

**Weiterentwicklung des
Systemrechenprogramms
ATHLET-CD zur
Simulation von Unfällen
im Primärkreislauf**

Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET-CD zur Simulation von Unfällen im Primärkreislauf

Sebastian Weber
Henrique Austregesilo
Christine Bals
Joachim Herb
Thorsten Hollands
Antoine Langenfeld
Liviusz Lovasz
Peter Pandazis
Peter Sarkadi
Johann-Dietrich Schubert
Livia Tiborcz

Februar 2019

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrundeliegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS 1546 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:

AC2, ATHLET-CD, Auslegungsüberschreitendes Ereignis, Core Degradation, Fission Product Behaviour, Kernzerstörung, Lower Plenum, Severe Accident, Spaltproduktverhalten, Unteres Plenum

Kurzfassung

Im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) wird als Teil des Rechenprogrammsystems AC² das Rechenprogramm ATHLET-CD für die Analyse von Unfallabläufen in Kernkraftwerken mit Druck- und Siedewasserreaktoren und für die Bewertung von anlageninternen Notfallschutzmaßnahmen entwickelt. Das Ziel ist, ein weitgehend mechanistisches Analysewerkzeug zur möglichst realistischen Simulation von Unfällen in wassergekühlten Kernreaktoren bereitzustellen. Mit der Weiterentwicklung wird die Leistungsfähigkeit des Programms wesentlich erhöht, so dass realistische Analysen von auslegungsüberschreitenden Unfällen sowie die Simulation fortgeschrittener Kernzerstörung mit erweitertem Modellumfang in angemessener Rechenzeit durchgeführt werden können.

ATHLET-CD basiert auf den thermohydraulischen Modellen von ATHLET. Auf der Grundlage der ATHLET-Modelle ist es möglich, die Anfangs- und Randbedingungen für die Berechnung von Unfällen mit ATHLET-CD direkt aus vorangegangenen Transienten abzuleiten. Zur Simulation einer vollständigen Unfallsequenz kann ATHLET-CD mit dem Containment-Programm COCOSYS, welches ebenfalls Teil von AC² ist, gekoppelt werden.

ATHLET-CD enthält Module zur Simulation der Brennstab- und Steuerelementzerstörung in Druck- und Siedewasserreaktoren, zur Simulation der Spätphase mit Schmelze im unteren Plenum des Reaktordruckbehälters (RDB) sowie Module zur Freisetzung und des Transports von Spaltprodukten und Aerosolen im Kühlkreislauf, einschließlich des Nachzerfalls der Nuklidinventare und chemischer Reaktionen in der Gasphase. Im Rahmen des Vorhabens RS1546 wurden die folgenden Modelle weiterentwickelt bzw. neu implementiert:

- Modellierung der Kernzerstörung
- Spaltproduktverhalten
- Oxidation in Luftatmosphäre
- Verhalten von Siedewasserreaktor-Komponenten
- Prozesse im unteren Plenum

Die Verbesserungen bei der Modellierung der Kernzerstörung ermöglichen jetzt auch eine realistische Simulation von Unfällen unter asymmetrischen Bedingungen sowie

von Unfällen in Brennelementlagerbecken. Die Erweiterung der Modelle zum Schmelzeverhalten im unteren Plenum in der Spätphase, zur Ablation der RDB-Wand und die verbesserte Kopplung zu ATHLET bzw. COCOSYS ermöglichen ebenfalls deutlich realistischere Simulationen entsprechender Unfallabläufe, inklusive RDB-Außenkühlung. Die gesteigerte Qualität der Nachrechnungen von Unfallabläufen in Kernreaktoren und von Versuchen weist die erhöhte Leistungsfähigkeit von ATHLET-CD nach.

Im Vorhaben RS1546 wurde weiterhin eine Python-Schnittstelle zur Ankoppelung externer Modelle implementiert und generelle Verbesserungen der Kopplung im Programmpaket AC² erreicht. Mit der Python-Schnittstelle bestehen auch verbesserte Visualisierungsmöglichkeiten zur Darstellung der Vorgänge im Reaktordruckbehälter und des Transports von Spaltprodukten im Primärkreislauf.

Die Erstellung generischer Anlagendatensätze zu je einem Druckwasserreaktor, einem Siedewasserreaktor sowie einem Reaktor des russischen Typs WWER erlauben ein effizientes Testen von neuen bzw. verbesserten Modellen in ATHLET-CD für typische Anwendungsfälle. Dabei wurde darauf geachtet, dass die Modelle in ATHLET-CD möglichst schnell getestet werden können und die Datensätze nicht zu umfangreich sind.

Während des Berichtszeitraums wurde eine neue Version von ATHLET-CD freigegeben und eine weitere für die Freigabe vorbereitet. So wurde im Juli 2016 die Version ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A freigegeben. Wichtige Neuerungen waren hier die Bereitstellung des Spätphasenmodells LHEAD, die Berechnung des Austritts von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen, die darauffolgende Übergabe der Schmelze an COCOSYS, die Berücksichtigung von oxidierenden bzw. reduzierenden Bedingungen bei der Freisetzung der Elemente Barium, Molybdän und Ruthenium sowie allgemeine Verbesserungen bei der Rechenstabilität. Durch die Freigabe von Patches erfolgten Fehlerbeseitigungen bzw. weitere Verbesserungen bzgl. der Stabilität. Außerdem wurde die Version ATHLET-CD 3.2 eingefroren und für die Freigabe im Rahmen von AC² 2019 vorbereitet. Dadurch werden dem Anwender Verbesserungen wie die Simulation von B₄C-Oxidation für Absorberblätter in Siedewasserreaktoren, ein erweitertes Modell für die Luftoxidation, ein neues Modell für die radiale Verlagerung von Schmelze, ein verbessertes Modul zur Simulation des Transports von Spaltprodukten und Aerosolen im Kühlkreislauf sowie ein stark verbessertes Spätphasenmodul AIDA zur Verfügung stehen.

Abstract

ATHLET-CD, which is part of the code system AC², is developed to analyze nuclear accidents in pressurized and boiling water reactors. The development is financed by the German Federal Ministry for Economics and Energy (BMWi). The aim of the development is to create a tool to realistically simulate the phenomena occurring during an accident scenario in a water-cooled reactor. Through continuous development of the model basis of the code, ATHLET-CD can predict severe accident scenarios more realistically.

ATHLET-CD is based on the thermohydraulic models of ATHLET. This allows the determination of the starting- and boundary conditions of the analyzed accident scenario, not only at the beginning of the calculation but also during the transient. ATHLET-CD can be coupled to the containment program COCOSYS. Through this coupling it is possible to cover the whole spectrum of the accident scenarios.

ATHLET-CD consists of modules covering a wide range of phenomena that can occur during a severe accident: degradation of fuel- and control rods, melt relocation to the lower plenum and its behavior in the lower plenum, fission product release and transport in the cooling circuit, including fission product decay. Within the project RS1546 the following models were extended/newly implemented:

- Models for core degradation
- Models for fission product behavior
- Models for oxidation in air
- Models for BWR structure component degradation
- Models for processes in the lower plenum

The improvement in the models for core degradation enables an adequate simulation of accidents with azimuthally asymmetric boundary conditions, as well as accidents in spent fuel pools. The developments for the lower plenum include an improved wall ablation model, an improved coupling of the lower plenum models to ATHLET and COCOSYS, and improvements regarding outside cooling of the reactor vessel. This improved the quality of the code, which is reflected also in the results of the simulation of many experiments.

Within the project RS1546 a python coupling interface was created for easier coupling of external models. The new python interface also allows a better visualization of the core degradation processes and fission product transport phenomena. Many improvements were made regarding internal coupling between the parts of the AC² package also.

Generic input decks were developed for PWR, BWR and WWER reactors in order to verify the newly developed models under realistic accidental conditions.

During the timeframe of the project a new ATHLET-CD version was released (ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A, July 2016), the works for another new release were started (ATHLET-CD 3.2). The most important changes in ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A were:

- New lower plenum model LHEAD implemented
- Transport of melt from the reactor vessel to the cavity in COCOSYS after wall failure
- Considering the oxidizing/reducing atmosphere during fission product release.
- Code performance and stability improvements.

Several patches were released during the project which further improved the stability and performance of the code. ATHLET-CD 3.2 was prepared for release.

The most important changes in ATHLET-CD 3.2 are:

- Improved B₄C-oxidation for absorber blades in BWR
- Improved air oxidation models
- Horizontal relocation of melt within the core region
- Improved fission product transport models
- Strongly improved models of the lower plenum module AIDA

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	III
1	Einleitung	1
1.1	Aufgabenstellung	1
1.2	Planung und Ablauf der Arbeiten	2
2	Verbesserung und Erweiterung der Modelle für den Reaktorkern.....	3
2.1	Modellierung der Kernzerstörung.....	3
2.1.1	Grundlegende Überlegungen zu einer flexiblen Nodalisierung.....	3
2.1.2	Strahlungsmodelle	7
2.1.3	Realisierung der flexiblen Nodalisierung	20
2.1.4	Einbau des neuen Strahlungsmodells in ATHLET-CD	24
2.1.5	Verifizierung der flexiblen Nodalisierung in ATHLET-CD.....	25
2.1.6	Zusammenfassung	41
2.2	Spaltproduktverhalten	42
2.3	Weiterentwicklung des Modells der Luftoxidation.....	49
2.4	Erweiterung einzelner Modelle für Siedewasserreaktor-Komponenten	50
2.4.1	Modellierung der Borkarbid-Oxidation für Absorber-Elemente von Siedewasserreaktoren	51
2.4.2	Überprüfung des Quenchmodells für die Anwendung auf Strukturen von Siedewasserreaktoren	72
2.5	Erweiterung der Modellierung der Spätphase	110
2.5.1	Erweiterungen in AIDA.....	110
2.5.2	Erweiterungen in LHEAD	130
3	Anlagensimulation und Schnittstellen	133
3.1	Erstellung von generischen Anlagendatensätzen.....	133
3.1.1	Datensatz eines Druckwasserreaktors.....	133
3.1.2	Datensatz eines Siedewasserreaktors	142

3.1.3	Datensatz eines WWER-Reaktors	150
3.2	Schnittstelle zu Python.....	157
3.2.1	Erweiterungen des ATHLET Pythonwrappers pyAFFE	160
3.2.2	Anpassungen in ATHLET-CD	161
3.2.3	Beispielimplementierung für Verwendung von Hooks und Callbacks in ATHLET-CD	163
3.2.4	Zusammenfassung	163
3.3	Spezifische Visualisierungen	163
3.3.1	CView	164
3.3.2	SView	167
3.4	Kopplung mit COCOSYS und Code_Aster.....	169
4	Querschnittsaufgaben.....	173
4.1	Dokumentation und Qualitätssicherung	173
4.1.1	Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A.....	173
4.1.2	Freigabe von ATHLET-CD 3.2.....	174
4.2	Unterstützung bei der Programmanwendung.....	175
4.3	Programmpflege und Wissenstransfer	176
4.4	Versuchsbetreuung und nationale sowie internationale Zusammenarbeit.....	177
5	Zusammenfassung und Ausblick.....	181
	Literaturverzeichnis.....	183
	Abbildungsverzeichnis.....	193
	Tabellenverzeichnis.....	199

1 Einleitung

1.1 Aufgabenstellung

Best-Estimate Sicherheitsanalysen von Kernkraftwerken werden u. a. zur Bewertung von Anlagenkonzepten, zum Nachweis der Beherrschung von Stör- und Unfällen, zur Bewertung von Maßnahmen des anlageninternen Notfallschutzes sowie zur Bestimmung von radioaktiven Quelltermen durchgeführt. Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH entwickelt hierzu u. a. das gekoppelte Programmsystem AC², bestehend aus ATHLET (**A**nalyse der **T**hermohydraulik von **L**ecks und **T**ransienten), ATHLET-CD (**C**ore **D**egradation) und COCOSYS (**C**ontainment **C**ode **S**ystem). Dieses ist vom Simulationsumfang vergleichbar mit diesbezüglich führenden internationalen Entwicklungen (u. a. den Integralcodes für Unfallanalysen MAAP, MELCOR, ASTEC bzw. mechanistischen Systemcodes wie SOCRAT, ICARE/CATHARE oder RELAP5/SCDAP). Das Spektrum der Anwendung reicht dabei vom Auslegungsstörfall über Unfallabläufe mit Kernversagen und Freisetzung von Spaltprodukten bis hin zu Unfällen mit Versagen des Reaktordruckbehälters und der Analyse der Prozesse im Containment. Ein wesentliches Ziel der Modellierungen in ATHLET-CD ist die Beschreibung des zeitlichen Ablaufs der Kernzerstörung und des Zeitpunkts des Druckbehälterversagens, um daraus Rückschlüsse auf die Einleitung von anlageninternen Notfallschutzmaßnahmen erzielen zu können. Ein weiteres wichtiges Ziel ist die realistische Bestimmung des Quellterms im Sicherheitsbehälter als Randbedingung für das AC² Containment-Modul COCOSYS. Die Weiterentwicklung von ATHLET-CD liefert daher einen wesentlichen Beitrag zur Anwendbarkeit des GRS Programmsystems AC².

In den letzten Jahren wurden international intensiv die Phänomene bei Unfällen mit schweren Kernschäden erforscht. Diese Aktivitäten wurden nach den Unfällen in Fukushima Dai-ichi weiter intensiviert. Die Ergebnisse dieser Forschungsarbeiten unterstreichen die Notwendigkeit für kontinuierliche Erweiterungen und Verbesserungen der GRS-Codes sowie der hierin enthaltenen Modelle und Korrelationen. Die Aufgabenstellung dieses Vorhabens ist, das Rechenprogramm ATHLET-CD zu erweitern, sodass umfassende Analysen für Unfälle in Kernkraftwerken entsprechend dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik durchgeführt werden können.

1.2 Planung und Ablauf der Arbeiten

Die Arbeiten zur Weiterentwicklung von ATHLET-CD wurden in drei Teile unterteilt:

1. Verbesserung und Erweiterung der Modelle für den Reaktorkern
2. Anlagensimulation und Schnittstellen
3. Querschnittsaufgaben

Ein zentraler Punkt bei der Simulation von Unfallabläufen sind die Vorgänge im Reaktorkern, die bis zur Verlagerung von geschmolzenem Material ins untere Plenum des Reaktordruckbehälters führen können. Diese Vorgänge haben maßgebliche Auswirkungen auf alle weiteren Vorgänge in der Anlage. Ziel des ersten Arbeitspunktes ist es daher, die Modellierung der Kernzerstörungsphänomene zu verbessern und zu erweitern. Schwerpunkte sind hierbei die eigentliche Modellierung der Kernzerstörung, das Spaltproduktverhalten, Oxidationsphänomene sowie die Vorgänge in der Spätphase eines Unfallablaufs mit Kernzerstörung.

Ein wichtiger Punkt bei der Weiterentwicklung von ATHLET-CD ist die Simulation ganzer Anlagen, besonders auch in Kombination mit anderen Modulen des Programmpakets AC². Im Arbeitspunkt „Anlagensimulation und Schnittstellen“ liegt der Augenmerk daher auf der Erstellung von generischen Datensätzen zum möglichst unkomplizierten Testen neuer Programmversionen, auf der prinzipiellen Ermöglichung von Schnittstellen nach außen über Python, auf der Erstellung bzw. Erweiterung von Postprocessing-Tools zur Visualisierung spezifischer Phänomene und auf der Kopplung von ATHLET-CD mit anderen Programmteilen von AC².

Der dritte Arbeitspunkt beschäftigt sich schließlich mit Querschnittsaufgaben, die weitere Tätigkeiten umfassen, die für die Programmentwicklung essentiell sind. Wichtige Punkte sind hierbei die Dokumentation und Qualitätssicherung, die Freigabe neuer Programmversionen, die Unterstützung bei der Programmanwendung, die allgemeine Programmpflege sowie die nationale und internationale Zusammenarbeit.

Alle hier aufgeführten Arbeiten sollen zu einer Verbesserung von ATHLET-CD und damit des Programmsystems AC² insgesamt führen, sodass zuverlässige Simulationen von Unfällen durchgeführt werden können. Die Erweiterung der bereits vorhandenen Modelle sowie die Implementierung neuer Ansätze sind hierbei von zentraler Bedeutung.

2 Verbesserung und Erweiterung der Modelle für den Reaktorkern

2.1 Modellierung der Kernzerstörung

Ein wesentliches Ziel bei der Erweiterung der Modelle für den Reaktorkern war es, die Möglichkeiten der Nodalisierung zu erweitern und flexibler zu gestalten. Dadurch sollte auch eine realistischere Simulation von Lagerbeckenunfällen ermöglicht werden. In diesem Abschnitt werden die Erweiterungen in der Modellierung sowie entsprechende Testrechnungen vorgestellt.

2.1.1 Grundlegende Überlegungen zu einer flexiblen Nodalisierung

In ATHLET-CD wird der Kernbereich bisher radial in Ringe und axial in verschiedene Höhen aufgeteilt (Abb. 2.1), ähnlich wie in den meisten anderen Codes /CHA 14/, /HUM 14/, die sich mit der Simulation von Unfällen beschäftigen. Es wird dabei angenommen, dass sich innerhalb einer Node die einzelnen Strukturen (z. B. Brennstab, Steuerstab, BWR-Komponenten) identisch verhalten. Das bedeutet, dass alle Brennstäbe bzw. alle Strukturen in einer Node dieselbe Temperatur, Wärmekapazität, Dichte usw. haben. Diese Annahme ist in der Regel gerechtfertigt, weil in den meisten Fällen die Brennstäbe in azimuthaler Richtung (also innerhalb eines Rings) symmetrischen Bedingungen ausgesetzt sind. Unterschiede in radialer und axialer Richtung können durch Definition von mehr Ringen bzw. mehr axialen Nodes berücksichtigt werden. Eine Berechnung der Phänomene für jeden einzelnen Brennstab wäre hingegen extrem rechenaufwendig und dadurch nicht praktikabel.

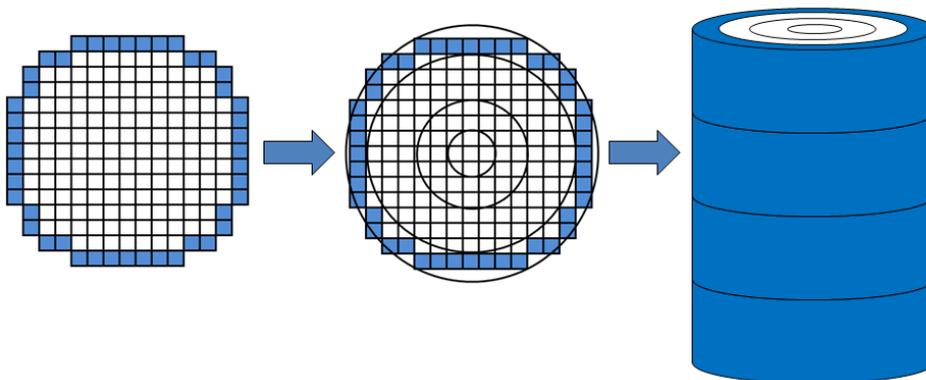


Abb. 2.1 Bisherige Nodalisierung im Kern

Bei bestimmten Unfallabläufen können aber Situationen auftreten, die radialsymmetrische Bedingungen verletzen. Beispiele wären

- ein dezentraler Steuerstabauswurf,
- eine asymmetrische Kernflutung von oben,
- eine ungleichmäßige Leistungsverteilung (z. B. durch fehlerhafte Beladung oder unterschiedlichen Abbrand),
- kleine Abweichungen vom symmetrischen Zustand, die dann in der Folge zu größeren asymmetrischen Bedingungen führen können.

Diese azimuthalen Unterschiede bzw. lokalen Effekte können mit der radialsymmetrischen Nodalisierung nicht adäquat abgebildet werden. Abb. 2.2 veranschaulicht das Problem: Hier ist ein lokaler Effekt vorhanden, der Kern ist in Ringe aufgeteilt. Da aber alle Strukturen in einem Ring und auf einer bestimmten Höhe jeweils die gleichen Parameter haben, kann der lokale Effekt nicht direkt abgebildet werden. Der Effekt wird im Ring verschmiert und unter allen Brennstäben im Ring verteilt.

Dadurch verliert man aber viel Information und der Unfallablauf kann von der radialsymmetrischen Nodalisierung massiv beeinflusst sein. Bei lokalen Ereignissen kann es im realen Fall beispielsweise zu einer lokalen Temperaturerhöhung kommen, die dann lokal zu erhöhter Oxidation, zum Schmelzen und sogar zu einer Blockadebildung führen kann. Die lokale Blockade verschlechtert dann die Kühlung der Brennstäbe oberhalb der Blockade, aber verbessert die der umliegenden Brennstäbe. Bei gleichmäßiger Verteilung des lokalen Effekts in einer Simulation mit radialsymmetrischer Nodalisierung kann es dagegen vorkommen, dass die Temperatur für die erhöhte Oxidation nicht erreicht wird und der Ablauf völlig anders ist.

