto, C.: ASTEC/MEDICIS Module: General features, physical modelling and trends for the reactor case, ASTEC V2.0-rev1 Training Course, Cadarache, April 11- 15th 2011.
- /COU 15/ Cousin, F. et al.: Draft Manual ASTEC V2.1 SOPHAEROS module, Rapport no PSN-RES/SAG/2015-xx.
- /ECK14/ Eckel, J., Spengler, C.: Development and Validation of a new Direct Containment Heating (DCH) model for the integral code ASTEC, ICAAP-2014, Charlotte (USA), April 6-9, 2014.
- /ECK14b/ Eckel, J.: Development and validation of a new DCH model in ASTEC V2.1, ASTECV2/DOC/14-02, 2014.
- /FIO 11/ Fiorini, G. L., Vasile, A.: European Commission – 7th Framework Programme: The Collaborative Project on European Sodium Fast Reactor (CP ESFR), Nuclear Engineering and Design, Volume 241, Issue 9, September 2011, Pages 3461-3469, 2011.
- /FIS 98/ Fischer, K. Modellierung von Abscheidungs Vorgängen in Wasservorlagen - Modelling of Retention Processes in Water Pools, BF-R68.411-1, Battelle Ingenieurtechnik GmbH, 1998.
- /FIS 12/ Fischer, K. et al.: Experimental Determination and Analysis of Iodine Mass Transfer Coefficients from THAI Test Iod-23, 5th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR-2012), Cologne, Germany, March 21-23, 2012.
- /FUN 13/ Funke, F., Langrock, G., Dorsch, T., Gupta, S., von Laufenberg, B., Kühnel, A., Weber, G.: Deposition of molecular iodine on aerosol particles - Iod-26, OECD-NEA THAI-2 Project, 150 1420–Iod-26-FR, 2013.
- /FUN 14/ Funke, F.: Persönliche Mitteilung vom 18.11.2014.

- /FUN 15/ Funke, F., Gupta, S., Weber, G., Langrock, G., Poss, G.: Interaction of gaseous I<sub>2</sub> with painted surfaces and aerosols in large-scale THAI tests, Proceedings of the International OECD-NEA/NUGENIA-SARNET Workshop on the Progress in Iodine Behaviour for NPP Accident Analysis and Management, March 30, April 1, 2015 – Marseille (France).
- /FUN 16/ Funke, F., Langrock, G., Gupta, S., Schmidt, E., von Laufenberg, B., Freitag, M., Kühnel, A., Weber, G: Iod-Silber-Reaktion im Sumpff Versuch AW-3 (part 2), THAI V, 1501455 – FB/TR – AW3 (part 2), 2016.
- /GIR 17/ Girault, N. et al.: The European JASMIN Project for the Development of a New Safety Simulation Code, ASTEC-Na, for Na-Cooled Fast Neutron Reactors, Proceedings of ICAPP 2013, Jeju Island, Korea, April 14-18, (2013).
- /GOR 14/ Gornak, T., Iliev, O. et al.: A fast Algorithm for 3D Simulation of Thermal Stratification in Containment Pools of Nuclear Power Plants, Computers and Mathematics with Applications, 67, 2228-2239, 2014.
- /HAM 11/ Hamazaki, R. et al.: Evaluation on Core Melt Retention in Core Catcher of Toshiba's EU-ABWR, Proceedings of ICAPP 2011 Nice, France, May 2-5, 2011.
- /HER 16/ Herranz, L. et al.: Predictability of Source Term Behavior in SFR Containments, CIEMAT, Madrid, ICAPP 2016.
- /HOL 09/ Holm, J. et al.: Deposition of RuO<sub>4</sub> on various surfaces in a nuclear reactor containment, Journal of Nuclear Materials 392 (2009) 55-62.
- /HUM 17/ Humphries, L. L., Beeny, B. A., Gelbard, F., Louie, D.L., Phillips, J.: MELCOR Computer Code Manuals Vol. 1: Primer and Users' Guide2, Version 2.2.9541 2017, Sandia National Laboratories, Albuquerque, SAND2017-0455 O, 2017.

- /KIM 16/ Kim, E., Lee, M., Park, H. S., Moriyama, K., Park, J.-H.: Development of an Ex-Vessel Corium Debris Bed with Two-Phase Natural Convection in a Flooded Cavity, Nuclear Engineering and Design 298 (2016) 240–254, 2016.
- /KLE 12/ Klein-Heßling, W., Sonnenkalb, M., Spengler, C., Reinke, N., Weber, G., Schwarz, S., Arndt, S., Nowack, H., Bakalov, I., Pelzer, M.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum Iodverhalten, Abschlussbericht RS1190, GRS-A-3691 (Dez. 2012).
- /KLE 16/ Klein-Heßling, W., Arndt, S., Bakalov, I., Beck, S., Krönung, D., Nowack, H., Reinke, N., Schwarz, S., Spengler, C., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Gezielte Validierung von COCOSYS und ASTEC sowie Durchführung von Anwendungsrechnungen, Abschlussbericht, GRS-407, ISBN 978-3-944161-89-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2014.
- /KLE 17a/ Klein-Heßling, W. et al.: Erstellung und Testen des neuen Aerosol- und Spaltproduktmoduls (AFP) in COCOSYS, GRS-V-RS1532-2017-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 2017.
- /KLE 17b/ Klein-Heßling, W.: Kopplung zwischen CoPool und COCOSYS, GRS-V-RS1532-2/2017, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 2017.
- /KLE 17c/ Klein-Heßling, W., Nowack, H., Sonnenkalb, M.: New concepts in the aerosol and fission product module of the containment code system COCOSYS, NURETH-17, Xi'an, China, 2017.
- /LAN 12/ Langrock, G. et al.: Ergebnisse des THAI-Versuchs Iod-23, PTCC-G/2012/en/0025A, AREVA NP GmbH, Januar 2012.
- /LAU 14/ von Laufenberg, B., Colombet, M., Freitag, M.: Ergebnisse der Laborversuche zum Abwaschverhalten von unlöslichen Aerosolen, Berichts-Nr. /Report No.: 1501455–TR–AW3-LAB, Juli 2014.

- /LEZ 11/ Le Coz, P., Sauvage, J.-F., Serpantie, J.-P.: Sodium-cooled Fast Reactors: the ASTRID plant project, Proceedings of ICAPP 2011, Nice, France 2011.
- /LIN 16/ Lind, T., Jäckel, B., Suckow, D., Guentay, S.: A SUMMARY OF THE PSI INVESTIGATIONS ON IODINE CHEMISTRY IN THE PRESENCE ON IMPURITIES AND ADDITIVES, International Iodine Workshop, OECD, NEA/CSNI/R(2016)5, 2016.
- /MAG 06/ Magallon, D.: Characteristics of corium debris bed generated in large-scale fuel-coolant interaction experiments, Nucl. Eng. Des. 236 (2006) 1998–2009, 2006.
- /MAT 14/ Mathé, E.: Numerical Simulation STARK and Experimental Study ESSTIA, Study of the physicochemical transformations of sodium aerosols, Rapport n° PSN-RES/SAG/2014-00156, IRSN, 2014.
- /MIR 15/ Miradji, F. et al.: Modelling of Ru behaviour in oxidative accident conditions and first source term assessments, ERMSAR 2015.
- /MUN 07/ Mun, C. et al.: A Literature Review on Ruthenium Behaviour in Nuclear Power Plant Severe Accidents, HAL archives-ouvertes.fr, irsn-00177621, 2007.
- /MUN 09/ Mun, C. et al.: CURRENT STATUS ON RUTHENIUM CHEMISTRY IN THE CONTAINMENT OF A NUCLEAR REACTOR IN CASE OF A SEVERE ACCIDENT WITH AIR INGRESS, International Conference Nuclear Energy for New Europe 2009, Slovenia.
- /NOW 17/ Nowack, H.: DCH modelling in CPA, IR30.02, CESAM, 2017.
- /PEL 10/ Pelzer, M.: COCOSYS AIM-3 Validation – Revision: I2(g) interaction with dry painted surfaces, Technische Notiz GRS, Dezember 2010.
- /PIL 14/ Piluso, P. et al., OECD/SERENA Integrated Report (Steam Explosion Resolution for Nuclear Applications), OECD, 2014.