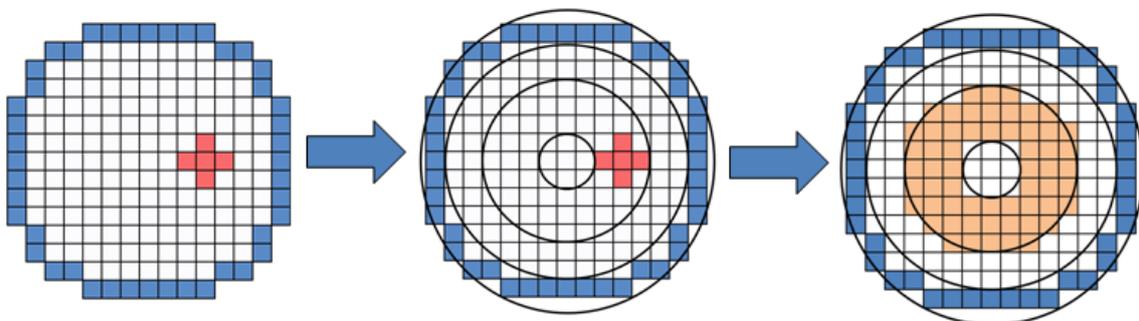


Abb. 2.2 Berücksichtigung eines lokalen Effekts

Besonders stark von der Vereinfachung durch die radialsymmetrische Nodalisierung sind allerdings Lagerbeckenrechnungen betroffen. Abb. 2.3 stellt ein generisches La-

gerbecken von oben dar. Die Geometrie eines typischen Lagerbeckens ist rechteckig, daher ist die Leistungsverteilung in der Regel auch nicht radialsymmetrisch. Außerdem sind nicht alle Plätze mit Brennelementen belegt, es gibt auch freie Bereiche. Abb. 2.3 zeigt auch, dass die Ring-Nodalisierung im Lagerbecken auch Teile beinhalten kann, die außerhalb des Lagerbeckens liegen. Das Zusammenfassen von leeren Bereichen mit Bereichen, die Brennelemente stark unterschiedlicher Leistung enthalten, und Bereiche außerhalb des Lagerbeckens in einer ringförmigen Node gibt die Realität nicht korrekt wieder. In einem solchen Fall ist die Möglichkeit zur Berücksichtigung lokaler Effekte daher noch wichtiger als bei Reaktor Anwendungen.

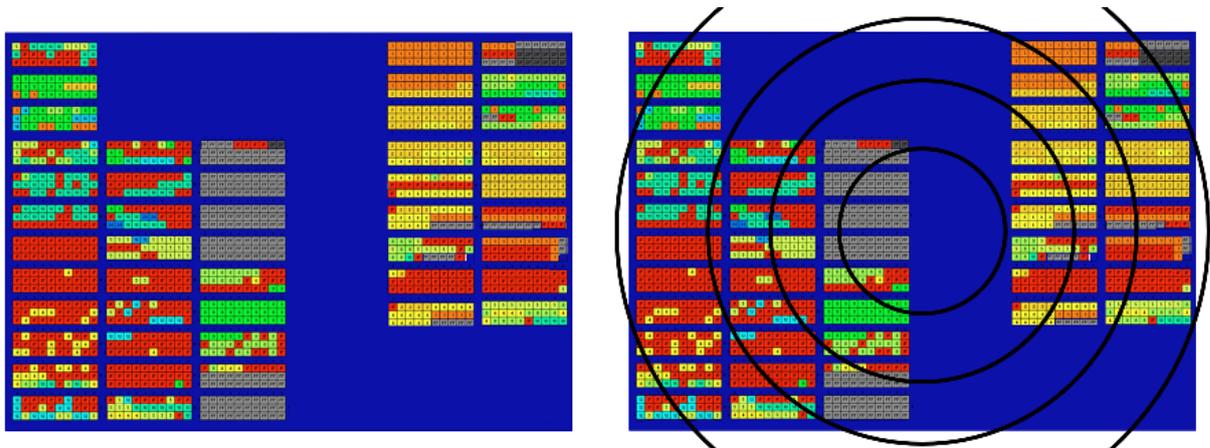


Abb. 2.3 Lagerbecken-Nodalisierung mit Ringen (blau: nur mit Wasser gefüllte Bereiche, andere Farben: Brennelemente mit unterschiedlichen Leistungen), Informationen zum Lagerbecken aus /NEA 15/

Die Ring-Nodalisierung muss also geändert werden, um lokale Effekte innerhalb des Reaktordruckbehälters sowie Vorgänge im Lagerbecken korrekt abbilden zu können. Abb. 2.4 und Abb. 2.5 stellen Beispiele für nicht-radialsymmetrische Nodalisierungen dar. Durch eine azimuthale bzw. flexible Aufteilung der einzelnen Ringe kann man den Kern dreidimensional aufteilen, was die Definition eines Nodes um den lokalen Effekt ermöglicht. Der lokale Effekt wird dann nur in diesem kleineren, lokal definierten Bereich der Node verschmiert und nicht in einem ganzen Ring.

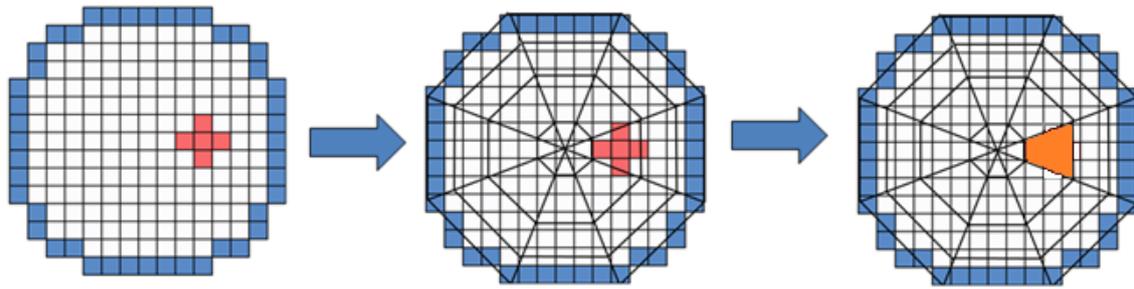


Abb. 2.4 Berücksichtigung eines lokalen Effekts mit der flexiblen Nodalisierung im Reaktordruckbehälter

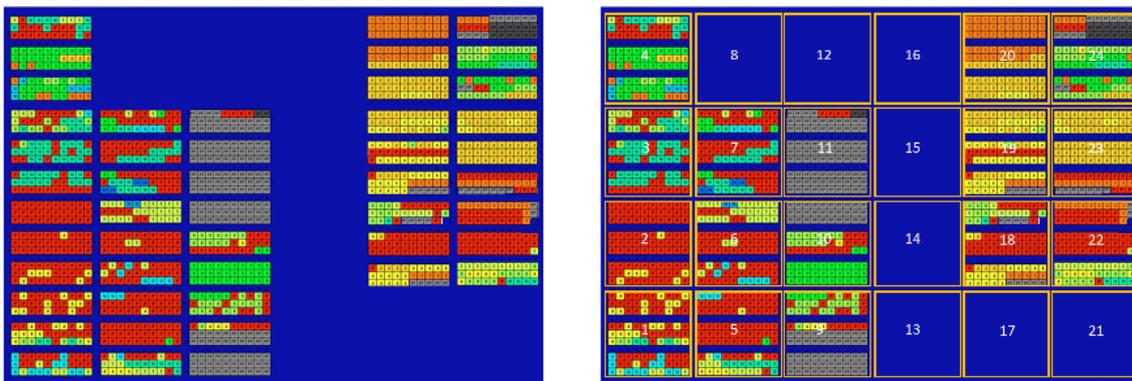


Abb. 2.5 Lagerbecken-Nodalisation bei flexibler Nodalisierung (Informationen zum Lagerbecken aus /NEA 15/)

ATHLET-CD war von Anfang an so konzipiert, dass der Kern in Ringe aufgeteilt ist. Die Änderung der Nodalisierung erforderte daher einen tiefen Eingriff in die Struktur des Codes und der Modelle. Am Anfang der Entwicklungsarbeiten mussten dazu zunächst die potenziellen Codeänderungsstellen identifiziert werden. Dabei wurden folgende Erkenntnisse gewonnen:

- Die meisten physikalischen Modelle (wie Leistungsberechnungen, axiale bzw. horizontale Wärmeleitung, Wärmeübergabe, Ballooning, Oxidation, axiale Schmelzeverlagerung, Freisetzung von Spaltprodukten) werden trotz der Zusammenfassung vieler Brennstäbe/Steuerstäbe in einem Ring jeweils für einen einzelnen Brennstab berechnet. Die berechneten Werte werden für extensive Größen anschließend mit der Anzahl der Brennstäbe innerhalb eines Ringes multipliziert. Das heißt, dass die Änderung der Node-Geometrie keinen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Nur die Anzahl der im Node befindlichen Brennstäbe

ändert sich. Eine programmtechnische Änderung ist daher an dieser Stelle nicht notwendig.

- Die in ATHLET-CD definierten Kernobjekte befinden sich immer in einem ATHLET-Objekt, welches die Berechnung der thermohydraulischen Phänomene ermöglicht. Solche Objekte sind frei definierbar und müssen auch in der bisherigen Version von ATHLET-CD nicht als Ringe definiert werden. Sie sind daher von der Änderung der Nodalisierung im Kernbereich programmtechnisch nicht betroffen.
- Betroffen sind aber die Modelle, die die Kommunikation zwischen Kern-Nodes ermöglichen. Diese Modelle sind:
 - Die horizontale Schmelzeausbreitung: im aktuellen Modell kann die Schmelze zwischen Ringen nur nach innen oder nach außen fließen. Eine Änderung der Nodalisierung erfordert aber auch eine azimutale Verlagerung. Eine Programmänderung ist daher nötig.
 - Die Wärmestrahlung zwischen Nodes: ähnlich wie bei der Schmelzeausbreitung, wird die Wärmestrahlung nur nach innen und nach außen berechnet, azimutal hingegen nicht. Eine Modelländerung ist notwendig.

Das bedeutet, dass zusätzlich zu kleineren Änderungen im Programm und Programmablauf ein komplett neues Strahlung- und ein ganz neues horizontales Schmelzeverlagerungsmodell entwickelt werden müssen, um eine flexible Nodalisierung zu ermöglichen. Da die horizontale Schmelzeverlagerung gegenüber der Wärmestrahlung, die immer einen Effekt hat, nur unter bestimmten Bedingungen vorkommt, wurde in diesem Vorhaben der Fokus auf die Entwicklung eines neuen Strahlungsmodells gesetzt.

2.1.2 Strahlungsmodelle

2.1.2.1 Stand des Strahlungsmodells für Ring-Nodalisierung

Das bisher in ATHLET-CD implementierte Strahlungsmodell gilt nur für Ring-Geometrien /ATH 16/. Wärmestrahlung wird separat axial und radial berechnet. Wärmestrahlung in diagonaler Richtung wird somit nur indirekt (zuerst radial zu einer fiktiven Masse, dann axial) und nur bei einem zerstörten Zustand berücksichtigt. Die berechneten Wärmeströme werden als Quellterm in der Energiegleichung berücksichtigt.

Axial wird die folgende Gleichung gelöst:

$$\dot{Q}_{Ax_{j,j+1}} = - \frac{2 \pi \Delta z_j \Delta r r_{stab} \sigma \varepsilon_{12}}{\Delta z_j + \Delta z_{j+1}} (T_j^4 - T_{j+1}^4) \quad (2.1)$$

Wobei:

- $\dot{Q}_{Ax_{j,j+1}}$: Wärmestrom von Node J zu Node J+1 [W]
- J: Axialer Index der Nodes [-]
- Δz : Höhe des Nodes [m]
- Δr : Abstand der mittleren Radien der Ringe [m]
- r_{stab} : Stabradius [m]
- ε_{12} : Emissivitäten von Objekt 1 und 2 [-]
- σ : Stefan-Boltzmann-Konstante [W/m²K⁴]
- T_j : Temperatur der Node [K]

Wärmestrahlung in radialer Richtung wird mit Hilfe einer fiktiven Wärmeleitfähigkeit berechnet. Bei dieser Annahme wird die Strahlung als Wärmeleitvorgang interpretiert und mit der folgenden Gleichung berechnet:

$$\dot{Q}_{Rad}^{i,i+1} = \frac{2 \pi R_i \Delta z_j \lambda_s}{N_i \Delta R_i} (T_i - T_{i+1}) \quad (2.2)$$

$$\lambda_s = 4 \pi r_{stab} \sigma \varepsilon_{12} F_{A_1 \rightarrow A_2} \frac{p}{2 r_{stab}} (T_i^3 + T_i^2 + T_{i+1} + T_i * T_{i+1}^2 + T_{i+1}^3) \quad (2.3)$$

Wobei:

- $\dot{Q}_{Rad}^{i,i+1}$: Wärmestrahlung von Ring I in Ring I+1 [W]
- I: Horizontaler Index der Nodes [-]
- R_i : Außenradius des Ringes I [m]
- λ_s : Fiktive Wärmeleitfähigkeit [W/mK]

- T_i : Temperatur der Node [K]
- N_i : Anzahl der Brennstäbe im Ring I [-]
- ΔR_i : Abstand zwischen den Ringen [m]
- $F_{A1 \rightarrow A2}$: Sichtfaktor zwischen einem Brennstab und der benachbarten Stabreihe [-]
- p : Pitch [m]

Bei einem zerstörten Kern werden die oben genannten Methoden auch benutzt, allerdings mit den folgenden Ergänzungen, Annahmen und Modellschwächen:

- Wenn die Kernzerstörung sich von innen nach außen ausbreitet, hat die radiale Wärmestrahlung nach innen keinen radialen Effekt, da so ein Ring immer auf sich selbst strahlt.
- Wenn Strahlung durch einen Hohlraum berechnet werden muss, dann werden fiktive Flächen für den Strahlungstransport benutzt.
- Diagonale Strahlung gibt es nur indirekt: zuerst radiale Strahlung auf eine fiktive Oberfläche, von dieser Oberfläche aus wird dann axial Strahlung abgegeben.
- Für die Wärmestrahlung wird immer die Hüllrohrtemperatur benutzt.

Das bisherige Strahlungsmodell kann bei intakten Geometrien mit kleinen Änderungen auch für die (nachfolgend beschriebene) flexible Nodalisierung angewendet werden. Allerdings erforderten die Modellschwächen bezüglich Hohlraumstrahlung und das Fehlen der dreidimensionalen Informationen im Modell die Entwicklung eines verbesserten Strahlungsmodells. Anforderungen an das neue Strahlungsmodell waren dabei:

- Dreidimensionale Wärmestrahlung (axial, radial, azimuthal und diagonal)
- Identifizierung der freien Flächen und Berücksichtigung von Schatteneffekten
- Kurze Rechenzeit

2.1.2.2 Erweitertes Strahlungsmodell für flexible Nodalisierung

Bei intakten Geometrien im Kern werden die oben dargestellten Modelle benutzt. Kleine Änderungen wurden nur durchgeführt, um die Behandlung dreidimensionaler Daten zu ermöglichen. Die Modellierung wurde so erweitert, dass die Strahlung nicht nur zwischen den Nodes I und I+1 berechnet wird, sondern in alle Richtungen zwischen den Seiten jeweils benachbarter Nodes. Dafür musste intern eine Art Karte erstellt werden, die Information enthält, welche Node welche Seiten sieht. Die benötigten Entfernungen

und Temperaturen werden dabei von den jeweils passenden Nachbarseiten genommen. Die damit berechneten Wärmestrahlungstransporte werden für jede Node aufsummiert und dieser Wert fließt dann in die Energiegleichung ein. Für axiale Strahlung waren in intaktem Zustand hingegen keine Änderungen notwendig.

Ein völlig neues Strahlungsmodell war jedoch für die dreidimensionale Strahlung in einem zerstörten Kern notwendig. Es wurde dabei auch eine Option eingebaut, die ermöglicht das neue Strahlungsmodell auch für intakte Geometrien zu verwenden.

Die Grundannahmen, auf denen das gesamte neue Strahlungsmodell basiert, sind folgende:

- Strahlung findet zwischen den Seiten der Nodes statt.
- Die Seiten der Nodes werden als eine Wand betrachtet und nicht als eine Reihe von einzelnen Brennstäben, da eine kontinuierliche Wand wesentlich einfacher im Modell zu erfassen ist als viele einzelnen Brennstäbe mit entsprechend komplizierten Geometrien (Abb. 2.6).

Diese vereinfachende Annahme lässt sich damit begründen, dass zum einen unabhängig von der Form des Node alle Brennstäbe in einer Node die gleiche Temperatur haben. Zum anderen stehen die Brennstäbe von außen (d. h. von einer anderen Node aus) betrachtet sehr dicht nebeneinander, wenn sich in der Node mindestens drei Reihen von Brennstäben befinden. Die in der Node angekommene Strahlung wird dadurch komplett absorbiert.

- Das die Stäbe umgebende Fluid/Medium ist transparent, d. h. es wird keine Strahlung absorbiert. Eine ähnliche Annahme wird auch schon im alten Strahlungsmodell getroffen.
- Materialkonstanten sind Benutzereingabegrößen, ähnlich wie auch im alten Strahlungsmodell.

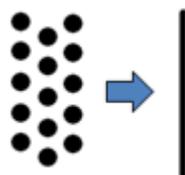


Abb. 2.6 Annäherung der Seitenflächen einer Node durch eine Wand

Seiten- und Nodegrößen wurden eingeführt. Die Seitengröße enthält dabei die Position und die Fläche, die für jede Seite (Wand) unterschiedlich sein können. Nodegrößen sind Materialeigenschaften und Temperatur, die für jede Seite identisch sind. Die ausgetauschte Leistung aufgrund der Wärmestrahlung wird mit der folgenden Gleichung pro Node berechnet:

$$\dot{Q}_{node} = \dot{Q}_{intakt} + \sum_{x=1}^{Abstrahl\ Seiten} \sum_{y=1}^{Ziel\ Seiten} VF_{x-y} * \sigma * \varepsilon_x * \varepsilon_y * A_x * (T_x^4 - T_y^4) \quad (2.4)$$

Wobei:

- \dot{Q}_{node} : Aufsummierte Leistung durch Strahlung aus allen Richtungen [W]
- \dot{Q}_{intakt} : Aufsummierte Leistung durch Strahlung aus „intakten“ Richtungen [W]
- x,y: Index für abstrahlende und Strahlung absorbierende Seiten [-]
- VF_{x-y} : Sichtfaktor zwischen den Seiten x und y [-]
- $\varepsilon_x, \varepsilon_y$: Emissivitäten der Seiten x und y [-]
- A_x : Fläche der Seite x [m²]
- T_x, T_y : Temperatur der Seite x bzw. y [K]
- σ : Stefan-Boltzmann-Konstante [W/m²K⁴]

Für die Berechnung der Strahlungsleistung wird immer die „dominierende“ Temperatur einer Node benutzt. Es wurde dazu folgende Reihenfolge festgelegt:

- Falls SWR-Strukturen vorhanden sind, dann wird Strahlung zwischen den Strukturen berücksichtigt; für die Berechnung werden die entsprechenden Temperaturen dieser Strukturen benutzt.
- Wenn diese Strukturen weggeschmolzen sind oder nicht vorhanden sind, dann wird für die Strahlungsberechnung die Hüllrohrtemperatur benutzt.
- Wenn das Hüllrohr weggeschmolzen ist, dann wird die Brennstofftemperatur benutzt.
- Wenn auch noch der Brennstoff weggeschmolzen ist, dann sind keine Strukturen in der Node mehr vorhanden und sie wird als Hohlraum betrachtet.

Die berechnete Strahlungsleistung wird zur Energiegleichung der passenden Strukturen hinzugefügt, also der Struktur, deren Temperatur für die Strahlungsrechnung benutzt wurde.

Die größte Herausforderung bei der Entwicklung des neuen Strahlungsmodells war allerdings die schnelle und genaue Berechnung der Sichtfaktoren (View Factor = VF). Der Sichtfaktor ist eine rein geometrische Größe. Der den beiden Flächen x und y zugeordnete Sichtfaktor VF_{x-y} gibt an, welcher Anteil der von Fläche x insgesamt ausgesandten Strahlung direkt auf Fläche y trifft. Die Summe der Sichtfaktoren von einer Seite an die gesamte Umwelt ist immer gleich eins. Laut Definition berechnet sich der Sichtfaktor folgendermaßen:

$$VF_{x-y} = \frac{1}{\pi * A_x} \int_{A_x} \int_{A_y} \frac{\cos\theta_1 * \cos\theta_2}{r^2} dA_x dA_y \quad (2.5)$$

Wobei:

- x,y: Index der Seiten [-]
- VF_{x-y} : Sichtfaktor zwischen den Seiten x und y [-]
- Θ : Winkel des Normalvektors der Seite [°]
- A: Fläche der Seite [m²]

Für einfache Geometrien ohne Schatteneffekte stehen analytische Formeln zur Verfügung, die auch für das alte Strahlungsmodell benutzt wurden. Bei einer detaillierteren Nodalisierung können wegen der Abschmelzprozesse sehr komplexe Geometrien entstehen, bei denen die Sichtfaktoren analytisch nicht bestimmt werden können. Abb. 2.7 zeigt ein Beispiel für so eine komplexe Geometrie.