- /REN 15/ Reinke, N., Klein-Hessling, W., Schwinges, B.: CPA Module of ASTEC – Programme Reference Manual Version Rev. 1, ASTEC-V2/DOC/15-03, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2015.
- /SCH 14/ Schwarz, S.: Analyse der Belastung von Gleitdruckventuriwäschern in SHB-Ventingsystemen von DWR-Konvoi bei Unfällen, GRS – Bericht in Vorbereitung, Juni 2015.
- /SHE 12/ Sehgal, B. R. (Herausgeber): Nuclear Safety in Light Water Reactors, ISBN: 9780123884466, Academic Press, Boston, 2012.
- /SNE 17/ Sustainable Nuclear Energy Technology Platform (SNETP) [HTML], Stand von 2017, erreichbar unter <http://www.snetp.eu/>, Abruf am 25.04.2017.
- /SPE 14a/ Spengler, C.: Evaluation of a Chemical Transformation Model Proposal for Sodium Aerosols with Regard to a Technical Implementation into the ASTEC Code, GRS-V-RS1532-1/2014, December 2014.
- /SPE 14b/ Spengler, C., Arndt., S., Beck, S., Eckel, J., Eschricht, D., Klein-Heßling, W., Nowack, H., Reinke, N., Sonnenkalb, M., Weber, G.: Weiterentwicklung der Rechenprogramme COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht, GRS-358, ISBN 978-3-944161-39-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2014.
- /SPE 15a/ Spengler, C.: Implementation of a Particle Generation Model for a Sodium Pool Fire into ASTEC-Na, Rev. 2, GRS – V – RS1532 – 1/2015 prepared for the JASMIN project, GRS Cologne, Germany, 2015.
- /SPE 15b/ Spengler, C.: Implementation of a Chemical Transformation Model for Sodium Aerosols into ASTEC-Na, GRS – V – RS1532 – 2/2015 prepared for the JASMIN project, GRS Cologne, Germany, 2015.
- /SPE 16/ Spengler, C., Reinke, N.: Adaptation and Assessment of In-Containment Source Term Oriented Models for Sodium Fast Reactors (SFR) within the ASTEC-Na Code, GRS Cologne, submitted to ICAPP 2016 (accepted).

- /STE 14/ <https://www.oecd-nea.org/jointproj/stem.html>.
- /SUC 16/ Suckow, D., Furrer, M., Yang, J., Jäckel, B., Lind, T.: INVESTIGATION OF IODINE RETENTION IN A FILTERED CONTAINMENT VENTING SYSTEM IN THE VEFITA TEST PROGRAM, International Iodine Workshop, OECD, NEA/CSNI/R(2016)5, 2016.
- /WEB 09/ Weber, G.: Funke, F.: Description of the Iodine Model AIM-3 in COCOSYS, GRS-A-3508, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH, Köln, 2009.
- /WEB 11/ Weber, G.: Ein neues Abwaschmodell für unlösliche Aerosole (AULA), TN-WEG-01/2011, August 2011.
- /WEB 13/ Weber, G.: Ein COCOSYS-Modell für Metallfaser-Ventingfilter und Nachrechnung der ACE-Versuche AA19 und AA20, GRS-A-3727, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, September 2013.
- /WEB 15/ Weber, G.: Wie die Passivierung des THAI-Stahls die Iod-Verteilung im Behälter verändert, Technische Notiz GRS, 10.7.2015.
- /YAM 11/ Yamano, H., Kubo, S., Shimakawa, Y., Fujita, K., Suzuki, T., Kurisaka, K.: Conceptual Design for a Large-Scale Japan Sodium-Cooled Fast Reactor (2) Safety Design and Evaluation in JSFR, Proceedings of ICAPP 2011, Nice, France, 2011.