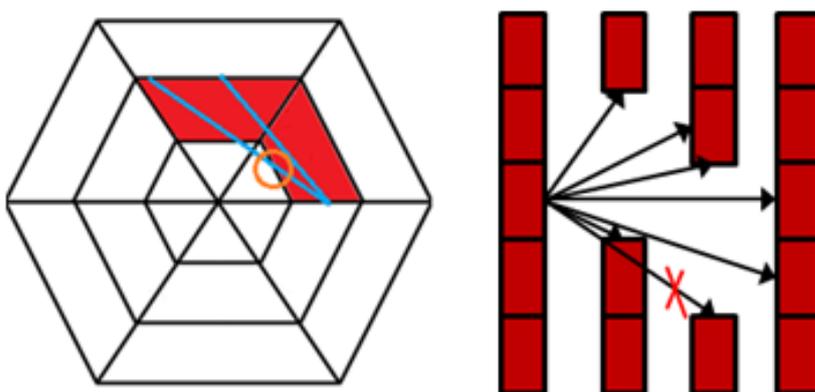


Abb. 2.7 Strahlungswege bei Strahlung durch einen Hohlraum (links: Sicht von oben, rechts: Sicht von der Seite)

Die Seiten stehen nicht nur in sehr verschiedenen Winkeln zueinander, die noch intakten Flächen können sogar noch einen Schatteneffekt erzeugen, wenn sie die Strahlungen von einer Seite auf eine andere blockieren. Um auch unter diesen Umständen die Sichtfaktoren berechnen zu können, müssen diese numerisch berechnet werden.

Die numerische Berechnung eines Sichtfaktors zwischen zwei Seiten basiert auf der numerischen Lösung von Gleichung (2.5). Man teilt die Seiten in kleine Subflächen auf und berechnet jeweils einen „Subsichtfaktor“ zwischen allen möglichen Subflächenpaaren. Diese Subsichtfaktoren werden anschließend aufsummiert, um den gesamten Sichtfaktor zwischen den Seiten zu bekommen. Um auch Schatteneffekte zu berücksichtigen, wird zwischen jedem Subflächenpaar geprüft, ob eine weitere Seite den Strahlengang blockiert. Falls dies der Fall sein sollte, setzt ein Blockadeparameter den Beitrag dieses Subsichtfaktors zum gesamten Sichtfaktor auf Null. Diese Vorgehensweise ist in Gleichung (2.6) und in Abb. 2.8 zusammengefasst.

$$VF_{X-Y} = \frac{1}{\pi * A_X} * \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\cos(\theta_X) * \cos(\theta_Y) * \text{block}}{S^2} * dA_j * dA_i \quad (2.6)$$

Wobei:

- VF_{X-Y} : Sichtfaktor zwischen den Seiten X und Y [m^2]
- A_X : Fläche von Seite X [m^2]
- θ_x, θ_y : Winkel der Normalvektor der jeweiligen Seite [$^\circ$]
- block : Blockadeindikator (1 = keine Blockade, 0 = Blockade) [m^2]
- s : Abstand der zwei Subflächen [m]

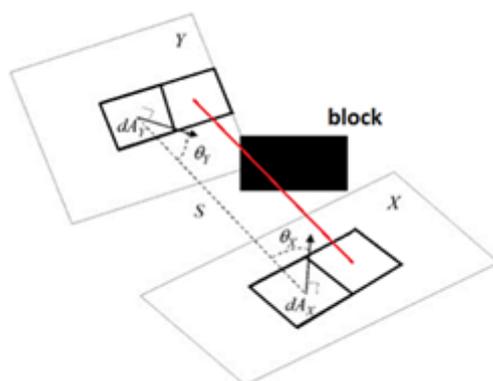


Abb. 2.8 Numerische Berechnung eines Sichtfaktors mithilfe von Subflächen

Der Blockadeindikator ist ein wichtiger und komplexer Teil des neuen Strahlungsmodells. Die Identifizierung von Seiten, die den Strahlengang blockieren, wird mit Hilfe eines Beispiels erklärt:

Abb. 2.9 zeigt einen partiell zerstörten Kern von oben bzw. von der Seite, die rot markierten Nodes sind bereits weggeschmolzen. Die Strahlung von Seite "1" auf Seite "5" ist dabei teilweise von Seite "2" blockiert.

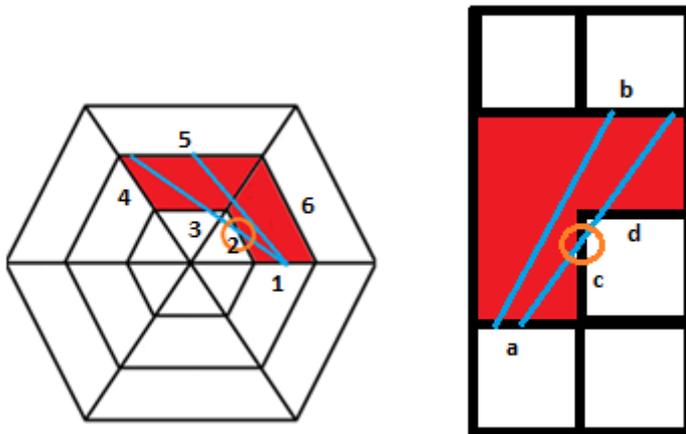


Abb. 2.9 Identifizierung von Blockierungen der Strahlung im zerstörten Kern

Im Programmablauf für die Berechnung des radiativen Wärmetransfers werden zuerst die freien Flächen des entstandenen Hohlraums identifiziert (Seiten 1, 2, 3, 4, 5 und 6 in Abb. 2.9). Danach beginnt die Berechnung der Sichtfaktoren zwischen jeweils zwei Seiten. Die Seiten werden in viele kleine Flächen aufgeteilt und die Abstände zwischen diesen berechnet (s in Abb. 2.8). Die Gleichung der Linie "s" wird aufgestellt und es wird dann geprüft, ob diese Linie irgendwo eine freie Fläche schneidet. Dafür müssen auch die Gleichungen der Flächen (Ebenen) aufgestellt werden, allerdings wird dann nur die Kollision der Linie "s" mit einer vertikalen Fläche überprüft. Der Grund dafür ist, dass, selbst wenn eine horizontale Fläche die Blockade erzeugt, zu ihr aber trotzdem eine entsprechende vertikale Fläche gehört, wie die rechte Seite von Abb. 2.9 illustriert. Die Strahlung von Seite "a" auf "b" wird von den Seiten "c" und "d" blockiert, es reicht jedoch, wenn hier eine Blockade berücksichtigt wird.

Die Gleichung für die Linie "s" lautet:

$$\begin{aligned}x &= x_1 + t * (x_2 - x_1) \\y &= y_1 + t * (y_2 - y_1) \\z &= z_1 + t * (z_2 - z_1)\end{aligned}\tag{2.7}$$

Wobei:

- x_1, y_1, z_1 : Koordinaten des Startpunktes
- x_2, y_2, z_2 : Koordinaten des Zielpunktes
- t : Parameter
- x, y, z : Koordinaten, bei denen die Strahlung die blockierende Seite schneidet

Gleichung für die Flächen der Seiten:

$$n_x * P_x + n_y * P_y + n_z * P_z + D = 0\tag{2.8}$$

Wobei:

- n_x, n_y, n_z : Normalvektoren in x, y, und z Richtung
- P_x, P_y, P_z : Koordinaten der blockierenden Seite
- D : Entfernung zum Ursprung

Den unbekanntem Parameter t für die Bestimmung des Schnittpunkts einer Linie und einer Fläche erhält man durch folgende Gleichung:

$$t = -\frac{n_x * x_1 + n_y * y_1 + n_z * z_1 + D}{n_x * (x_2 - x_1) + n_y * (y_2 - y_1) + n_z * (z_2 - z_1)}\tag{2.9}$$

Wenn man t in Gleichung (2.7) mit dem Ergebnis von Gleichung (2.9) ersetzt, dann bekommt man den Punkt, an dem die Linie "s" die blockierende Seite schneidet. Da die Gleichung für eine Fläche zweidimensional ist, kann es sein, dass der Schnittpunkt außerhalb der Ausmaße der Seite ist. Deswegen wird überprüft, ob der Schnittpunkt innerhalb der Fläche liegt. Der Schnittpunkt liegt innerhalb der untersuchten Fläche, wenn die Entfernung der Schnittkoordinaten von allen Eckenkoordinaten der blockierenden Fläche nicht größer als die Höhe und Breite der Seite ist.

Eigentlich müsste diese Überprüfung zwischen jedem Subflächenpaar aller freien Flächen durchgeführt werden. Dies wäre aber sehr rechenzeitaufwendig. Um Zeit zu sparen, werden für die Identifizierung von blockierenden Seiten nur die Eckpunkte und der Mittelpunkt der Start- und Zielseite benutzt. Auf diese Paare wird das beschriebene Vorgehen angewendet und alle freien Flächen werden überprüft. Die Seite, die sich als blockierend herausstellt, wird dann als blockierende Seite gespeichert. In Abb. 2.10 ist die Auswahllogik dargestellt. Durch Verbindung der Eck- und Mittelpunkte zwischen Seite 1. und 3. wird Seite 2 als Blockade identifiziert und Seite 4 nicht.

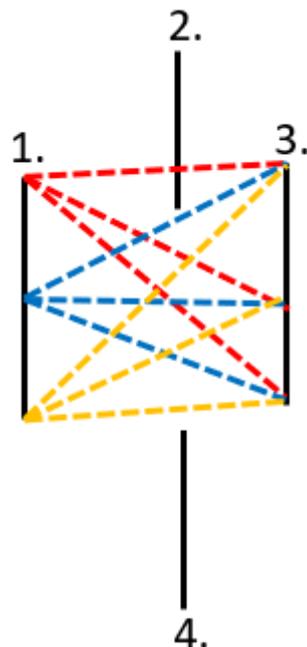
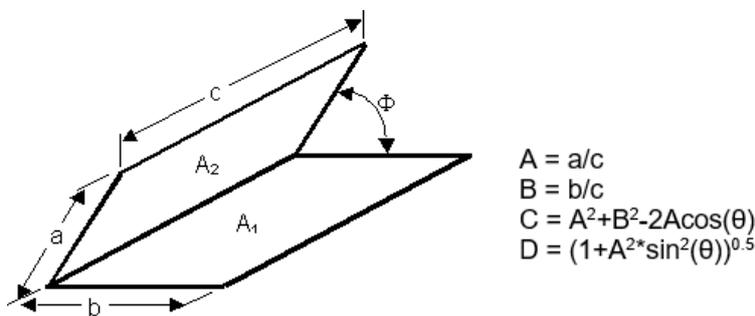


Abb. 2.10 Identifizierung von blockierenden Seiten

Durch diese Vereinfachung können Fälle vorkommen, in denen durch das Verbinden der Eck- und Mittelpunkte eine Blockade nicht erkannt wird. Das bedeutet aber, dass der Schatteneffekt der nicht erkannten Seite auch klein ist, weil diese nur einen kleinen Teil der Zielseite abschirmt.

Der Vorteil dieses Auswahlprozesses vor der eigentlichen Berechnung der Sichtfaktoren ist, dass man, wenn die blockierenden Seiten bereits identifiziert sind, bei der Verbindung der einzelnen Subflächen zwischen den Seiten nur die relevanten und nicht alle freien Flächen betrachten muss.

Als weitere Maßnahme zum Einsparen von Rechenzeit wurden für bestimmte Konfigurationen analytische Formeln implementiert. Diese werden für Geometrien benutzt, bei denen keine Schatteneffekte vorkommen können. So eine Konfiguration kann entstehen, wenn nur eine Node weggeschmolzen ist. Dann lassen sich die Sichtfaktoren bei benachbarten Seiten mit der in Abb. 2.11 dargestellten Methode berechnen.

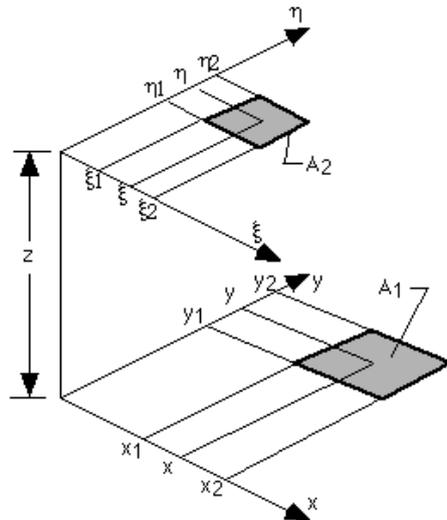


$$\begin{aligned}
 F_{1-2} = & -\frac{\sin 2\Phi}{4\pi B} \left[AB \sin \Phi + \left(\frac{\pi}{2} - \Phi \right) (A^2 + B^2) + B^2 \tan^{-1} \left(\frac{A - B \cos \Phi}{B \sin \Phi} \right) + A^2 \tan^{-1} \left(\frac{B - A \cos \Phi}{A \sin \Phi} \right) \right] \\
 & + \frac{\sin^2 \Phi}{4\pi B} \left\{ \left(\frac{2}{\sin^2 \Phi} - 1 \right) \ln \left[\frac{(1 + A^2)(1 + B^2)}{1 + C} \right] + B^2 \ln \left[\frac{B^2(1 + C)}{(1 + B^2)C} \right] + A^2 \ln \left[\frac{A^2(1 + A^2)^{\cos 2\Phi}}{C(1 + C)^{\cos 2\Phi}} \right] \right\} \\
 & + \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{1}{B} \right) + \frac{A}{\pi B} \tan^{-1} \left(\frac{1}{A} \right) - \frac{\sqrt{C}}{\pi B} \tan^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{C}} \right) \\
 & + \frac{\sin \Phi \sin 2\Phi}{2\pi B} AD \left[\tan^{-1} \left(\frac{A \cos \Phi}{D} \right) + \tan^{-1} \left(\frac{B - A \cos \Phi}{D} \right) \right] \\
 & + \frac{\cos \Phi}{\pi B} \int_0^1 \sqrt{1 + \xi^2 \sin^2 \Phi} \left[\tan^{-1} \left(\frac{\xi \cos \Phi}{\sqrt{1 + \xi^2 \sin^2 \Phi}} \right) + \tan^{-1} \left(\frac{A - \xi \cos \Phi}{\sqrt{1 + \xi^2 \sin^2 \Phi}} \right) \right] d\xi
 \end{aligned}$$

Abb. 2.11 Analytische Berechnung von Sichtfaktoren bei benachbarten Seiten

/FEI 66/

Bei gegenüberstehenden Seiten kann der Sichtfaktor mit Hilfe der in der Abb. 2.12 dargestellten Methode bestimmt werden, auch wenn sie nicht auf gleicher Höhe liegen.



$$F_{1-2} = \frac{1}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)} \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^2 (-1)^{(i+j+k+l)} G(x_i, y_j, \eta_k, \xi_l)$$

$$G = \frac{1}{2\pi} \left(\begin{array}{l} (y - \eta) \left[(x - \xi)^2 + z^2 \right]^{1/2} \tan^{-1} \left\{ \frac{y - \eta}{\left[(x - \xi)^2 + z^2 \right]^{1/2}} \right\} \\ + (x - \xi) \left[(y - \eta)^2 + z^2 \right]^{1/2} \tan^{-1} \left\{ \frac{x - \xi}{\left[(y - \eta)^2 + z^2 \right]^{1/2}} \right\} \\ - \frac{z^2}{2} \ln \left[(x - \xi)^2 + (y - \eta)^2 + z^2 \right] \end{array} \right)$$

Abb. 2.12 Berechnung von Sichtfaktoren paralleler Seiten /ABI 95/.

Um weitere Rechenzeit zu sparen, wird die Reziprozitätsbeziehung der Sichtfaktoren ausgenutzt. Die Beziehung sagt Folgendes aus:

$$A_1 * VF_{12} = A_2 * VF_{21} \quad (2.10)$$

Das bedeutet, wenn zwischen zwei Seiten der Sichtfaktor in einer Richtung numerisch bestimmt wurde, dann muss man für die umgekehrte Richtung das numerische Verfahren nicht wiederholen. So verringert sich die Rechenzeit für diesen Fall um 50 %.

Mit dieser Methode konnte eine Routine zur Berechnung der Sichtfaktoren entwickelt werden, die in der Größenordnung von Sekunden die Sichtfaktoren in einem beliebig zerstörten Kern bestimmt.

2.1.2.3 Verifizierung der Methode zur Sichtfaktorberechnung

Für die meisten Geometrien gibt es keine analytische Lösung für die Bestimmung der Sichtfaktoren. Deswegen musste eine Methodik entwickelt werden, mit der sich die implementierte Berechnung der Sichtfaktoren überprüfen lässt. Diese Methodik basiert darauf, dass die Summe der Sichtfaktoren für eine Seite immer Eins ist:

$$\sum_{j=1}^N VF_{ij} = 1 \quad (2.11)$$

Nachdem alle Sichtfaktoren zu einer bestimmten Geometrie berechnet wurden, werden die Sichtfaktoren für jede Seite aufsummiert. Wenn diese Summe um weniger als 10 % von Eins abweicht, dann wird die Berechnung akzeptiert. Falls die Abweichung größer ist, ist eine detailliertere Aufteilung der Seiten notwendig. Wenn die Abweichung dadurch auch nicht kleiner wird, dann gibt es einen Fehler in der Berechnung mit entsprechender Ausgabe von ATHLET-CD.

Die Methode zur Sichtfaktorberechnung wurde zuerst separat von ATHLET-CD entwickelt und benutzt. Die Abmessungen des Reaktors, die Nodalisierung, die Seitengrößen und der Zerstörungsgrad konnten per Benutzereingabe bestimmt werden. Das hatte den Vorteil, dass man schnell verschiedene Geometrien erzeugen konnte und Tests speziell hinsichtlich der Berechnung der Sichtfaktoren durchgeführt werden konnten. So konnten gezielt bestimmte Geometrien betrachtet werden. Außerdem wurde in dieses Programm ein Zufallsgenerator implementiert, welcher die Benutzereingabe ersetzte. Dieser hat bei einer bestimmten Reaktorgröße und einer bestimmten Nodalisierung zufällig Nodes zum Schmelzen gebracht.

Die separate Entwicklung der Methode zur Sichtfaktorberechnung wurde erfolgreich abgeschlossen, nachdem 1.000 Zufallsfälle berechnet wurden, ohne dass mehr als 10 % Abweichung in den Summen der Sichtfaktoren pro Seite vorkamen. Im Anschluss konnte die Berechnung der Sichtfaktoren in ATHLET-CD implementiert werden (s. Kapitel 2.1.4).

2.1.3 Realisierung der flexiblen Nodalisierung

Wie schon in Abschnitt 2.1.1 erläutert ist eine Änderung der herkömmlichen Ring-Nodalisierung notwendig, um lokale Effekte berücksichtigen zu können.

Bei der Realisierung einer flexiblen Nodalisierung musste dazu eine Methode entwickelt werden, durch die ATHLET-CD die dreidimensionalen Daten bekommt und die bestimmt, wie dann mit diesen Daten umgegangen wird. Außerdem musste für das neue Strahlungsmodell ein System aufgebaut werden, das die Form und Verbindung der einzelnen Nodes beinhaltet.

In ATHLET-CD musste man als Benutzer bisher die einzelnen Ringe definieren. Allerdings, wie schon im vorigen Kapitel erwähnt, wirkt sich die Annahme der Ringe nur in den Modellen zur Wärmestrahlung und zur horizontalen Schmelzeausbreitung aus. Wenn der Benutzer mehr Nodes im Kern definiert (analog zur Definition der Ringe), wird dadurch bereits automatisch die korrekte Berechnung der meisten Phänomene ermöglicht. Wenn man zunächst die horizontale Schmelzeausbreitung vernachlässigt, muss man nur dem neuen Strahlungsmodell die dreidimensionalen Informationen über die Nodes zur Verfügung stellen.

Grundsätzlich wurden bei der flexiblen Nodalisierung zwei Fälle unterschieden: Reaktorfall und Lagerbeckenfall. Beide Fälle weisen zwar viele Ähnlichkeiten auf, sie werden in den folgenden Kapiteln aber separat betrachtet.

2.1.3.1 Reaktor Anwendung

Für Reaktor Anwendungen können die für das Strahlungsmodell notwendigen 3D-Daten von der Ringgeometrie abgeleitet werden. Wenn der Benutzer die neue Nodalisierung für Reaktor Anwendungen benutzen möchte, muss er lediglich in der Eingabedatei mehr Kern-Nodes definieren, ganz analog zur bisherigen Definition der "Ringe". Dabei muss man pro Ring mindestens drei Nodes in azimuthaler Richtung definieren. Abb. 2.13 zeigt ein Beispiel für die nötigen Eingabeänderungen zur Berücksichtigung lokaler Effekte. Wenn man die Nodalisierung eines Kerns mit zwei Ringen in eine detailliertere Nodalisierung mit jeweils sechs azimuthalen Sektoren pro Ring aufteilen möchte, dann muss man nur, wie in der Abbildung dargestellt, die Anzahl der pro Node definierten Brennstäbe (RODFRA: 6000 → 1000) und Kontrollstäbe (CRFRA: 300 → 50) anpassen. Nodes mit gleichem Außenradius (RSEC) gehören alle zu einem Ring.

Nach dem Einlesen der Daten werden von den Außenradien der Nodes und der Anzahl der Nodes innerhalb eines Ringes die entsprechenden Koordinaten abgeleitet. Die axialen Größen werden automatisch immer noch vom ATHLET-Objekt übernommen, in dem die Kern-Node definiert ist. Programmintern werden außerdem die Nodes und die Seiten der Nodes durchnummeriert (Abb. 2.14).

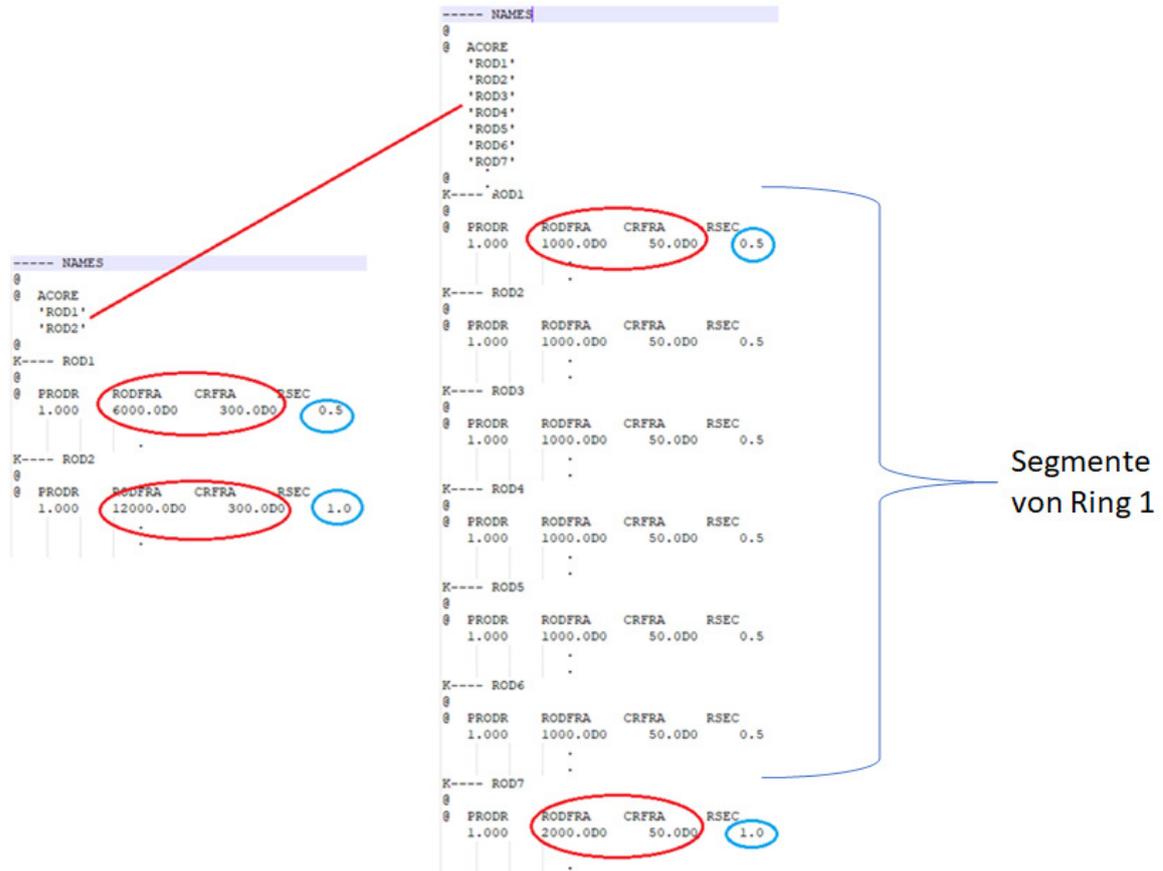


Abb. 2.13 Änderungen in der Eingabe, um durch eine genauere Nodalisierung lokale Effekte berücksichtigen zu können (links: alte Nodalisierung mit zwei Ringen, rechts: neue Nodalisierung mit zwei Ringen und jeweils sechs Segmenten)

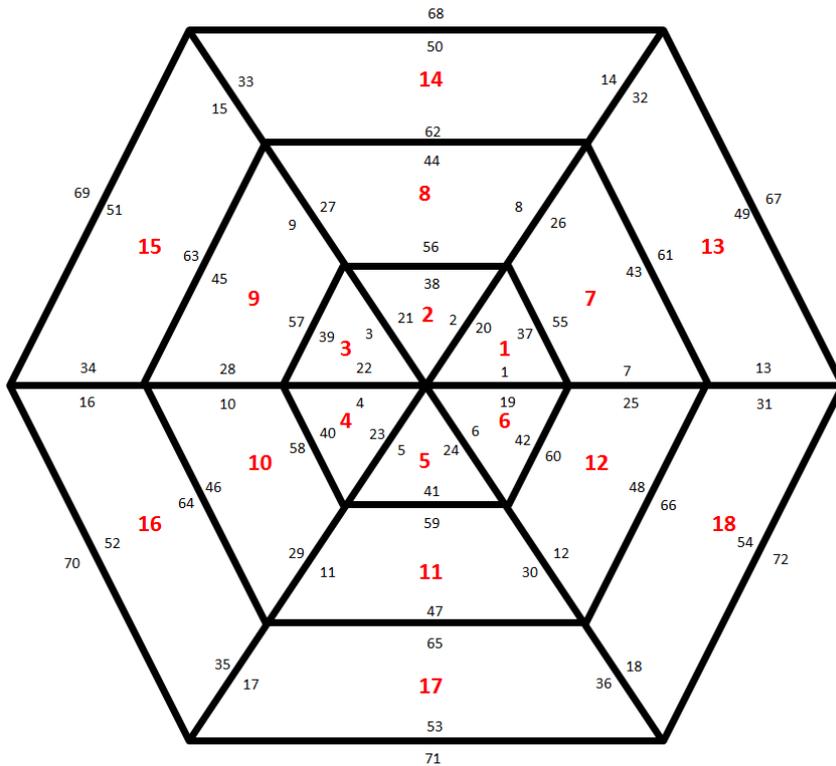


Abb. 2.14 Programinterne Behandlung der Daten der Nodes (mit automatischer Nummerierung)

Diverse Anfangsverbindungen werden gespeichert:

- Welche Seiten gehören zu bestimmten Nodes?
Beispiel: Zu Node 7 gehören die Seiten 7, 55, 26 und 43.
- Welche Node ist mit welcher benachbart?
Beispiel: Node 7 hat die Nachbar-Nodes 1, 8, 13 und 12.
- Welche Seite ist mit welcher Seite benachbart?
Beispiel: Die Seiten 8 und 26 sind Nachbarn.

Wenn eine Node wegschmilzt, dann wird die Information über die möglichen Verbindungen weitergegeben. Wenn beispielsweise Node 7 schmilzt, bedeutet das:

- Die Seiten von Node 7 werden inaktiv (Fläche = 0).
- Seite 37 bekommt statt Seite 55 als neue Nachbarn die Seiten 8, 61 und 25.
- Die Berechnung der Sichtfaktoren erfolgt zu den neuen Nachbarn und zur Ober- bzw. Unterseite der abgeschmolzenen Node.

Der Benutzer hat auch die Möglichkeit, die innerste Node als eine zentrale Node zu simulieren. In diesem Fall muss der Benutzer nur eine Node für den innersten Ring definieren, für die anderen Ringe weiterhin mehrere, ähnlich wie vorher dargestellt (Abb. 2.15). Programmintern wird die innerste Node trotzdem als azimuthal aufteilt behandelt und die Strahlungsrechnung erfolgt genauso wie bei dem Fall, in dem der innerste Ring auch azimuthal aufgeteilt ist. Die innersten Nodes haben aber die gleichen relevanten Parameter und Randbedingungen.

Da die meisten ATHLET-Datensätze in dieser Art nodalisiert sind (mit Zentralstab), hat diese Option auch den Vorteil, dass schnell und einfach ein solcher ATHLET-Datensatz in einen Datensatz für ATHLET-CD umgewandelt werden kann.

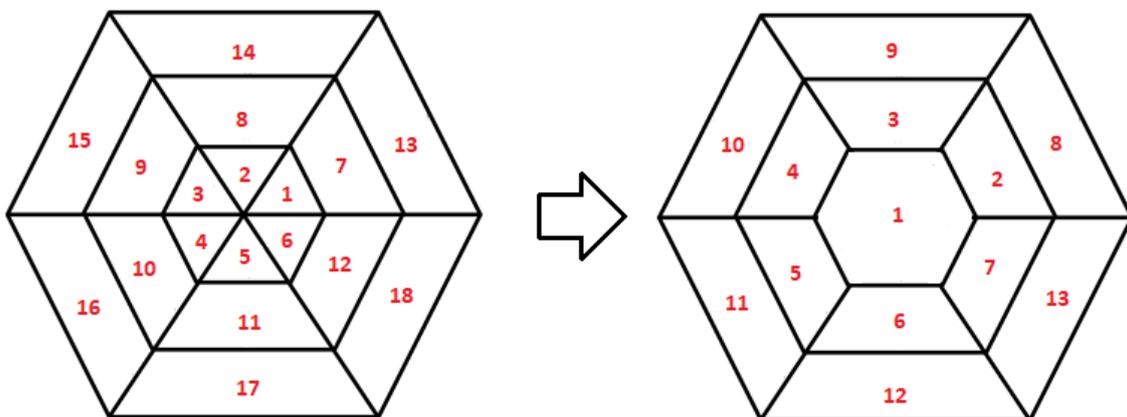


Abb. 2.15 Innerster Bereich des Kerns als eine zentrale Node

2.1.3.2 Lagerbeckenanwendung

Bei Lagerbecken kann der Benutzer beliebig positionierte, viereckige Nodes definieren und kann damit typische Lagerbeckengeometrien wesentlich besser abbilden. Allerdings können dabei leider keine Anfangsverbindungen abgeleitet werden. Daher muss der Benutzer alle Koordinaten und Anfangsverbindungen per Hand eingeben. Da aktuell eine entsprechende Programmeingabe über die Eingabedatei noch fehlt, müssen zurzeit noch alle entsprechenden Daten fest im Quelltext hinterlegt werden, was in der tatsächlichen Anwendung jedoch nicht praktikabel ist, zumal dem Anwender in der Regel auch kein Quellcode zur Verfügung steht. Daher besteht in diesem Punkt noch Verbesserungsbedarf für künftige Arbeiten.

2.1.4 Einbau des neuen Strahlungsmodells in ATHLET-CD

Das neue Modell zur Berechnung der Sichtfaktoren wurde nach ausführlichem Testen in ATHLET-CD eingebaut. Dank der vielen Rechenzeitoptimierungen liegt die Laufzeit einer Sichtfaktorenberechnung in der Größenordnung von Sekunden, was aber immer noch zu langsam ist, um die Sichtfaktoren in jedem Zeitschritt zu berechnen. Deswegen wurde entschieden die Sichtfaktoren nur neu zu berechnen, wenn sich die Geometrie ändert. Eine solche relevante Änderung in der Geometrie wird vom Programm angenommen, wenn mehr als 70 % einer Node weggeschmolzen ist. Dann werden die Sichtfaktoren neu berechnet. Ab dem Zeitpunkt werden die Nachbarseiten vom geschmolzenen Node frei und nehmen an der Hohlraumstrahlung teil. Das Modell für die axiale Verlagerung der Schmelze ist von der neuen Nodalisierung dagegen nicht beeinflusst.

In ATHLET-CD wurde eine Option eingebaut, die es ermöglicht, im Kernbereich leere (also brennstofffreie) Gebiete zu definieren. Diese Option ist hauptsächlich bei Lagerbeckensimulationen von großer Relevanz, weil dort häufig unbeladene Gebiete vorkommen. Um dies abzubilden, muss der Benutzer im Inputdatensatz lediglich die Anzahl der Brennstäbe innerhalb einer Kern-Node auf 0 setzen. Diese Node wird vom Strahlungsmodell dann erkannt und wird intern als geschmolzene Node betrachtet, Strahlung wird entsprechend zu den benachbarten Seiten des leeren Nodes berechnet.

Die thermohydraulischen Verbindungen in einer Kern-Node waren auf vier limitiert, da angenommen wurde, dass das Kühlmittel nach unten, nach oben, nach innen und nach außen fließen kann. In der detaillierteren Nodalisierung hat jede Node allerdings mehr Nachbarn, zu denen das Kühlmittel fließen kann. Daher wurde der limitierende Faktor entfernt, d. h. Verbindungen können in beliebiger Weise, ähnlich wie in reinen ATHLET-Simulationen, definiert werden.

Wärmestrahlung kann den Kernbereich auch verlassen, da die Nodes am Rande des Kerns (und auch die inneren Nodes, nach ausgebreiteter Kernzerstörung) nach außen strahlen. Diese Wärmestrahlung wurde bisher von ATHLET-Objekten abgefangen. Bei der detaillierteren Nodalisierung geschieht das ähnlich, allerdings muss der Benutzer hier auch in jeder azimuthalen Richtung ein ATHLET-Wärmeobjekt definieren, das als gerade Wand bei der Sichtfaktorenberechnung berücksichtigt wird. Diese Wände bekommen Strahlung vom Kern, werden dadurch aufgeheizt, können derzeit aber nicht schmelzen. Die axiale Strahlung zu den oberen und unteren Bereichen des Kerns wird

jeweils nur von einem einzigen ATHLET-Wärmeobjekt abgefangen. Bei Lagerbeckenrechnungen können radial mehrere Nodes mit Brennelementen auf das gleiche ATHLET-Wärmeobjekt strahlen. Axial kann der Benutzer eine Umgebungstemperatur definieren, die als Randbedingung für die Wärmestrahlung fungiert.

Die Steuerstäbe befinden sich in DWR innerhalb der Brennelemente, die Strahlung zum Steuerstab geschieht daher innerhalb eines Nodes. Die Änderung der Nodalisierung und des Strahlungsmodells hat hier keinen Einfluss. Für die SWR-Strukturen, die sich innerhalb eines Nodes befinden, gilt weitgehend das Gleiche. Allerdings müssen die Kanisterwände und Absorberblätter, die sich auch am Rande der Nodes befinden (können), im Strahlungsaustausch zwischen den Nodes berücksichtigt werden. Deswegen wird die Strahlung von diesen Strukturen absorbiert, solange sie noch intakt sind.

Im Lagerbecken haben DWR-Brennelemente auch eine Art Kanisterwand, die bei der Rechnung berücksichtigt werden muss. Diese wird ähnlich einer SWR-Struktur berücksichtigt, die einzigen Änderungen wurden bezüglich ihrer Materialeigenschaften implementiert.

2.1.5 Verifizierung der flexiblen Nodalisierung in ATHLET-CD

Die Verifizierung der neuen Nodalisierung und des neuen Strahlungsmodells wurde in mehreren Stufen durchgeführt. Zuerst wurde überprüft, ob die Implementierung des neuen Strahlungsmodells und die detaillierterer Nodalisierung grundsätzlich programmtechnisch richtig ist. Danach wurden diverse Rechnungen für Reaktorfälle und Lagerbeckenfälle durchgeführt und auf Plausibilität überprüft.

2.1.5.1 Verifizierung der Implementierung der neuen Modelle und der neuen Nodalisierungsmöglichkeiten

Ziel dieses Teils der Verifizierung war zu überprüfen, ob ATHLET-CD mit der neuen Nodalisierung und dem neuen Strahlungsmodell prinzipiell lauffähig ist und ob die berechneten radiativen Wärmeströme den richtigen Strukturen zugeordnet werden.

Für diesen Zweck wurde ein fiktives Testbeispiel generiert, das auch von Hand nachgerechnet werden konnte. Ein alter Reaktordatensatz, in dem der Kern mit vier Ringen repräsentiert wurde, wurde in azimuthaler Richtung in acht Nodes pro Ring aufgeteilt.

Abb. 2.16 zeigt den Reaktor, in dem die neuen Modelle getestet wurden. Links sieht man die Nodalisierung des Kerns von der Seite im Schnitt der grünen Linie. Rechts oben in der Abbildung sieht man den Querschnitt des Reaktors auf der Höhe der Markierungsnummer 1. Die Farben der Abbildung zeigen die Temperatur der Brennelemente.

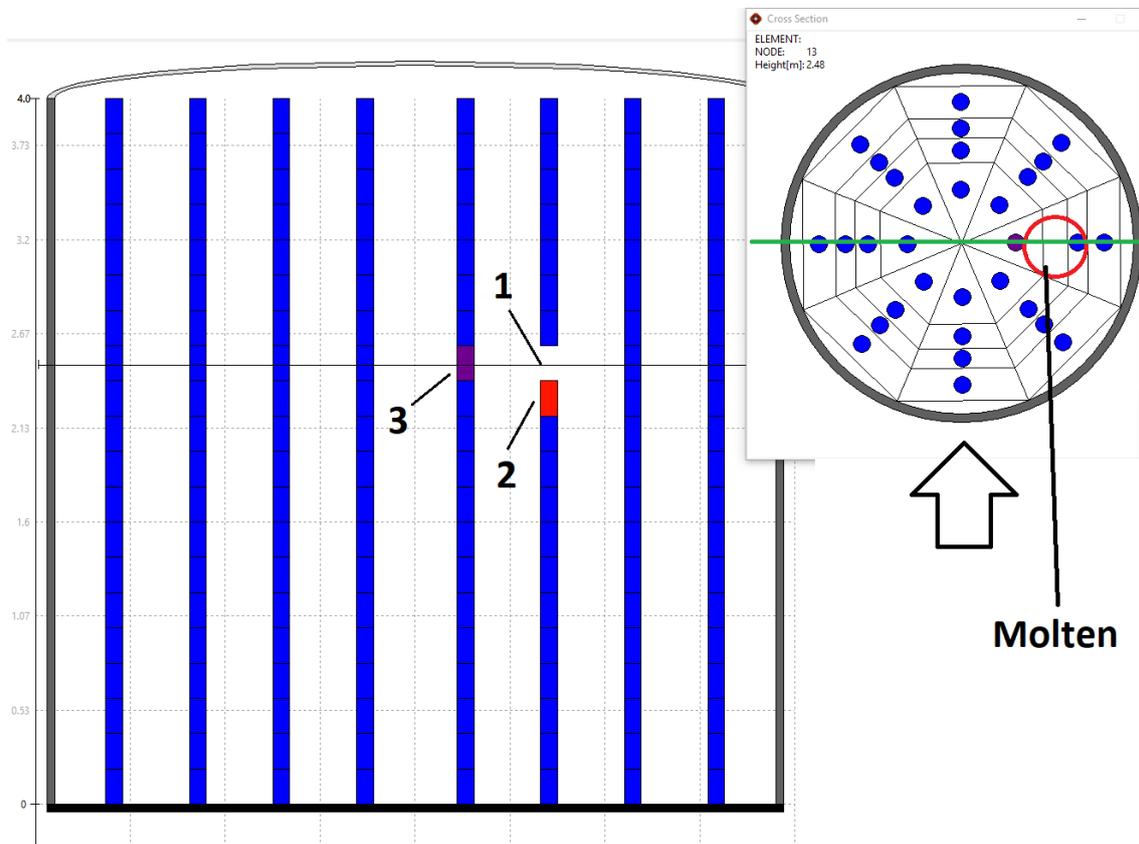


Abb. 2.16 Modell zur Verifizierung des Strahlungsmodells

In diesem Beispiel wurde eine Node künstlich schnell zum Schmelzen gebracht, die Strukturen aus der Node haben sich dadurch nach unten verlagert. Die benachbarten Seiten dieser Node sind frei geworden, danach wurde die Leistung im Reaktor ausgeschaltet. Als sich die Temperaturen stabilisiert hatten, wurde die Leistung vor Node unter dem Hohlraum (markiert mit 2) künstlich mit einer konstanten Leistung aufgeheizt. Die Idee dabei war, auf diese Weise einen stationären Zustand zu bekommen und die von ATHLET-CD berechneten Temperaturen dann von Hand nachzurechnen. Da viele Phänomene gleichzeitig vorkommen und viele Nodes betroffen sind, wurden folgende Vereinfachungen gemacht:

- Programmintern wurden alle Nodes künstlich auf 500 K gesetzt.
 - Ausnahme sind die Nodes, die mit "2" und "3" markiert sind.

- Alle Wärmeströme außer der Wärmestrahlung wurden programmintern ausgeschaltet.

Unter diesen Annahmen und Vereinfachungen war es möglich, zum Vergleich die stationäre Temperaturverteilung um den Hohlraum per Handrechnung zu bestimmen. Durch Lösung der Energiegleichungen der zwei Nodes, deren Temperatur nicht fixiert wurde, kann man ausrechnen, wie heiß die Nodes im stationären Zustand werden. Die Energiegleichungen für Node "2" und "3" sind:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_2 = & \sigma * \varepsilon_2 * \varepsilon_3 * A_{2h} * VF_{23} * (T_2^4 - T_3^4) + \sigma * \varepsilon_2 * \varepsilon_{fix} * A_{2h} \\ & * (1 - VF_{23}) * (T_2^4 - T_{fix}^4) + \sigma * \varepsilon_2 * \varepsilon_{fix} * A_{2v} * 1 \\ & * (T_2^4 - T_{fix}^4) \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_3 = & \sigma * \varepsilon_2 * \varepsilon_3 * A_{3vf} * VF_{32} * (T_3^4 - T_2^4) + \sigma * \varepsilon_3 * \varepsilon_{fix} * A_{3vf} \\ & * (1 - VF_{32}) * (T_3^4 - T_{fix}^4) + \sigma * \varepsilon_3 * \varepsilon_{fix} * A_{3v} * 1 \\ & * (T_3^4 - T_{fix}^4) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Die rechte Seite der Gleichungen besteht aus drei Teilen:

- Strahlung zwischen Node 2 und 3
- Strahlung von Node 2/3 an die freien Oberflächen mit konstant gehaltener Temperatur im Hohlraum
- Strahlung von Node 2/3 an die benachbarten, intakten Oberflächen mit konstant gehaltener Temperatur im Hohlraum (mit der Option, dass immer das neue Strahlungsmodell benutzt wird)

Die benutzten Parameter sind in Tab. 2.1 zusammengefasst.

Tab. 2.1 Verwendete Parameter für die Bestimmung der freien Temperaturen

ϵ	0,8
A_{2h}	0,313 m ²
A_{2v}	0,5033 m ²
VF_{23}	0,148
T_{fix}	500 K
A_{3hf}	0,1438 m ²
VF_{32}	0,325
A_{3h}	0,3752 m ²
Q_2	468.750 W
Q_3	0 W

Die zwei unbekanntenen Variablen T_2 und T_3 können bestimmt werden. Die Ergebnisse sind in Tab. 2.2 zusammengefasst.