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Modulare Struktur von COCOSYS und Anbindung weiterer Codes .....	6
Abb. 2.1	Vergleich der Kerma-Werte (KERMA = Kinetic Energy Released per Unit Mass) von Sekundärpartikeln in Luft (Gy/h) für die Annahme einer volumetrisch gleich verteilten Strahlungsquelle (links) oder einer Punktquelle (rechts) innerhalb eines kubischen Raums /CHA 16/.....	12
Abb. 2.2	Detaillierungsgrad des Modells in den drei untersuchten Geometriemodellen /CHA 16/ .....	13
Abb. 2.3	Rechenergebnisse mit MONACO für die kinetische Energie von Sekundärpartikeln (Kerma) in Luft (Gy/h).....	14
Abb. 2.4:	Silberoberfläche in Mehrkomponentenaerosol .....	18
Abb. 2.5	Vergleich der berechneten und gemessenen Silbermenge im Sumpfwasser, THAI AW-3 .....	22
Abb. 2.6	Vergleich der berechneten und gemessenen Iodkonzentrationen, THAI AW-3 .....	23
Abb. 2.7	Bisheriges I <sub>2</sub> /Farbe-Modell für trockene Wände (schematisch) .....	25
Abb. 2.8	Neues I <sub>2</sub> /Farbe-Modell für trockene Wände (schematisch) .....	28
Abb. 2.9	Gemessene I <sub>2</sub> -Ablagerungsraten auf Ripolin-Farbe als Funktion der absoluten Atmosphärenfeuchte und Näherung durch die experimentelle FSATP-Funktion für Chemisorption in AIM .....	30
Abb. 2.10	Bestimmung der maximalen Beladung mit chemisorbiertem Iod ( <i>I<sub>chs, max</sub></i> ) und des Splittingfaktors XPHS .....	31
Abb. 2.11	Gemessene und mit COCOSYS berechnete Iodmasse abgelagert auf dem Farbcoupon (RIPOLIN, gealtert), BIP-Versuch G-4.....	32
Abb. 2.12	Mit COCOSYS berechnete abgelagerte Iodmasse aufgeteilt in gesamte Iodmasse (total iodine mass), physisorbierte (DEPGP) und chemisorbierte Iodmenge (ICHS), BIP-Versuch G-4 .....	33
Abb. 2.13	Gemessene und mit COCOSYS berechnete Iodmasse abgelagert auf dem Farbcoupon (RIPOLIN, gealtert), BIP-Versuch G6 .....	34
Abb. 2.14	Ausschnitt aus Abb. 2.13 .....	34
Abb. 2.15	Versuchsaufbau im Versuch THAI Iod-23 /LAN 12/ .....	37



Abb. 2.16	COCOSYS-Nodalisierung des THAI-Sumpfbereichs in der Konfiguration für Iod-23 .....	38
Abb. 2.17	Vergleich der I <sub>2</sub> -Konzentration in der Gasphase, THAI Iod-23 .....	39
Abb. 2.18	Vergleich der Geschwindigkeiten an der Sumpfoberfläche, THAI Iod-23 .....	40
Abb. 2.19	Vergleich der berechneten und vorgegebenen Massentransferkoeffizienten, THAI Iod-23 .....	41
Abb. 2.20	Vergleich der I <sub>2</sub> -Masse im Filter, THAI Iod-23 .....	41
Abb. 2.21	Vergleich der Iodkonzentration im Sumpf, THAI Iod-23.....	42
Abb. 2.22	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile (links: CFX, rechts CoPool).....	43
Abb. 2.23	Vergleich der Geschwindigkeitsprofile (links: CFX, rechts CoPool).....	43
Abb. 2.24	Ruthenium Verbindungen .....	46
Abb. 2.25	Mögliche Ruthenium Reaktionen im Sicherheitsbehälter während eines schweren Störfalls .....	50
Abb. 2.26	Ruthenium-Testrechnung ohne Dosisleistung.....	51
Abb. 2.27	Ruthenium-Testrechnung mit Dosisleistung.....	51
Abb. 2.28	Gemessene und berechnet Aerosolkonzentration, THAI Iod-26.....	55
Abb. 2.29	Gemessene und berechnete I <sub>2</sub> - und AgI-Konzentrationen, THAI Iod-26 .....	56
Abb. 2.30	Versuchsaufbau des AW-3 Lab Tests /LAU 14/ .....	58
Abb. 2.31	AW-3 Lab-Test 3, gemessene und mit COCOSYS/AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate.....	62
Abb. 2.32	AW-3 Lab-Test 3, gemessene und mit COCOSYS/AULA (cV3.0dev) berechnete akkumulierte Silbermasse in der Wasservorlage .....	62
Abb. 2.33	AW-3 Lab-Test 4, gemessene und mit COCOSYS AULA (cV3.0dev) berechnete Erosionsrate.....	63
Abb. 2.34	Betrachtete Prozesse und Schnittstellen im AFP-Hauptmodul (blau: Ablagerung/Resuspension; grün: Änderung des Wasserstandes; schwarz: Zu-/Abströmung; orange: Interaktion Wasser-Gasphase) .....	65
Abb. 2.35	Struktur des Speziesbaums im neuen AFP-Modul in COCOSYS.....	68
Abb. 2.36	Konzeption des Sprühmodells im AFP-Modul .....	72