Tab. 2.2 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der analytischen Nachrechnung

	Von Hand berechnet	Mit ATHLET-CD berechnet
T_2 (K)	1.103	1.105
T_3 (K)	1.998	2.000

Die per Hand ausgerechneten Temperaturwerte liegen sehr nah zu den Werten, die von ATHLET-CD berechnet wurden. Das ist ein Indiz dafür, dass die entwickelten externen Modelle und die kleineren strukturellen Änderungen in ATHLET-CD programmiertechnisch richtig implementiert wurden.

2.1.5.2 Plausibilitätsprüfung für Simulationen von Unfällen im Reaktor

Um die neuen Modelle und die detaillierte Nodalisierung zu überprüfen sowie den Einfluss der neuen Nodalisierung auf den Unfallablauf zu zeigen, wurden vier Rechnungen mit zwei Unfallszenarien durchgeführt, jeweils einmal mit der alten "Ring-Nodalisierung" und einmal mit der neuen, detaillierteren Nodalisierung. Die Beispielfälle waren bezüglich der Anfangs- und Randbedingungen so optimiert, dass die simulierten Szenarien schnell zur Kernzerstörung führten. Deswegen wurde bei allen Rechnungen ein DWR-Modell benutzt, bei dem der Kern schon von Anfang an nur von Dampf um-

geben ist und der nur durch Strahlung an die Umgebung gekühlt wird. Die Nachzerfallsleistung ist radialsymmetrisch. /LOL 18a/

Die benutzten zwei Nodalisierungsvarianten sind in Abb. 2.17 dargestellt. Die Abbildung stellt auch den Anfangszustand aller Rechnungen dar. Die kleinen Kreise bei der Querschnittsdarstellung repräsentieren die Brennstäbe innerhalb eines Nodes auf einer bestimmten Höhe, deren Farbe deutet auf ihre Temperatur hin (rot: hoch, blau: niedrig). Als Vergleich ist auch der Querschnitt der Ring-Nodalisierung dargestellt, der in diesem Fall jedoch keine Zusatzinformation zusätzlich zu dem vertikalen Schnitt liefert (die Brennstäbe in den Sektoren 2 und 6 sind aus Richtung 8 sichtbar). Der vertikale Schnitt zeigt die Brennstäbe in der Ebene der angezeigten Linie, und zwar aus der Richtung des dargestellten Pfeils. Bei der Ring-Nodalisierung ist die Richtung der Darstellung irrelevant. Die Hintergrundfarbe deutet auf den Dampfanteil hin (blau: Wasser, hellblau: Dampf).

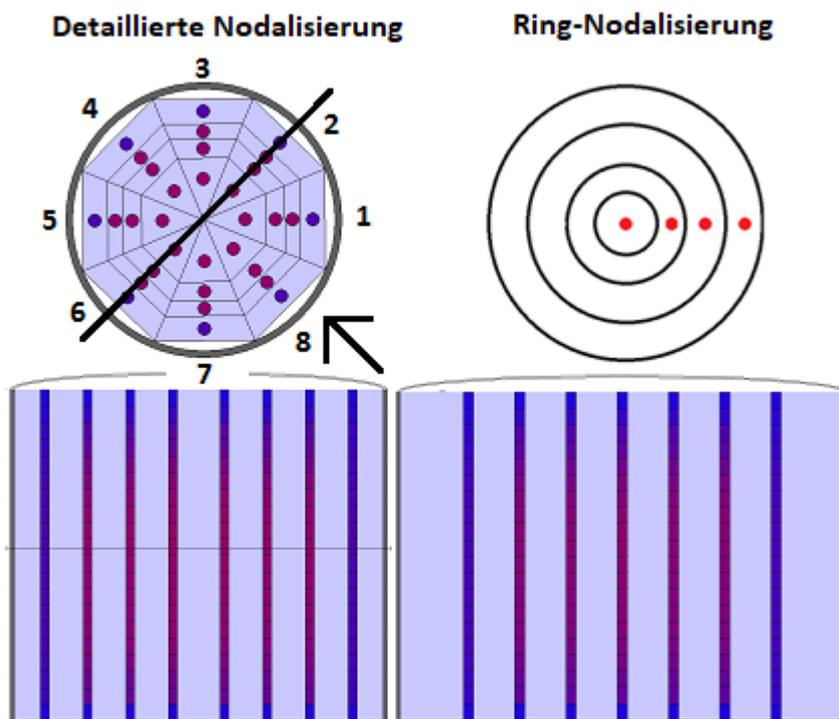


Abb. 2.17 Vertikaler und horizontaler Schnitt für die Beispielfälle /LOL 18b/

2.1.5.2.1 Unfallsimulation unter symmetrischen Bedingungen

Zuerst wurden Simulationen mit dem gleichen, oben beschriebenen DWR-Input durchgeführt, einmal mit der alten Nodalisierung und einmal mit der neuen. In beiden Fällen wurden keine Maßnahmen zur Unfallbeherrschung angenommen. Das bildet einen kompletten, ideal symmetrischen Fall ab. Die Unterschiede der zwei Rechnungen lagen nur in der Nodalisierung und im Strahlungsmodell. Die wichtigsten Erkenntnisse werden mit Hilfe der Abb. 2.18 erklärt, die die wichtigsten Zustände während des Unfallablaufs zeigt.

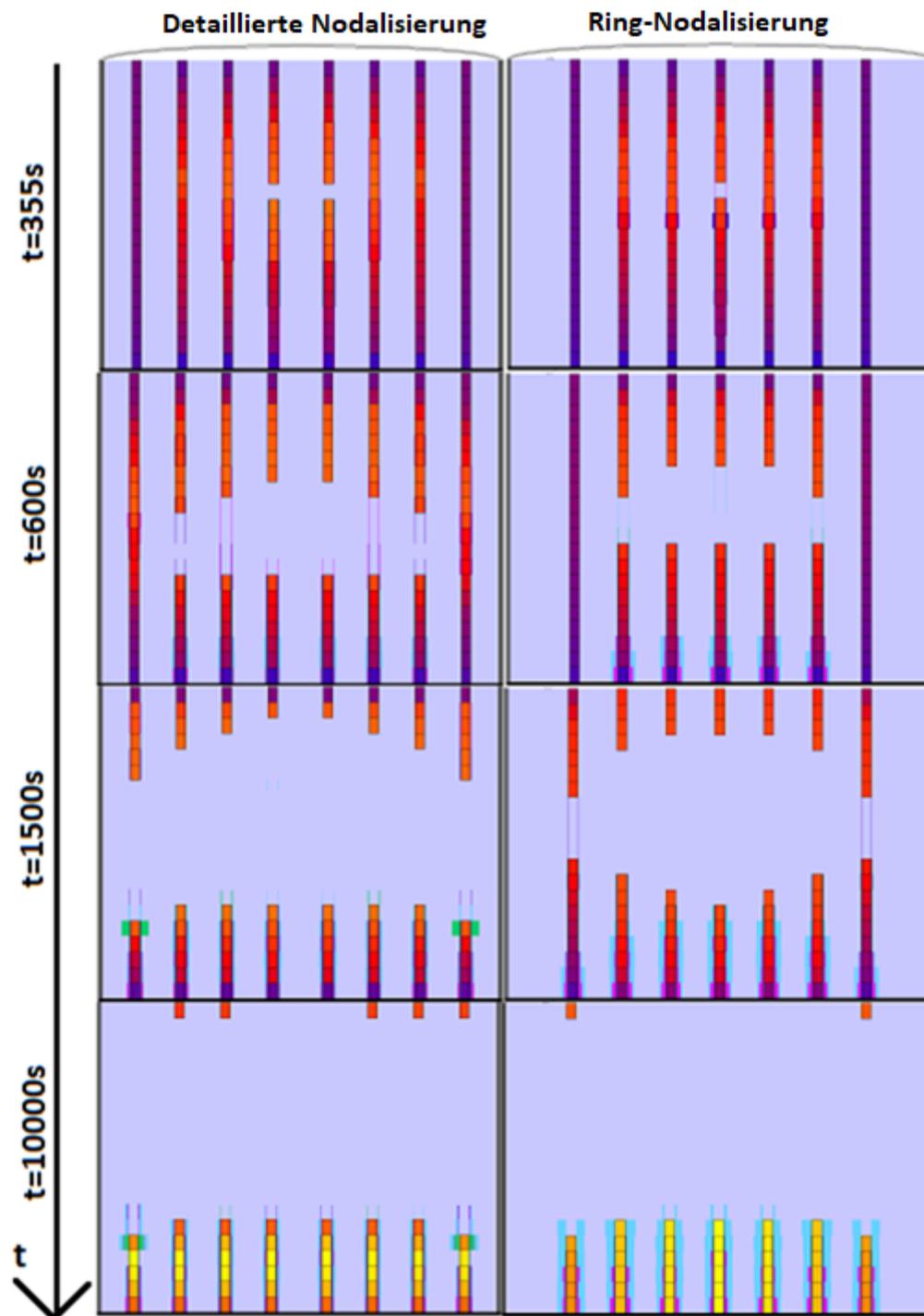


Abb. 2.18 Wichtige Zustände während des Unfallablaufs (symmetrischer Fall)
/LOL 18b/

Das Abschmelzen der ersten Nodes geschieht in beiden Rechnungen zum gleichen Zeitpunkt und an der gleichen Stelle. Zu diesem Zeitpunkt ist die Temperaturverteilung im Kern sehr ähnlich. Diese Tatsache zeigt, dass sich das neue Strahlungsmodell bei intakten Geometrien ähnlich wie das alte verhält, was auch zu erwarten war. Ab die-

sem Zeitpunkt sind dann jedoch gewisse Unterschiede zu erkennen, weil das neue Strahlungsmodell die diagonale Strahlung anders als das alte berücksichtigt. Dies wird zur Simulationszeit von etwa 600 s sehr offensichtlich: die Brennstäbe in den äußersten Nodes werden bei dem neuen Strahlungsmodell heißer, weil diese von den heißen Nodes diagonal von oben und diagonal von unten Energie durch Strahlung bekommen. Zu diesem Zeitpunkt ist aber der Zerstörungsgrad des Kerns in beiden Simulationen noch sehr ähnlich. Die ersten größeren Unterschiede ergeben sich ca. beim Zeitpunkt $t = 1.500$ s, wenn wegen der diagonalen Strahlung die äußersten Brennstäbe bei der detaillierteren Nodalisierung viel mehr abgeschmolzen sind. Am Ende der Simulation verschwinden aber diese Unterschiede, weil in beiden Simulationen ein sehr hoher Zerstörungsgrad erreicht wird.

Dieser Vergleich liefert somit einige wichtige Erkenntnisse: Bei intakten Geometrien bekommt man sehr ähnliche Ergebnisse, unabhängig vom benutzten Strahlungsmodell. Nachdem ein Hohlraum im Kern entstanden ist, zeigen sich jedoch gewisse Unterschiede in den Strahlungsmodellen, welche sich auf die Art der Berücksichtigung der Diagonalstrahlung zurückzuführen lassen. Insgesamt sind die Ergebnisse bei Simulationen ohne asymmetrische Effekte qualitativ jedoch sehr ähnlich.

2.1.5.2.2 Unfallsimulation unter asymmetrischen Bedingungen

Bei der zweiten Vergleichsrechnung war das Ziel einen stark asymmetrischen Fall mit den zwei Nodalisierungsvarianten (Modellen) abzubilden. Dafür wurde der vorher benutzte Fall insofern abgeändert, dass ein Teil des Kerns zum Zeitpunkt $t = 150$ s von oben geflutet wurde. Die einseitige Einspeisung mit einem Massenstrom von 400 kg/s dauerte 15 s lang und fand in der Simulation künstlich nur im Sektor 2 statt, um gezielt eine Asymmetrie zu erzeugen. Bei der Ring-Nodalisierung konnte man dieses Szenario nicht exakt abbilden, da das Wasser aufgrund der Einschränkungen durch die einfachere Nodalisierung gleichmäßig über die Ringe verteilt werden musste. Im Gegensatz dazu konnte man die Einspeisung bei der detaillierten Nodalisierung künstlich und gezielt dem Sektor 2 zuweisen. Dieser Unterschied hat einen großen Einfluss auf den Unfallablauf, wie in Abb. 2.19 sichtbar ist.

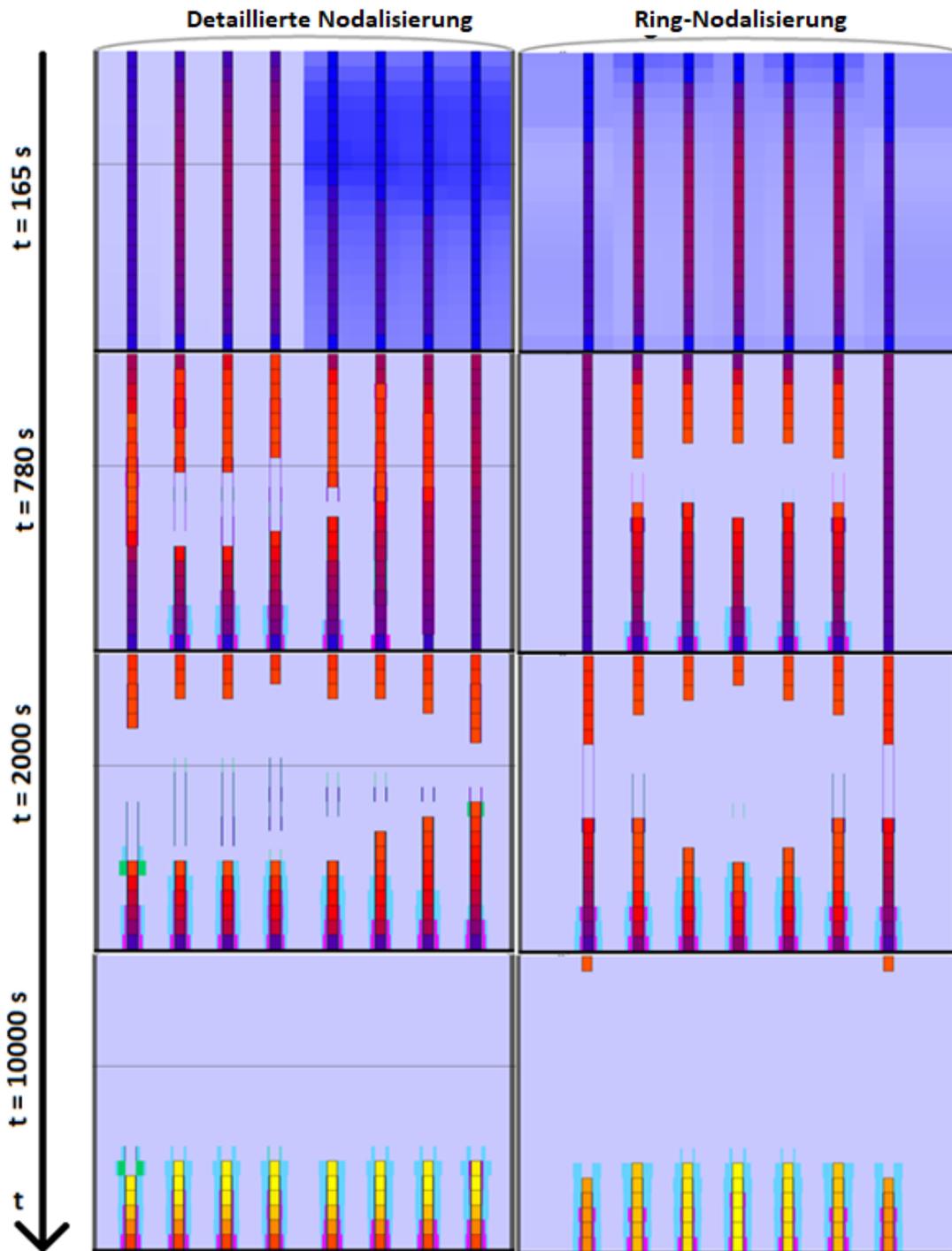


Abb. 2.19 Wichtige Zustände während des Unfallablaufs (asymmetrischer Fall)
/LOL 18b/

Die Aufnahme zum Zeitpunkt $t = 165 \text{ s}$ zeigt das Fluten. Wie gut zu sehen ist, konzentriert sich das eingespeiste Wasser bei der detaillierten Nodalisierung auf Sektor 2, während sich das eingespeiste Wasser bei der Ring-Nodalisierung über alle Ringe verteilt und daher im Schnitt schwächer erscheint. Man kann mit der Ring-Nodalisierung diesen Fall physikalisch also nicht adäquat simulieren und die asymmetrische Charak-

teristik des Unfalls ist nur mit der detaillierteren Nodalisierung abzubilden. Ab diesem Punkt verhalten die Simulationen daher auch sehr unterschiedlich. Bei der detaillierten Nodalisierung wurden nur in Sektor 2 die Brennstäbe stark gekühlt und in Folge kann man sehen, dass sich die Kernzerstörung dann in Richtung der nicht gekühlten Regionen ausbreitet. Der Fall mit Ring-Nodalisierung bleibt im Gegensatz dazu symmetrisch. Die asymmetrische Charakteristik des Unfalls bleibt im ersten Fall hingegen lange erhalten und die von der Einspeisung gekühlte Regionen schmelzen erst später. Am Ende der Simulation, d. h. bei sehr stark zerstörtem Kern, verschwinden schließlich die Unterschiede zwischen den zwei Rechnungen. Maßnahmen zur Schadenbegrenzung während des Unfallablaufs könnten unter Umständen jedoch die Asymmetrie erhalten und könnten dadurch auch zu deutlich anderen Ergebnissen am Ende der Simulation führen.

Als Fazit dieser Rechnungen ist festzuhalten, dass die Art der Nodalisierung in bestimmten (stark asymmetrischen) Fällen großen Einfluss auf die Simulationsergebnisse hat. Einige Szenarien können mit der Ring-Nodalisierung nicht adäquat abgebildet werden, die neuen Möglichkeiten der Nodalisierung ermöglichen hingegen die Simulation solcher Unfallabläufe.

2.1.5.3 Plausibilitätsprüfung für Simulation von einem Unfall im Lagerbecken

Wie in Abschnitt 2.1.1 erläutert ist und besonders in Abb. 2.3 gut zu erkennen ist, ist eine wirklich gute Repräsentation eines rechteckigen Lagerbeckens mit Ring-Nodalisierung nicht möglich /LOL 18c/. Um die neuen Möglichkeiten für Sicherheitsanalysen mit der neuen Nodalisierung zu zeigen, wird im Folgenden eine Reihe von Simulationen zur Überprüfung der Modelle vorgestellt. Jede Rechnung stellt das gleiche Unfallszenario in einem Lagerbecken dar, der einzige Unterschied zwischen den Simulationen ist die räumliche Verteilung der Brennelemente. Die Simulationen wurden beendet, sobald die Schmelzmasse im Lagerbecken 50 % der Gesamtmasse erreichte. Neben der Demonstration der grundsätzlichen Lauffähigkeit war ein weiteres Ziel der Rechnungen zu zeigen, dass die Positionierung der Brennelemente innerhalb des Lagerbeckens großen Einfluss auf den Unfallablauf haben kann, was mit Hilfe der neuen Nodalisierung simuliert werden kann. /LOL 19/

Ein generischer Lagerbeckendatensatz wurde entwickelt, mit Abmessungen des Lagerbeckens von 6,75 m x 9,87 m. Die Gesamtleistung der im Lagerbecken gelagerten Brennelemente betrug 2,345 MW. Dabei waren 1.440 von 2.160 möglichen Positionen

mit Brennelementen besetzt. Diese Parameter sind vergleichbar mit den Daten des Lagerbeckens von Fukushima Daiichi Unit 4 /NEA 15/. Der postulierte Unfall bei den Simulationen war ein Szenario mit Kühlmittelverlust vom Lagerbecken. Der Leckmassenstrom war mit 10 kg/s definiert. Mit Hilfe der flexiblen Nodalisierung der Lagerbecken wurde in 24 gleichgroße, rechteckige Nodes aufgeteilt und jede belegte Node beinhaltete 90 Brennelemente.

Es wurden drei unterschiedliche Beladungskonfigurationen für das Lagerbecken untersucht, die in Abb. 2.20 dargestellt sind. Konfiguration 1 ist bezüglich Größe, Form, Leistungsverteilung und Beladungsschema am meisten dem Lagerbecken von Fukushima Daiichi Unit 4 ähnlich. Die Brennelemente in Konfiguration 2 haben die gleiche räumliche Anordnung wie in Konfiguration 1, aber alle beladenen Nodes haben die gleiche Leistung. Konfiguration 3 hat eine andere räumliche Anordnung, bei der die nicht beladenen Zonen möglichst gleichmäßig verteilt sind. Bei dieser Anordnung hatten alle beladenen Nodes die gleiche Leistung. Die bei den drei Anordnungen benutzte Leistungsverteilungen sind in Tab. 2.3 zusammengefasst. Wenn einer Node eine Leistung von 0 W zugewiesen ist, dann ist die Node leer. Ausnahme ist Node 11 in Konfiguration 1, hier ist diese Node mit frischen Brennelementen, ohne Leistung, beladen.

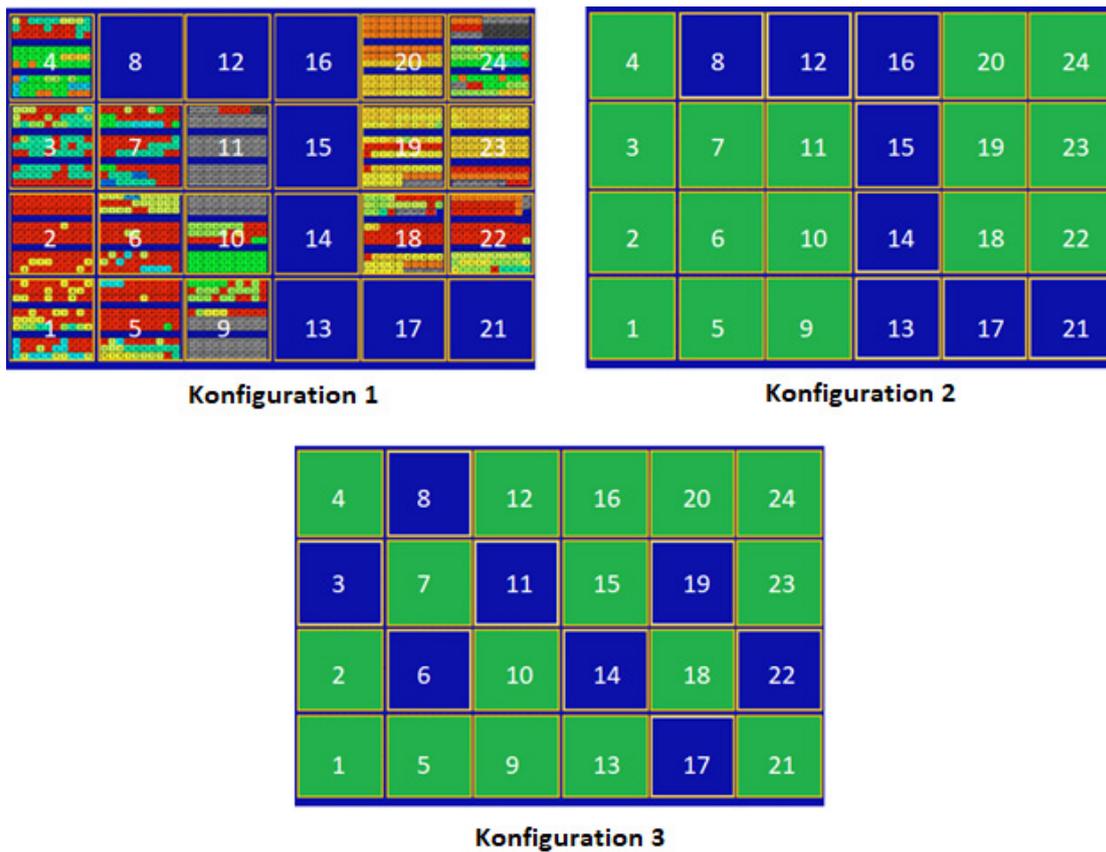


Abb. 2.20 Verschiedene Beladungskonfigurationen. Die Farben repräsentieren dabei die Leistung der einzelnen Nodes (rot: große Leistung, gelb: mittelgroße Leistung, grün: kleine Leistung, blau: keine Leistung (unbeladen)).
/LOL 18c/

Thermohydraulisch ist jede Node mit jeder benachbarten Node verbunden, allerdings ist die Querströmung begrenzt, solange die Kanisterwände noch intakt sind. Abb. 2.20 zeigt die Nodalisierung des Lagerbeckens von oben, und zwar auf Höhe der Brennelemente. Unter- und oberhalb dieser Nodes befinden sich noch zwei Wasservolumen, die nicht so detailliert nodalisiert sind, aber auch kaum Strukturen enthalten. Entlang der Ränder des Lagerbeckens sind Downcomer-Kanäle definiert, in denen auch die Wände des Lagerbeckens als ATHLET-Objekte berücksichtigt sind. Die Lagerbeckenwand wird mit 1 cm dicken Stahl und 1 m dicker Betonschicht simuliert. Die Außentemperatur der Wand ist als Randbedingung auf 20 °C gesetzt. Oberhalb des Wasserpools ist Luft mit atmosphärischem Druck definiert. Das Leck ist am Boden des Lagerbeckens definiert.

Tab. 2.3 Leistungsverteilung in den einzelnen Nodes

	Leistung (W) Konfiguration 1	Leistung (W) Konfiguration 2	Leistung (W) Konfiguration 3
1	186.230	146.572	146.572
2	304.800	146.572	146.572
3	135.710	146.572	0
4	177.240	146.572	146.572
5	297.270	146.572	146.572
6	287.160	146.572	0
7	192.140	146.572	146.572
8	0	0	0
9	63.790	146.572	146.572
10	64.640	146.572	146.572
11	0	146.572	0
12	0	0	146.572
13	0	0	146.572
14	0	0	0
15	0	0	146.572
16	0	0	146.572
17	0	0	0
18	155.790	146.572	146.572
19	79.280	146.572	0
20	76.260	146.572	146.572
21	0	0	146.572
22	186.600	146.572	0
23	90.250	146.572	146.572
24	47.990	146.572	146.572
Summe (W):	2.345.150	2.345.152	2.345.152

Abb. 2.21 zeigt die Entwicklung der maximalen Hüllrohrtemperatur bei den verschiedenen Anordnungen. Solange die Brennelemente vollständig mit Wasser bedeckt sind, ist ihre Kühlung ausreichend. Der Wasserspiegel erreicht die obere Kante der Brennelemente ungefähr 30.000 s nach Beginn des Leckstörfalls, unabhängig von der Anordnung. Die Aufheizung der oberen Bereiche ist am Anfang nicht stark, weil diese einerseits aufgrund des axialen Leistungsprofils weniger Nachzerfallsleistung haben und andererseits die darunter liegenden Strukturen noch mit Wasser gekühlt werden. Wenn

der Wasserspiegel weiter absinkt, steigen die Temperaturen und es sind erste Unterschiede in der Temperaturverteilung zu sehen. Diese stammen hauptsächlich von den Unterschieden im Strahlungsaustausch. Die schnellste Aufheizung ist in Node 16 bei Konfiguration 1 zu beobachten. Diese Node kann ihre Energie am wenigsten in Form von Wärmestrahlung an die Umgebung abgeben. 64.000 s nach Beginn des Störfalls erreicht der Wasserspiegel dann die untere Kante der Brennelemente. Zu diesem Zeitpunkt haben die Brennelemente in allen Rechnungen einen lokalen Maximalwert erreicht, der aber danach für kurze Zeit sinkt. Dieser Kühleffekt wird von einer sich ausbildenden natürlichen Zirkulation erzeugt und ist in Abb. 2.21 sehr schön zu sehen. Die Zirkulation entstand deswegen, weil durch das Absinken des Wasserspiegels neue Strömungspfade unterhalb der Brennelemente entstehen konnten. Diese natürliche Zirkulation ist jedoch nicht stark genug, um die Brennelemente im Lagerbecken langfristig auch zu kühlen, und die Temperaturen im Lagerbecken steigen nach einiger Zeit wieder an.

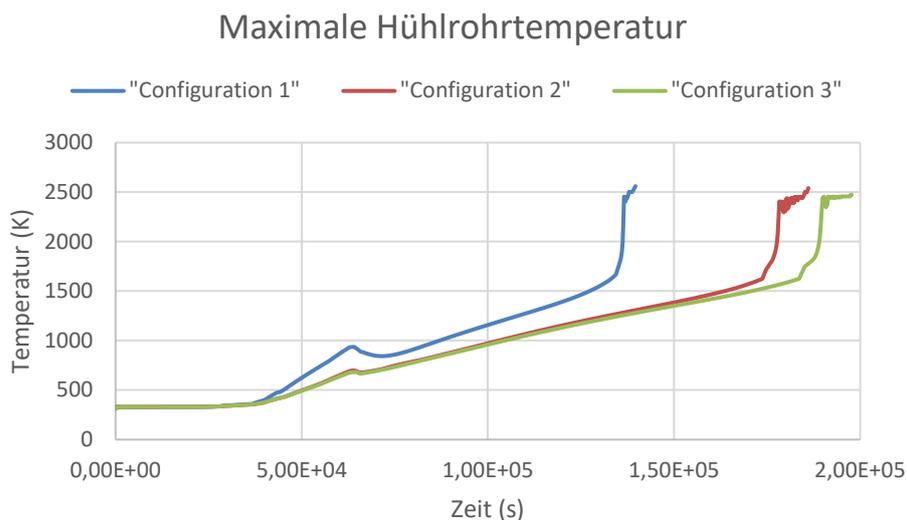


Abb. 2.21 Maximale Hüllrohrtemperatur bei den verschiedenen Anordnungen
/LOL 18c/

Die kontinuierliche Temperaturerhöhung der Brennelemente wird enorm beschleunigt, wenn sie die Zündtemperatur des Hüllrohrs für Oxidation erreichen (Oxidationsskalation). Der Zeitpunkt, zu dem diese Zündtemperatur erreicht wird, hängt stark von der Anordnung der Brennelemente im Lagerbecken ab.

Total Mass of Molten Material

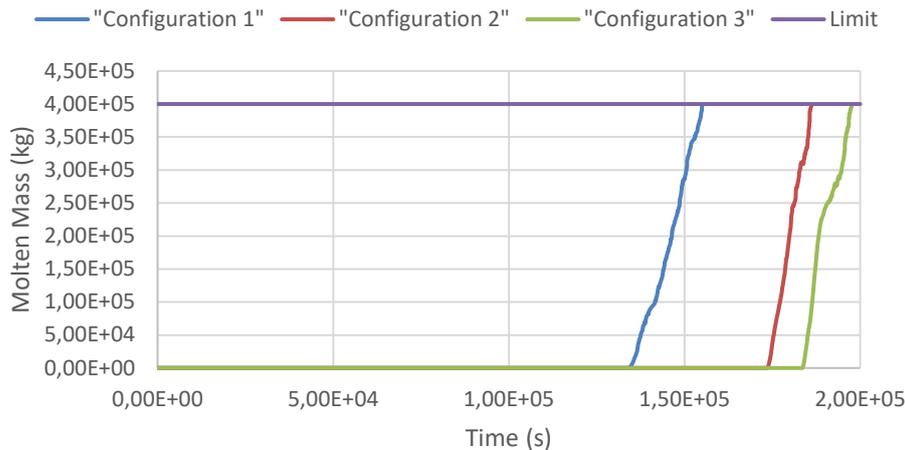


Abb. 2.22 Schmelzmassen bei den verschiedenen Konfigurationen /LOL 18c/

Abb. 2.22 zeigt die Entwicklung der Schmelzmassen im Lagerbecken bei den verschiedenen Anordnungen. Die Entwicklung der Schmelzmassen korreliert dabei erwartungsgemäß stark mit den Oxidationsprozessen. Kurz nach der Eskalation der Oxidation entsteht die erste Schmelze. Wie erwartet werden die Brennelemente bei Konfiguration 1 am frühesten zerstört, die ersten Schmelzmassen erscheinen dabei in Node 6, und zwar ungefähr bei $t = 135.000$ s. Bei dieser Anordnung hat Node 6 eine der größten Leistungen, außerdem haben alle seine Nachbarn auch eine relativ hohe Leistung. Daher kann Node 6 durch Strahlung nur sehr ineffektiv gekühlt werden, was dann zu einem frühzeitigen Versagen führt. Bei Konfiguration 2 haben alle beladenen Nodes die gleiche Leistung, allerdings hat Node 6 immer noch auf allen vier Seiten Nachbarn. Daher ist die Kühlung durch Strahlung wiederum sehr ineffektiv und die Node versagt als erste, allerdings erst ungefähr 40000 s später als bei Konfiguration 1. Bei Konfiguration 3 erscheint erwartungsgemäß die erste Schmelze am spätesten, ungefähr zum Zeitpunkt $t = 184.000$ s, und zwar in Node 16. Bei dieser Anordnung haben alle beladenen Nodes die gleiche Leistung, Node 16 hat aber die wenigsten kalten Nachbarn. Daher ist es auch plausibel, dass diese Node zuerst schmilzt. Node 9, die von der Konfiguration identisch mit Node 16 ist, schmilzt nur wenige Sekunden später.

Abb. 2.22 zeigt weiterhin, dass zwar bei Konfiguration 1 die Brennelemente am frühesten versagen, die Ausbreitung der Zerstörung bei der Anordnung aber am langsamsten voranschreitet. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei dieser Anordnung lokale Hot-Spots entstehen, die dann schnell zum Versagen führen, danach aber relativ viel Zeit vergeht, bis andere Nodes auch zum Schmelzen gebracht werden. Im Gegensatz dazu

werden bei den anderen Anordnungen die Nodes ungefähr gleichmäßig aufgeheizt und nach dem Schmelzen der ersten Node vergeht nur wenig Zeit, bis auch die anderen zu schmelzen beginnen. Die wichtigsten Ereignisse des Unfallablaufs sind in Tab. 2.4 zusammengefasst.

Tab. 2.4 Zusammenfassung der wichtigsten Ereignisse des Lagerbeckenunfalls bei den unterschiedlichen Anordnungen

	Konfiguration 1	Konfiguration 2	Konfiguration 3
Wasserspiegel an der Oberkante der Brennelemente	30.000 s	30.000 s	30.000 s
Wasserspiegel an der Unterkante der Brennelemente	64.000 s	64.000 s	64.000 s
Beginn der exzessiven Oxidation	135.000 s	175.000 s	185.000 s
Erste Schmelzmassen	135.000 s	175.000 s	185.000 s
Stelle des ersten zerstörten Nodes	6	6	16 / 9
50 % Schmelzmassenkriterium erreicht	156.000 s	186.000 s	198.000 s
Zeit zwischen erstem Nodeversagen und Rechnungsende	22.000 s	12.000 s	14.000 s

Die Simulationen zeigen, dass die Anordnung der Brennelemente im Lagerbecken einen großen Einfluss auf den Unfallablauf haben. Die gleichmäßige Verteilung der Leistung und der nicht beladenen Nodes im Lagerbecken können den Unfallablauf deutlich verzögern. Wenn die Brennelemente allerdings aufschmelzen, dann schmelzen die Brennelemente schneller bei gleichmäßig verteilter Leistung. Die Simulation liefert plausible Ergebnisse, was dafürspricht, dass die neu implementierten Modelle richtig sind. Eine so detaillierte Rechnung konnte mit der Ring-Nodalisation nicht durchgeführt werden, daher wurde auf eine Vergleichsrechnung verzichtet und nur die neue Modellierung auf Plausibilität geprüft.

Die Simulationen wurden auch mit der neu in ATHLET-CD eingebauten numerischen Lösungsmethode ATHLET-NuT /STE 17/ durchgeführt. Diese Lösungsmethode hat die Rechnung im Vergleich zur alten Lösungsmethode um 30 % beschleunigt. Die Laufzeit für die dargestellten Simulationen betrug ungefähr 2,5 Tage. Die Aufteilung des La-

gerbeckens in 24 Nodes mit entsprechend vielen thermohydraulischen Verbindungen ist somit recht rechenzeitintensiv. Diese detaillierte Auflösung wurde aber bewusst gewählt, um die Anwendbarkeit der neuen Nodalisierung und Modelle zu testen.

2.1.6 Zusammenfassung

Durch Implementierung der flexiblen Nodalisierung und durch die Ermöglichung der azimuthalen Aufteilung des Kerns wurde ATHLET-CD mit einer Option erweitert, die bei den meisten anderen Codes zur Simulation von Unfällen nicht oder nur sehr bedingt zur Verfügung steht. Die implementierten Änderungen und neuen Modelle wurden ausführlich getestet und verifiziert, die Rechnungen zeigen plausible Ergebnisse. Eine vollständige Validierung ist aber noch durchzuführen, am besten im Rahmen eines künftigen ATHLET-CD Validierungsvorhabens. Durch Benutzung der neu implementierten Option können Unfallszenarien untersucht werden, die bisher gar nicht oder nicht vollständig untersucht werden konnten.

Die neue azimuthale Aufteilung ermöglicht außerdem eine sinnvolle genauere Aufteilung der Gitterplatte in mehrere HECU-Objekte, deren Aufteilung der radialen und azimuthalen Aufteilung des Kerns entspricht. Die einzelnen HECU-Objekte können sich dann ggf. jeweils einzeln bis zum Schmelzen (und somit Versagen) aufheizen. Dadurch wird grundsätzlich eine realistischere Simulation des Versagens der unteren Kerngitterplatte ermöglicht.

Das implementierte Wärmestrahlungsmodell vernachlässigt die Absorption der Strahlung im Kühlmittel. Bei niedrigeren Temperaturen, wenn die Brennstäbe vollständig mit Wasser bedeckt sind, ist der Effekt auch vernachlässigbar. Bei Szenarien, bei denen hauptsächlich die Brennelemente von Luft umgeben sind, ist dieser Effekt ebenso vernachlässigbar. Bei Dampfatosphäre kann das Medium (abhängig von der Strahlungsweglänge) jedoch mehr als 10 % der Strahlung absorbieren. Für diese Phase wäre eine Berücksichtigung von Absorption daher ein möglicher Punkt für künftige Weiterentwicklungsarbeiten.

Die horizontale Schmelzeverlagerung ist bisher nur bei Ring-Nodalisierung anwendbar. Das neue Modell könnte in künftigen Vorhaben noch so erweitert werden, dass die Schmelze auch in radiale und azimuthale Richtung fließen kann.

2.2 Spaltproduktverhalten

Die Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Kern in den Kühlkreislauf wird in ATHLET-CD mit dem Modul FIPREM berechnet. Da sich hier im Laufe des Vorhabens keine wesentlichen Erkenntnisse für Modellverbesserungen durch neue Experimente ergeben haben, ist dieses Modul weitgehend unverändert geblieben. Entwicklungen auf internationaler Ebene wurden jedoch durchgehend beobachtet. So erfolgte beispielsweise auch eine Teilnahme am VERDON-Seminar.

Für Analysen von Unfallabläufen ist im weiteren Verlauf das Modul zur Simulation des Spaltprodukttransports von besonderer Bedeutung, da hier sowohl das chemische Verhalten als auch der eigentliche Transport der Spaltprodukte im Reaktorkühlkreislauf berechnet wird. In ATHLET-CD wurde in den vergangenen Jahren der Transport von Spaltprodukten und Aerosolen mithilfe des Moduls SOPHAEROS simuliert, welches vom IRSN entwickelt wurde. Bis zur letzten Programmfreigabe wurde dabei die Version von SOPHAEROS implementiert, die auch in ASTEC V1.3 /COU 06/ enthalten ist.

In entsprechend angepasster Form wurde im Vorgängervorhaben RS1505 das aus ASTEC 2.0 extrahierte SOPHAEROS-Modul in ATHLET-CD eingebaut /WEB 16/. In dieser Version sind zahlreiche Erweiterungen und Verbesserungen enthalten, die auch in vielen Fällen die Qualität von Simulationen mit ATHLET-CD in Bezug auf den Radionuklidtransport im Kühlkreislauf deutlich verbessern können, was gerade in gekoppelten Rechnungen mit COCOSYS eine große Rolle spielt. Der Funktionsumfang dieser SOPHAEROS-Version ist in /COU 09/ dokumentiert.

Die Implementierung des SOPHAEROS-Moduls wurde in diesem Vorhaben weiter auf die Anforderungen von ATHLET-CD hin optimiert. Nach der Implementierung des neuen Transportmoduls in eine Testversion von ATHLET-CD wurden im Rahmen des Vorhabens RS1546 zahlreiche Verbesserungen vorgenommen, bevor eine Übernahme in eine offizielle Version von ATHLET-CD erfolgen konnte. Das Modul wird daher unter dem Namen SAFT (Simulation of Aerosol and Fission Product Transport) weitergeführt.

Allgemeine Verbesserungen

Um einheitliche Strukturen zu haben, wurde das Datenbankmanagementsystem ODESSA/SIGAL, welches noch im originalen SOPHAEROS enthalten war, entfernt und durch dynamische FORTRAN-Modul-Strukturen ersetzt. Zur Verifikation der korrekten Umsetzung wurden Testrechnungen durchgeführt, die identische Ergebnisse lieferten.

Dank der neuen Implementierung von SOPHAEROS bzw. SAFT kann der Anwender lediglich durch Angabe der einzelnen ATHLET-Objekte die Transportpfade beschreiben und muss keine zusätzlichen Angaben für SAFT im Eingabedatensatz vornehmen. Die geometrischen Daten werden stattdessen automatisch von ATHLET übernommen. Daher wurden bisher keine Geometrie-spezifischen Informationen über das SAFT-Netzwerk in der graphischen Datei gespeichert, die ja durch ihre Analogie zu den ATHLET-Daten redundant wären. Leider kann jedoch das graphische Darstellungstool AIG (ATHLET Input Graphics) damit nicht umgehen, weswegen die *.gr-Ausgabedatei von ATHLET/CD erweitert werden musste, damit das modellierte SAFT-Netzwerk dargestellt werden kann. Hierzu wurde eine neue Routine *tgraph.f90* eingeführt. Änderungen wurden zudem auch in den Routinen *tatnod.f*, *tsonod.f*, *tsoph.f*, *tmodint.f* und *tmodreal.f* erforderlich. Alle notwendigen Daten sind jetzt somit in der *.gr-Datei in geeigneter Form enthalten (s. Abb. 2.23). Da nicht alle Parameter in SOPHAEROS ein Gegenstück in SAFT haben, wurden einige durch DUMMY-Parameter ersetzt.