Abb. 2.37	Nodalisierung des Testbeispiels zum Aerosol auswaschen .....	73
Abb. 2.38	Vergleich der Csl-Konzentrationen .....	74
Abb. 2.39	Vergleich der Auswaschraten .....	74
Abb. 3.1	Topologie des generischen Datensatzes für die Implementierung der Druckgleichung mit Anfangs- und Endzustand.....	79
Abb. 3.2	Zeitlicher Verlauf des Wasserstandes; in Rot: Stand RS 1508 (V3.0 rev. 5884), in Schwarz: aktueller Entwicklungsstand.....	80
Abb. 3.3	Topologie des generischen Datensatzes für das Wiedererzeugen der Gasphase in R2 mit Anfangs-, Zwischen- und Endzustand.....	81
Abb. 3.4	Zeitlicher Verlauf der Wasserpegel im aktuellen Entwicklungsstand .....	81
Abb. 3.5	Beschreibung des Szenarios der CoPool-Simulation .....	84
Abb. 3.6	Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere atmosphärische Temperatur über dem Wasserpool .....	85
Abb. 3.7	Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere Temperatur des Wasserpools.....	85
Abb. 3.8	Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die mittlere Oberflächentemperatur des Wasserpools .....	86
Abb. 3.9	Vergleich der Rechenergebnisse von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung für die Volumenkondensationsrate .....	86
Abb. 3.10	CoPool - diagonaler Schnitt, Temperaturverteilung im Pool bei 300 s, CoPool Test 07 .....	87
Abb. 3.11	Vergleich der mittleren Pooltemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung; Pumpeinlasstemperatur (rote Kurve), CoPool Test 07 .....	88
Abb. 3.12	Vergleich der mittleren Sumpfoberflächentemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung, CoPool Test 07 .....	88
Abb. 3.13	Vergleich der Atmosphärentemperatur von COCOSYS mit gekoppelter COCOSYS/CoPool-Rechnung, CoPool Test 07 .....	89
Abb. 3.14	Skizzen der zum Testen verwendeten Nodalierungen; links: einfache atmosphärische oder kombinierte Gas/Wasser-Verbindungen, rechts: eingetauchte Gas/Wasser-Verbindung.....	91

Abb. 3.15	Vergleich der Rechnung mit einfachen atmosphärischen (schwarze Symbole) und kombinierten Gas/Wasser-Verbindungen (rot) anhand des Drucks.....	91
Abb. 4.1	Beispielrechnung zur CCI-Sequenz mit ATHLET-CD: Gegenüberstellung der von ATHLET-CD ausgetragenen Schmelzmasse und den im CCI-Modul berechneten Massen .....	97
Abb. 4.2	Anfangs- und Randbedingungen für das DWR-Szenario (2D) im OECD-SERENA2-Projekt /PIL 14/ .....	105
Abb. 4.3	Schematische Darstellung der beteiligten Phänomene bei der Bildung eines Schüttbettes aus Schmelzpartikeln (aus /KIM 16/)	107
Abb. 4.4	Konfiguration des Schüttbettes beim Versuch L-28, aus /MAG 06/	108
Abb. 4.5	COCOMO-Rechengitter (2D) mit 40 × 56 Maschen .....	111
Abb. 4.6	Berechnete Sättigung in den Maschen entlang der zentralen Achse.....	112
Abb. 4.7	Berechnete Temperaturen in den Maschen entlang der zentralen Achse .....	113
Abb. 4.8	Rechenergebnis der 2D-Rechnung für Schmelzpartikeltemperaturen (links) und Sättigung (rechts) bei t = 2500 s.....	114
Abb. 4.9	Konturdarstellung der Sättigung in der 3D-Rechnung für das Rechengbiet von Schüttbett und Wasserpool (< 2,5 m Höhe) zum Zeitpunkt t = 2 500 s .....	115
Abb. 4.10	Rechenergebnis der 3D-Rechnung für Schmelzpartikeltemperaturen (links) und Sättigung (rechts) bei t = 2 500 s.....	116
Abb. 4.11	Berechnete Temperaturen in den Maschen entlang der zentralen Achse bei Gitterverfeinerung um Faktor 4 in beide Achsenrichtungen ...	118
Abb. 4.12	Geometrische Konfiguration des Schüttbettes .....	119
Abb. 4.13	Einfluss der Parametervariationen auf die Dryout-Wärmeleistung .....	120
Abb. 4.14	Dryout-Leistungsdichte in Abhängigkeit der totalen Schüttbetthöhe (zylindrischer Bereich + Kegel) bei separater Variation der gelisteten Parameter. $\xi$ benennt die anteilige Höhe des Kegels an der totalen Schüttbetthöhe. ....	121
Abb. 4.15	Konzept des Kernfängers im Design des WWER-1200/428 (AES-91) /CEA 06/.....	123
Abb. 4.16	Kernfängerkonzept beim EPR /BIT 05/ .....	124