Da die Darstellung des Fluidkreislaufs verstärkt auf ATHLET-Daten zurückgreift und das ATHLET-Netzwerk automatisch als Basis für das SAFT-Netzwerk genommen wird, konnte man in der ersten Implementierung von SAFT nur am Ende eines TFOs einen Austrittsort definieren. Dies ist für bestimmte Versuchsanlagen wie beispielsweise Phébus ausreichend, aber in einer Anlagenrechnung wird das Leck im Allgemeinen nicht immer am Ende eines TFOs definiert. Daher wurde der Aufbau des SAFT-Netzwerks so verbessert, dass ein Austrittsort jetzt an einer beliebigen Position innerhalb eines TFOs definiert werden kann. Dank dieser Verbesserung konnte auch eine mühsame Änderung von bereits existierenden Datensätze vermieden werden.

Mit dem Pseudo-Schlüsselwort SORPTION ist der Anwender in der Lage die vordefinierten Sorption-Parameter von Wandmaterialien (STANDARD, INCON600, STEEL304, CARSTEEL, und ZIRCALOY) zu ändern. Bis jetzt konnte man nur die Eigenschaften von höchstens einem Material ändern. Um diese Einschränkung aufzuhe-

ben, wurde das Modul erweitert. Des Weiteren wurde die Möglichkeit eingeführt, auch eigenes Material bezüglich der Sorptionsprozesse zu definieren.

Verbesserung der Separator-Modellierung

Um einen Separator zu simulieren, müssen die TFOs (s. Abb. 2.24) mit den entsprechenden Informationen unter dem Separator-Kontrollwort definiert werden. Im Gegensatz zu einem einfachen Pipe-Objekt mit einem Kontrollvolumen, das zwei Junctions hat, besteht das Pipe-Objekt, das als Separator vorgesehen ist (ICOMPO=3), aus einem Kontrollvolumen und drei Junctions. Die erste Junction ist für die Einströmung und die anderen zwei sind für die Ausströmungen vorgesehen. Die zwei Junctions sind notwendig, um Wasser und Dampf separiert zu behandeln. Eines ist die sogenannte „carry-under“ (Wasser) und die andere die „carry-over“ (Dampf) Junction.

Da das Modul SAFT sein Netzwerk automatisch analog zum ATHLET-Netzwerk aufbaut, wurden zunächst zwei Junctions zwischen zwei Kontrollvolumina generiert. Dies führte zu einer doppelten Definition des Massenstroms, was entsprechend korrigiert wurde. Als Lösung wurde eine Änderung innerhalb der Routine *tatnod.f* vorgenommen. Diese sorgt dafür, dass zwischen zwei Kontrollvolumina nur eine Junction definiert wird und zwar im Fall eines Separators die carry-over Junction (Dampf), was bezüglich des weiteren Transports von Spaltprodukten (möglicherweise ins Containment) wichtig ist.

```

@ NSOOBJ
  6
@
@   K  ASOPN      KATHOB  ATHNAM      SATHLA      SATHLE      IMODEL      NHEANA
   1  S01BUNDLE      2  BUNDLE      0.0000D+00  1.1820D+00      0           1
   2  S02PLENUM      3  PLENUM      0.0000D+00  3.4130D+00      0           1
   3  S03HOTPIP      4  HOTPIP      0.0000D+00  9.5600D+00      0           1
   4  S04STGEN       5  STGEN       0.0000D+00  8.3270D+00      0           1
   5  S05COLPIP      6  COLPIP      0.0000D+00  4.6620D+00      0           1
   6  S06OUTER      10  OUTER      0.0000D+00  1.1820D+00      0           1
@
@ NES
  23
@
@   K  SN
   1  Se
   2  Br
   3  Kr
   4  Rb
   5  Sr
   6  Zr
   7  Mo
   8  Ru
   9  Ag
  10  Sb
  11  Te
  12  I
  13  Xe
  14  Cs
  15  Ba
  16  U
  17  Pu
  18  Np
  19  Cd
  20  In
  21  Sn
  22  H
  23  O

```

Abb. 2.23 Beispiel für einen SAFT-Datenblocks in der *.gr-Datei

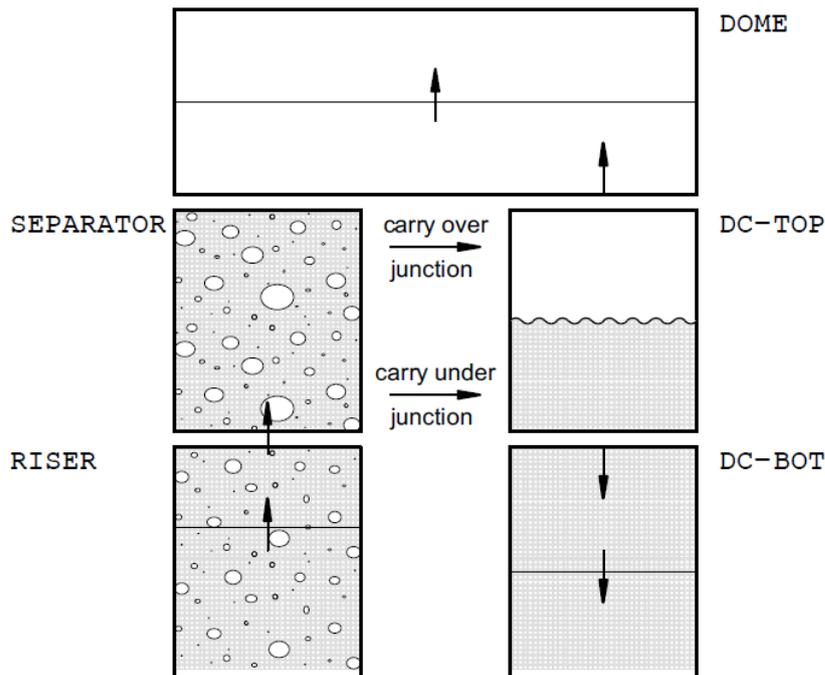


Abb. 2.24 TFOs in einem Separator-Model

Die Ausgabe und deren Steuerung

Die Steuerung der Ausgabe erfolgt über das vorher optionale, jetzt aber erforderliche Pseudo-Schlüsselwort "OUTFL". In der ersten Implementierung hingen einige Ausgabegrößen davon ab, ob man eine reduzierte oder eine umfangreiche Ausgabe verlangte. Von dieser Steuerung waren zwei Sets von Parametern betroffen: diejenigen, die durch **IPRM** (*SUS_VA(KG)*, *SUS_AE(KG)*, *LIQUID(KG)*, *DEP_AE(KG)*, *SOR_VA(KG)*, *CONDEN(KG)*,) gesteuert werden, und diejenigen, die durch **IPRAMR** (*SUS_AMR(-)*, *DEP_AMR(-)*) gesteuert werden. Bei beiden Parametern gibt es die Option entweder nur die Massen der beteiligten Elemente (=1) oder sowohl Element- als auch Verbindungsmassen (=2) ausgeben zu lassen. Falls man die reduzierte Ausgabe wählte, wurden die Elementmassen aus den Massen der Verbindungen (und falls vorhanden aus den elementaren Massen) berechnet. In der umfangreichen Ausgabe wurden für die Elemente nicht die aufsummierten Massen gespeichert, sondern ihre Speziesmassen. Dies konnte zu Verwirrungen führen, da unter dem gleichen Namen einmal die aufsummierte und einmal die reinen elementaren Daten auftauchten. Des Weiteren ist es wichtig sowohl Spezies- als auch aufsummierte Elementmassen auswerten zu können. Um dies zu beseitigen, wurden neue Ausgabeparameter mit der Erweiterung **_S** (z. B. *SUS_VA_S*) für alle oben genannte Parameter eingeführt. Die ursprünglichen Parameter sind immer aufsummierte Elementmassen, während die mit **_S** bezeichne-

ten Parameter auf die Speziesmassen hinweisen. Dank dieser Änderung reduzieren die Parameter IPRM, IPRAMR nur die Ausgabemenge (Element/Verbindung), führen aber nicht zu Informationsverlust, wie es vorher der Fall war.

Da besonders in Anlagenrechnungen zahlreiche Verbindungen entstehen können sowie mit der neuen Implementierung von SOPHAEROS / SAFT auch mehrere Loops und Verzweigungen definiert werden können, kann die Größe der Ausgabe sehr schnell sehr umfangreich und damit unübersichtlich bzw. unhandlich werden. Um die zusammenfassenden Daten (SDATA) im Detail erhalten zu können und gleichzeitig die Ausgabe reduzieren zu können, wurde eine neue Art der Ausgabesteuerung eingeführt. Anstatt unter dem Pseudo-Schlüsselwort für alle im Rahmen von SAFT definierte Objekte den gleichen Ausgabeumfang zu definieren, erlaubt die neue Steuerung eine strangweise Definition.

Für jeden Loop muss man ein Output-Flag (OUTFL) bei der objekt-spezifischen Eingabe definieren. Dieses Flag kann für alle Loops unterschiedlich sein, aber das gleiche Flag kann auch für mehrere Loops verwendet werden. Was ein Flag bedeutet, wird unter dem Pseudo-Schlüsselwort PW OUTFL definiert. Das erste Flag muss immer SDATA heißen (IPOID) und wird auch automatisch als Steuerung für die zusammenfassende Ausgabe des gesamten für SAFT definierten Kühlkreislaufs genommen. Alle weiteren Flags können beliebig heißen. Die Parameter IPRMEC und IPRTHY steuern Ausgaben, die nur für den ganzen Kreislauf interpretierbar sind, deswegen sind sie nicht Teil des Flags, sondern werden nur einmal definiert.

Ein Beispiel für eine solche Eingabe lautet:

```

---- OUTFL
@ IPOID   IPRM   IPRAMR  IPRRET
  SDATA   2     2       1
  SHORT   1     1       1
  NO      0     0       0
@ IPRMEC  IPRTHY
  1       1
K--- LOOP1
@ OUTFL
  SHORT
@ ATHNAM  SAOUT  ASORNA
  PIPE    -1.0   STEEL304
  ..      ..     ..

```

Alle notwendigen Informationen für eine Restartrechnung sind in einer entsprechenden Datei gespeichert. In der ursprünglichen Implementierung fehlten einige Parameter,

was dazu führte, dass das Programm nicht für die gesamte Simulation die Werte einiger Ergebnisse lieferte, sondern nur für den Restartteil. Dies wurde korrigiert. Des Weiteren gab es ein Fehler in der Aufrufroutine des Restarts. Dadurch wurden die Initialisierungen ohne die vorher gespeicherte Werte durchgeführt. Durch die Anpassung der Routinen werden jetzt die notwendigen Informationen richtig behandelt.

Wasserstoff/Sauerstoff-Bilanzfehler bei Rechnungen mit Kern

In den Simulationen, die für den Validierungsprozess durchgeführt wurden, wurde ein Bilanzfehler in der Wasser- und Sauerstoffberechnung festgestellt. Dieses Problem entstand jedoch nur bei Rechnungen mit der neuerdings möglichen Berücksichtigung des Kerns in SAFT. Bei Simulationen, bei denen SAFT erst im oberen Plenum, also nach dem Kern, startete, ergaben sich solche Probleme hingegen nicht. Das Problem bestand darin, dass die ausgeströmten Wasser- und Sauerstoffmengen größer als denen eingeströmten Mengen waren. Weitere Untersuchungen zeigten, dass in der SOHAEROS-Ausgabe (die Originalausgabe von SOPHAEROS ist weiterhin durch den Eingabeparameter IOPSOA verfügbar) bei mehreren Elementen Bilanzfehlern zu beobachten sind. Diese Probleme konnten darauf zurückgeführt werden, wie SAFT mit den Einspeisungen umgeht.

Bei Rechnungen mit Kern werden alle Spaltprodukte in das/die korrespondierende(n) SAFT-Volumen eingespeist. Deswegen wird bei jedem ROD einzeln der Einspeiseort definiert, wo sich bereits das Versagen des Hüllrohrs befindet. Dies wird zu jedem Zeitschritt neu berechnet. Daher mussten bei der Aufsummierung der einzelnen eingespeisten Elemente nicht nur die bereits als Einspeiseort definierten Kontrollvolumina mitgerechnet werden, sondern auch alle anderen Kontrollvolumina, die schon zu einem früheren Zeitpunkt als Einspeiseort verwendet wurden. Da die aufsummierten Einspeisungen in der Originalausgabe von SOPHAEROS nicht richtig notiert wurden, kam es in der Massenbilanz zunächst zu einem Fehler. Dies wurde in SAFT korrigiert.

Der Wasserstoff-/Sauerstoffbilanzfehler kann auch zum Teil auf Definitionen zurückgeführt werden. Alle Spaltprodukteinspeiseorte wurden auch als Orte für Trägergaseinspeisung definiert. Dies kann zu Doppeldefinition des Trägergasmassenstroms führen. Um dies zu vermeiden, werden die thermohydraulischen Einspeisungen von ATHLET übernommen, unabhängig davon, ob Kernversagen geschieht oder nicht. Diese Änderung führte zu einer erheblichen Verbesserung der Simulation, aber es gibt immer noch Fälle, bei denen die Bilanz nicht ganz richtig berechnet wird. Deswegen wird in der ak-

tuellen Version von ATHLET-CD dringend empfohlen bei SAFT den Kern außer Acht zu lassen und die SAFT-Pfade erst ab dem oberen Plenum zu definieren.

Die verbesserte Version von SAFT fand im Rahmen der Validierung bereits Verwendung in Beiträgen zu den Konferenzen NENE2017 /TIB 17/ und NENE2018 /TIB 18/.

2.3 Weiterentwicklung des Modells der Luftoxidation

Für die Simulation des Unfallhergangs bei einem Kühlmittelverlust im Brennelement-Lagerbecken oder der späten Phase eines LOCA-Szenarios mit Lufteinbruch nach dem RDB-Versagen ist eine realistische Abbildung der Prozesse während der Luftoxidation und der Re-Oxidation der gebildeten Nitridschicht erforderlich. Wie die Simulation der Experimente QUENCH-10, -16 und -18 gezeigt hat, liefert die derzeit in ATHLET-CD implementierte Modellierung der hierbei ablaufenden verschiedenen Prozesse eine gute Übereinstimmung für die Reaktion mit dem Sauerstoff. Die nach dem Verbrauch des Sauerstoffs einsetzende Stickstoff-Reaktion mit der hierbei gebildeten Nitridschicht und die bei Vorhandensein von Dampf anschließende Re-oxidation von Nitrid, die zu einer erheblichen Porosität der Oxidationsschicht und damit zu einer verstärkten Reaktion beim Quenchvorgang führt, konnte bisher mit ATHLET-CD nur teilweise abgebildet werden, wie die Nachrechnungen von QUENCH-16 und -18 erkennen lassen /HOL 13/, /HOL 18/.

Anhand der derzeit in Arbeit befindlichen theoretischen und experimentellen Arbeiten vor allem zur Rolle von Stickstoff bei Lufteinbruch wurden beim 23. Internationalen QUENCH-Workshop neue Ergebnisse für die Reaktion mit dem Hüllrohrmaterial Zirkaloy veröffentlicht /JÄC 17/, /PAR 17/. Die hier für verschiedene Bedingungen gezeigten Reaktionsraten für die Nitridbildung aus Einzeleffekt-Tests des KIT wurden mit den in ATHLET-CD derzeit modellierten Raten /HOL 16/ verglichen. In ATHLET-CD stehen zwei Reaktionsraten für die Bedingungen „ohne Voroxidation“ bzw. „mit Voroxidation“ zur Verfügung, wobei bisher für die Simulationen die Rate „ohne Voroxidation“ mit einem Reduktionsfaktor von 0.15 benutzt wurde. In /JÄC 17/ sind für die Nitridbildung drei bei verschiedenen Bedingungen erhaltene Reaktionsraten dargestellt. Diese im Temperaturbereich zwischen 900 und 1.200 °C gewonnenen Raten decken einen weiten Bereich von 10^{-7} bis 10^{-2} kg/(m²sⁿ) ab, wobei zwischen parabolischer und linearer Rate (JAC1: n=0.5 bzw JAC2, JAC3: n=1) und zusätzlich bei den linearen Raten zwischen langsamer (JAC3) und schneller Nitrierung (JAC2) unterschieden wird

(Abb. 2.25). Die Gegenüberstellung zeigt, dass die Punkte der Rate JAC2 gut mit der in ATHLET-CD verwendeten Rate übereinstimmt.

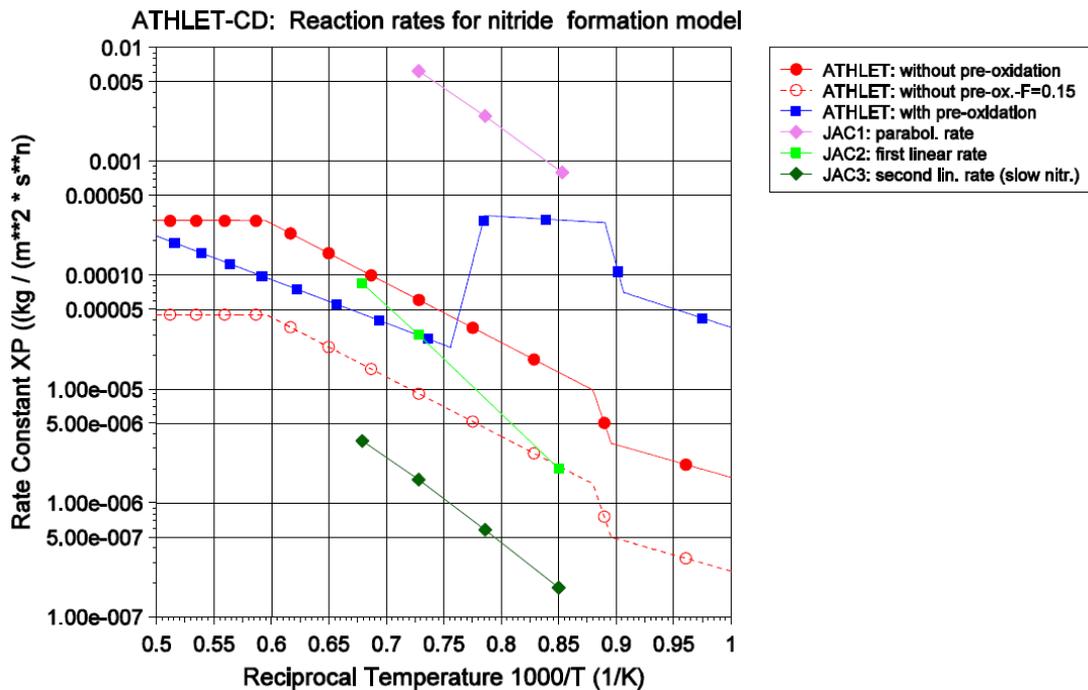


Abb. 2.25 Zr-Reaktion mit Stickstoff: Vergleich der Reaktionsraten aus /JÄC17/ mit den in ATHLET-CD programmierten Raten

Für die Übernahme dieses auf neuen Experimenten beruhenden Ansatzes in das Luftoxidationsmodell von ATHLET-CD fehlt jedoch derzeit eine Abgrenzung der für verschiedene Bedingungen stark unterschiedlichen Raten. Darüber hinaus erfordert ein für ATHLET-CD geeignetes Modell bei Verwendung mehrerer Raten im Übergangsbereich zwischen den physikalischen Randbedingungen kontinuierliche Verbindungen zwischen den einzelnen Kurven, um Zeitschrittreduktionen zu vermeiden. Es ist deshalb abzuwarten, bis weitere theoretische Grundlagen hierfür vorliegen. Eine Erweiterung des Modells zu den Nitridbildungsraten und eine Ergänzung hinsichtlich der Reoxidation erscheint erst dann sinnvoll, wenn die theoretischen Lücken geschlossen sind.

2.4 Erweiterung einzelner Modelle für Siedewasserreaktor-Komponenten

Um mit ATHLET-CD realistischere Simulationen von Unfällen in Siedewasserreaktoren durchführen zu können, wurden einzelne Modelle für Siedewasserreaktor-Modelle erweitert. Es wurde dabei überprüft, ob Modellierungen bzgl. B_4C -Oxidation und Luftoxi-

ation, die bereits für Druckwasserreaktoren bestanden, auf Siedewasserreaktoren übertragen werden können. Ein weiterer Punkt war, ob die bestehende Modellierung des Quenchfrontmodells für Strukturen in Siedewasserreaktoren ausreichend ist oder ob an dieser Stelle Erweiterungsbedarf bei den Modellen besteht.

2.4.1 Modellierung der Borkarbid-Oxidation für Absorber-Elemente von Siedewasserreaktoren

Bei Versuchsnachrechnungen zur Simulation der Schmelzeverlagerung von SWR-Komponenten lieferten die Modelle von ATHLET-CD plausible Ergebnisse gegenüber den Versuchsdaten /AUS 10/. Die in den durchgeführten Simulationen noch bestehenden Abweichungen wurden auf die noch fehlende Anwendung des B4C-Oxidationsmodells auf das SWR-Absorbermaterial zurückgeführt /HOF 13/. Wie bereits bei der Auswertung von CORA-Versuchen festgestellt wurde /SEP 09/, bewirkt der höhere Energiegewinn der Borkarbid/Wasserdampf-Reaktion, der in einer SWR-Anordnung (z. B. Versuch CORA-17) gegeben ist, eindeutig höhere Bündeltemperaturen und somit eine erhöhte Reaktionsrate des verbleibenden metallischen Zry gegenüber der alleinigen Zirkon-Dampf-Reaktion bei DWR-typischen Bedingungen (z. B. CORA-12, -13). Weiterhin trägt die Oxidation von Borkarbid zur Erzeugung von Wasserstoff bei, so dass von Anwenderseite der Wunsch geäußert wurde, den Einfluss der B4C-Reaktion im SWR berücksichtigen zu können.