Abb. 4.17	Kernfängerkonzept des ABWR von Toshiba /HAM 11/ .....	125
Abb. 4.18	Konzept der zwei Kavernen in ASTEC für die Anwendung auf den EPR (aus /CRA 11/)	127
Abb. 4.19	Schematische Darstellung eines Kernfängers in MELCOR /HUM 17/....	129
Abb. 4.20	Geometrisches Modell für die Analyse des Kernfängers mit SOKRAT/HEFEST /AST 10/ .....	130
Abb. 4.21	Beispiel für eine Sequenz von MCCI-Pools in den Räumen eines Containments. Das Symbol ☀ kennzeichnet einen Pfad der Durchdringung zu Nachbarräumen / zur Umgebung. ....	136
Abb. 4.22	Empirisch ermittelte Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen der Schmelze in Nachrechnung der MOCKA-Versuche bei KIT /BAK 17/ .....	141
Abb. 4.23	Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Erosionstiefen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf) ...	143
Abb. 4.24	Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Leistungsfreisetzungen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf) .....	143
Abb. 4.25	Beispielrechnung zur CCI-Sequenz entsprechend Abb. 4.21: Berechnete Schmelzetemperaturen in den drei Pools (Pool2 geht nach Durchschmelzen von axialen 40 cm bei ca. 20 000 s in den Leerlauf) .....	144
Abb. 6.1	Vergleich der berechneten und gemessenen Brandrate und Einfluss der Natriumpooltemperatur auf die Brandrate, ABCOVE AB-1.....	153
Abb. 6.2	Vergleich der berechneten und gemessenen Gastemperatur im Versuchsbehälter und Einfluss der Natriumpooltemperatur (bzw. Brandrate) auf die Gastemperatur im Versuchsbehälter, ABCOVE AB-1 .....	153
Abb. 6.3	Diffusionsansatz für die chemische Alterung mit schalenförmiger Ausbildung der Reaktionsprodukte, entsprechend des Modellvorschlags von IRSN /MAT 14/, /SPE 14a/.....	155
Abb. 6.4	Vergleich der berechneten und gemessenen Aerosol-Konzentrationen, ABCOVE AB-1 .....	157
Abb. 6.5	Zeitabhängige Aerosolzusammensetzung in ABCOVE AB-1 .....	157

Abb. 6.6	Verbrauch von CO <sub>2</sub> und Wasserdampf während der Bildung des Natriumhydrogenkarbonats bzw. des -peroxids .....	158
Abb. 6.7	Berechnete Aerosolzusammensetzung als Funktion der Zeit.....	158
Abb. 6.8	RDB-Modell für ICARE .....	164
Abb. 6.9	Coriummassen in RPV und der Reaktorgrube .....	165
Abb. 6.10	MCCI-Berechnung mit MEDICIS.....	165
Abb. 6.11	CIEMAT-Vergleich SPARC90 mit SPARC in COCOSYS.....	167
Abb. 6.12	GRS-Vergleich SPARC in COCOSYS und ASTEC CPA .....	168
Abb. 6.13	MOCKA5.7, Vergleich berechneter und experimenteller Daten zum zeitlichen Fortschritt der Erosionstiefe in axialer und radialer Richtung. ....	170
Abb. 6.14	Schema der wesentlichen Aktivitäten in der Senior Expert Group (SEG) zu Safety Research Opportunities Post-Fukushima (SAREF) .....	174

## Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Test Matrix /LAU 14/ .....	59
Tab. 2.2	Vergleich der Eigenschaften beider Aerosol-Sprühmodelle .....	71
Tab. 4.1	Versagenszeiten in Minuten nach gewähltem strukturmechanischem Modell oder Versagenskriterium .....	101
Tab. 4.2	Parameter für die Schüttbettkonfiguration .....	110
Tab. 4.3	Einfluss der Maschenweite auf die berechnete Dryout-Leistungsdichte.....	117
Tab. 4.4	Parametervariation für die Schüttbettkonfiguration. Referenzwerte sind fettgedruckt .....	119
Tab. 4.5	Mögliche Konfiguration eines CCI-Pools im Eingabedatensatz.....	141

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

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

Boltzmannstraße 14  
**85748 Garching b. München**  
Telefon +49 89 32004-0  
Telefax +49 89 32004-300

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

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

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