Um bei Simulationen, wie z. B. der Nachrechnung des Unfalls von Fukushima, den Einfluss der Oxidation des hier verwendeten Absorbermaterials Borkarbid simulieren zu können, ist es erforderlich, das bereits vorhandene und für DWR-Absorber getestete Modell der B4C-Oxidation für die in SWR-Anlagen verwendete B4C-Absorberstab-anordnung zu erweitern. Hierbei ist zu prüfen, ob es ausreichend ist, die bereits bestehende Modellierung beim DWR auch für SWR-Anlagen zu übernehmen (rein programmtechnische Erweiterung) oder ob die spezielle Anordnung der Absorberstäbe innerhalb des Absorberblatts auch die Kinetik der Reaktion beeinflusst und somit eine Sonderbehandlung erfordert.

2.4.1.1 Modellierung der Borkarbid-Reaktionen in ATHLET-CD für Druckwasserreaktoren

In diesem Abschnitt sollen zunächst die bisher schon für Druckwasserreaktoren implementierten Modelle für die Borkarbid-Reaktionen beschrieben werden. Bereits bei

relativ niedrigen Temperaturen ab ca. 800 °C reagiert das Absorbermaterial Borkarbid (B_4C) mit dem umgebenden Hüllrohrmaterial Stahl (SS). Bei ca. 1.200 °C (1.500 K) startet ein Verflüssigungsprozess, der zum Stillstand kommt, sobald die Löslichkeitsgrenze von B_4C in der Borkarbid–Stahl-Mischung erreicht ist. Die Lösung von B_4C und Stahl ist eine eutektische Reaktion und führt zur Bildung eines Gemisches mit erniedrigter Schmelztemperatur ($T_{\text{melt } B_4C/SS} = 1.480 \text{ K}$) im Vergleich mit dem Schmelzpunkt der Einzelmaterialien ($T_{\text{melt } SS} = 1.693 \text{ K}$, $T_{\text{melt } B_4C} = 2.623 \text{ K}$). Diese eutektische Reaktion bestimmt den Startzeitpunkt der anschließenden Oxidation des Absorbermaterials B_4C , das z. B. in französischen und russischen DWR-Anlagen zum Einsatz kommt. Die beiden Abläufe sind in ATHLET-CD modelliert und können für B_4C -Absorberstäbe berücksichtigt werden. Im Folgenden wird die bisherige Modellierung kurz zusammengefasst; eine ausführliche Beschreibung ist in /BAL 03/, /BAL 04/ und /DRA 07/ gegeben.

Eutektische Wechselwirkung von Borkarbid mit Edelstahl

Ähnlich wie das Zr- und B_4C -Oxidationsmodell beruht das B_4C -Interaktionsmodell auf einem Arrhenius-Ansatz, mit dem die Reaktionsrate bestimmt wird. Basierend auf verschiedenen experimentellen Untersuchungen wurden unterschiedliche Raten ermittelt. Die für B_4C -Pellets und -Pulver ermittelten Raten zeigen einen Sprung bei 1.480 K, der durch die Verflüssigung der Einzelphasen verursacht ist. Für die Modellierung in ATHLET-CD wurden daher verschiedene Raten für den Temperaturbereich unter und über der Sprungstelle durch eine Interpolation miteinander verbunden. Der hierbei entstehende Verlauf in der Reaktionskinetik ist für die einzelnen Optionen aus Abb. 2.26 zu ersehen.

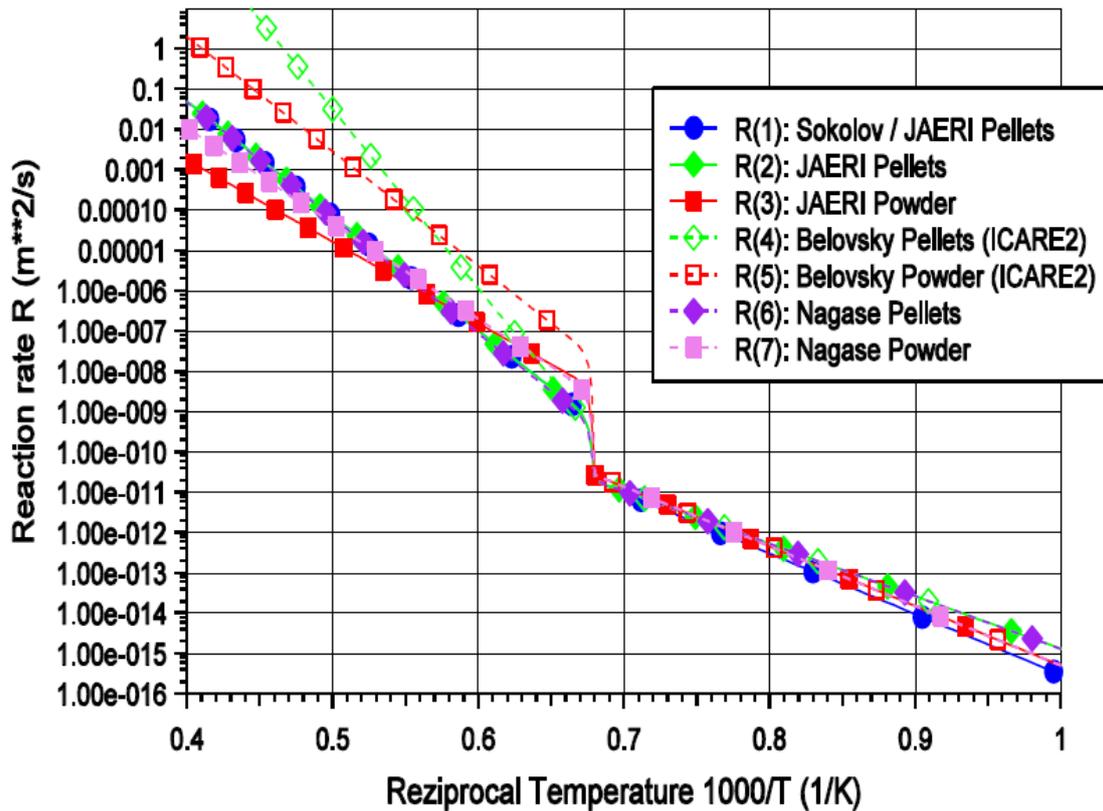
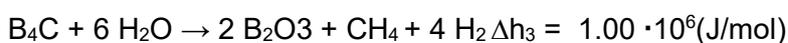
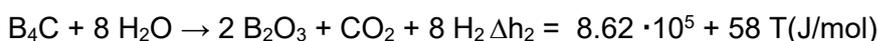
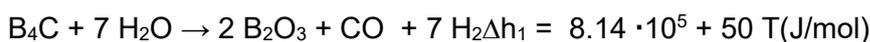


Abb. 2.26 Reaktionsraten der eutektischen Wechselwirkung von B₄C mit Stahl

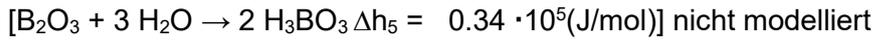
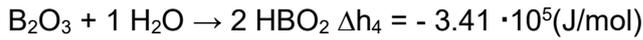
Sobald durch die Wechselwirkung des Borkarbid mit dem umgebenden Stahl, die zur Lösung der beiden Materialien führt, an einer axialen Position des Steuerstabes die gesamte Materialdicke des Hüllrohres (SS) verflüssigt ist, wird in ATHLET-CD die Oxidationsreaktion von B₄C gestartet, da erst dann der Dampf in Kontakt zu dem Absorbiermaterial treten kann.

Modellierung der Borkarbid-Oxidation für Steuerstäbe

Der komplexe chemische Prozess der B₄C-Oxidation wird in zwei nacheinander ablaufenden Reaktionsschritten modelliert. Zuerst reagiert B₄C mit Wasserdampf und es werden flüssiges Boroxid (B₂O₃), Wasserstoff, Kohlenmonoxid, Kohlendioxid und Methan produziert:



Im zweiten Schritt reagiert das Boroxid mit Wasserdampf und gasförmige Borsäuren (HBO₂, H₃BO₃) werden gebildet.



Die Reaktionsraten werden ähnlich dem Zirkon-Oxidationsmodell als Funktion der Temperatur mit einem erweiterten Arrhenius-Ansatz berechnet:

$$R_{1,2} = A \cdot \exp(-B/(\mathcal{R}T)) + C$$

Für die Berechnung der Reaktionsraten beider Oxidationsschritte stehen für die erste Stufe (R1) neun (Option ICRB4C, s. Abb. 2.27) bzw. für die zweite (R2) zwei Optionen (Option ICRB2O3, s. Abb. 2.28) zur Verfügung.

Option ICRB4C	Correlation	Temperature (K)	A (mol/m ² s)	B (J/mol)	C (mol/m ² s)
1	mod. Steinbrück		6,81 · 10 ³	188,7 · 10 ³	0,0
2	Liljenzin		3,29 · 10 ³	181,0 · 10 ³	0,0
3	Sato		1,03 · 10 ²	154,0 · 10 ³	0,0
4	Litz		5,3 · 10 ⁻⁹ · p (p in Pa)	46,0 · 10 ³	0,0
5	Steinbrück		6,81 · 10 ³	188,7 · 10 ³	1,08 · 10 ⁻³
6	VERDI data		1,143 · 10 ³	150,3 · 10 ³	0,0
7	VERDI / BOX data	< 1800 > 1800	1,143 · 10 ³ 14,71 · 10 ⁵	150,3 · 10 ³ 258,6 · 10 ³	0,0 0,0
8	IRSN	< 1400 > 1400	4,33 · 10 ⁻⁶ · p _{H2O} · p ^{-0,25} 2,35 · p _{H2O} · p ^{-0,25}	25,0 · 10 ³ 177,5 · 10 ³	0,0 0,0
9	Drath	< 1600 1600 - 1700 > 1700	6,00 · 10 ³ 23,8 · 10 ¹² 16,0 · 10 ⁵	194,5 · 10 ³ 488,5 · 10 ³ 255,0 · 10 ³	0,0 0,0 0,0

Abb. 2.27 Korrelationen zur Berechnung der Reaktionsraten der B₄C-Oxidation (erster Schritt)

Option ICRB2O3	Correlation	Temperature (K)	A (mol/m ² s)	B (J/mol)	C (mol/m ² s)
1	BOX data		14,71 · 10 ⁵	258,6 · 10 ³	0,0
2	TG / BOX data		124,6 · 10 ⁵	265,0 · 10 ³	0,0

Abb. 2.28 Korrelationen zur Berechnung der Reaktionsraten der B₄C-Oxidation (zweiter Schritt)

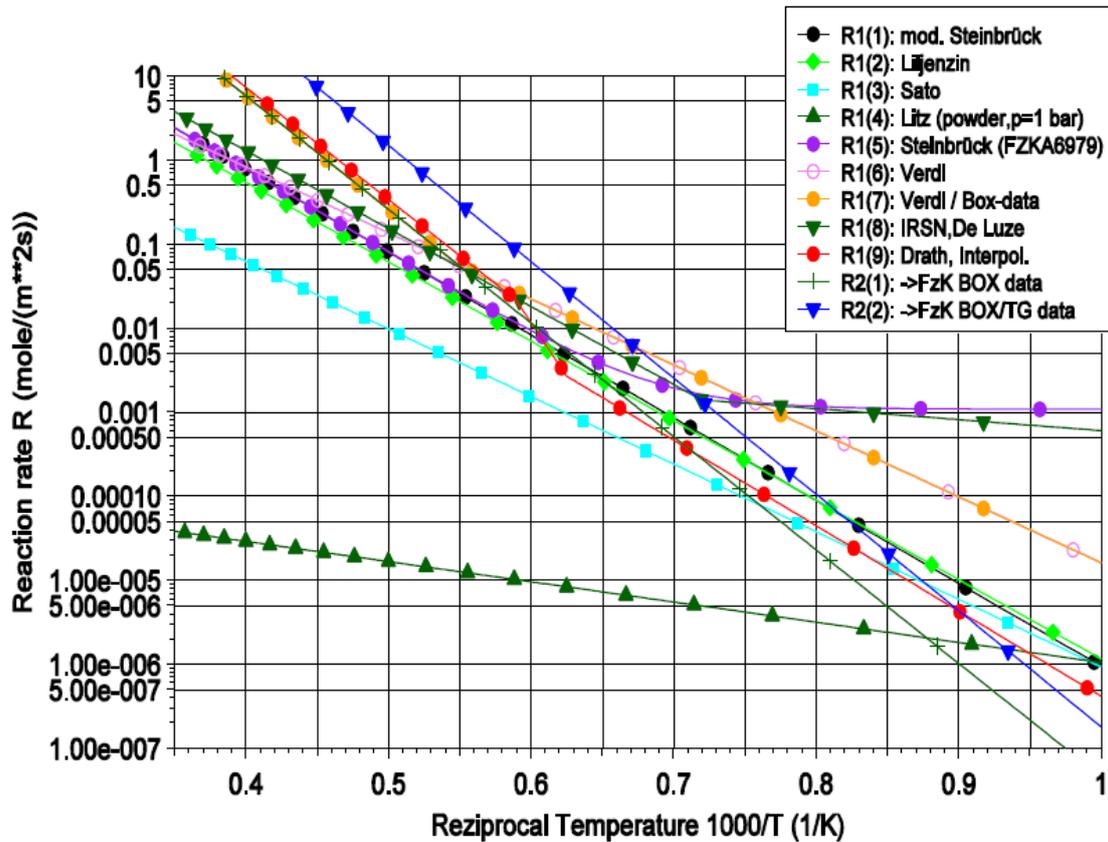


Abb. 2.29 Reaktionsraten der B₄C-Oxidation (R1) und der Folgereaktion von B₂O₃ (R2)

Die sich daraus ergebenden Reaktionsraten sind in Abb. 2.29 als Funktion der reziproken Temperatur dargestellt.

Unter Zugrundelegung einer linearen Kinetik wird für beide Oxidationsschritte die verbrauchte B₄C- bzw. B₂O₃-Masse berechnet. Dabei werden die aktuell vorhandene Dampfmenge und die Porosität des Borkarbid (Eingabewert) berücksichtigt. Die Aufteilung der Gesamtreaktionsrate auf die bei der Bildung von Boroxid beteiligten drei Hauptreaktionen wird durch die Eingabe des molaren Anteils von CO, CO₂ bzw. CH₄ vorgegeben, deren integral gebildete Massenanteile aus einzelnen Experimenten bekannt sind. Da die Experimente darauf hindeuten, dass bei der Produktion von Borsäuren die Bildung von Metaborsäure HBO₂ überwiegt, wird hier nur diese Reaktion modelliert. Mit diesen Annahmen werden die gebildeten Massen von CO, CO₂, CH₄ und HBO₂ berechnet. Die Menge des hierbei produzierten Wasserstoffs und des verbrauchten Wasserdampfs wird entsprechend den chemischen Reaktionsgleichungen verfolgt und diese Information mit den hiervon betroffenen Modellen der Thermo-Fluidynamik aus-

getauscht. Der insgesamt gebildeten Gasmengen und der oxidierte B_4C -Anteil werden summiert und können mit experimentellen Befunden verglichen werden.

Die bei der Oxidation pro Zeitschritt umgesetzten Energien (exotherme Reaktionen bei der Bildung von Boroxid, endotherme Reaktion bei der Bildung von Meta-Borsäure HBO_2) werden jeweils aus der im Zeitschritt erzeugten Masse für beide Reaktionsschritte einzeln ausgerechnet und addiert. Der somit bei der Borkarbid-Oxidation insgesamt erzeugte Energieaustausch wird ebenso wie die bei der Zirkon-Oxidation erzeugte Reaktionswärme als Wärmequelle bzw. -senke berücksichtigt.

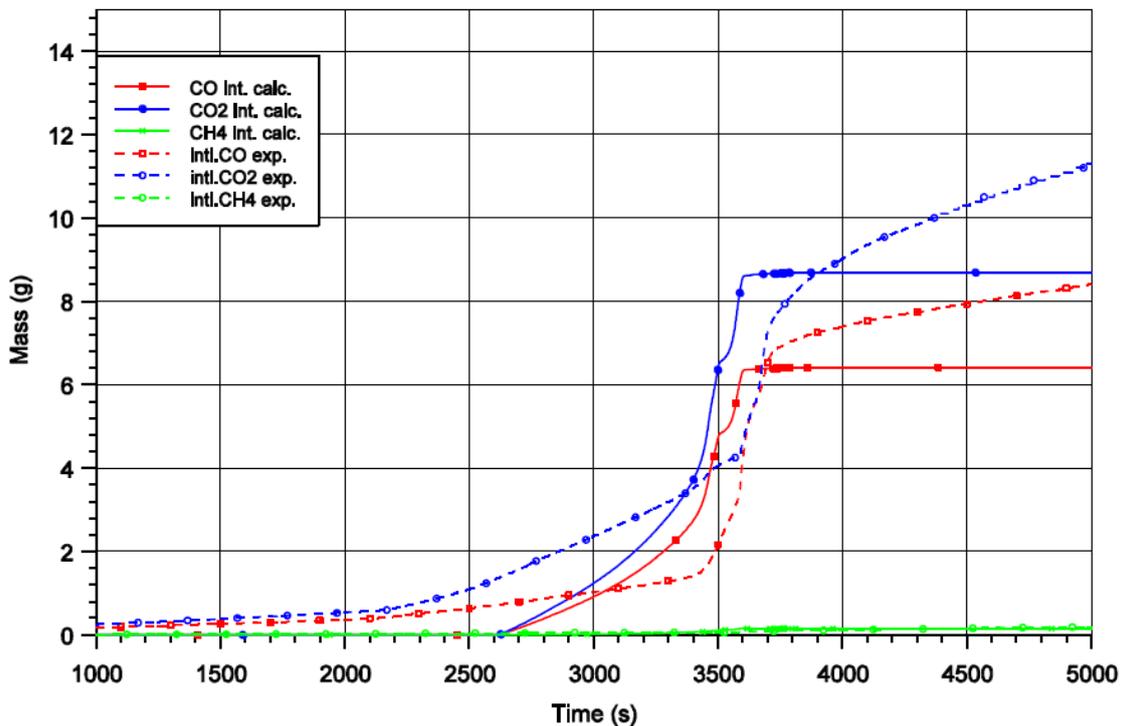


Abb. 2.30 Integral erzeugte Massen von CO , CO_2 und CH_4 für Experiment QUENCH-07

Verifikation für Druckwasserreaktoren

Anhand der Nachrechnungen von CORA-W2, QUENCH-07, QUENCH-09, sowie PHEBUS FPT-3 wurde das Modell qualitativ und quantitativ überprüft. Die Menge des oxidierten Borkarbid und die Freisetzung von CO , CO_2 und CH_4 stimmt bei Verwendung der empfohlenen Optionen $ICRB4C=7$ oder 9 und $ICRB2O3=2$ gut mit den in den Experimenten vorliegenden Befunden überein. In Abb. 2.30 ist als Beispiel hierfür die im Versuch QUENCH-07 gemessene Gesamtmenge von erzeugtem CO , CO_2 und CH_4 der berechneten Masse gegenübergestellt. Hierbei wird in der Simulation ein Anteil von 31,5 % des ursprünglich vorhandenen Borkarbid oxidiert, wobei ein Wasserstoff-Anteil

von 7,9 g, entsprechend einem Anteil von 6 % gegenüber der berechneten H₂-Gesamtmenge von 134 g aus der Oxidation des Steuerstabes stammt.

2.4.1.2 Modellierung der Borkarbid-Reaktionen in ATHLET-CD für Siedewasserreaktoren

Bisher wurden die Borkarbid-Reaktionen lediglich bei Druckwasserreaktoren berücksichtigt, bei Siedewasserreaktoren jedoch nicht. Ziel der in diesem Arbeitspunkt geleisteten Arbeiten war es, die entsprechende Modellierung in den Druckwasser-Modellen nach Möglichkeit auch auf Siedewasserreaktoren zu übertragen.

Bei der Modellierung der SWR-Komponenten „Kanisterwand“ und „Absorberblatt“ in ATHLET-CD wurde in der ersten abgeschlossenen Version zwar die Oxidation der aus Zirkon bestehenden Kanisterwände berücksichtigt, sowie auch das Versagen und Abschmelzen der beiden Strukturen, jedoch nicht die Oxidation der im Absorberblatt vorhandenen Borkarbid-Stäbe /TRA 09/. Bei der externen Validierung der SWR-Programmteile von ATHLET-CD mit Hilfe der durchgeführten Nachrechnungen der Versuche CORA-17 und CORA-28 wurden die noch bestehenden Abweichungen in der integralen Wasserstoffherzeugung auf die fehlende Anwendung des B₄C-Oxidationsmodells für das SWR-Absorbermaterial zurückgeführt /HOF 13/. Auch die Experimentatoren der CORA-SWR-Versuche hatten festgestellt, dass der höhere Energiegewinn der Borkarbid/Wasserdampf-Reaktion, der in einer SWR-Anordnung (z. B. Versuch CORA-17) gegeben ist, eindeutig höhere Bündeltemperaturen und somit eine erhöhte Reaktionsrate des verbleibenden metallischen Zry gegenüber der alleinigen Zirkon-Dampf-Reaktion bei DWR-typischen Bedingungen bewirkt /SEP 08/. Da jedoch hierbei keine Messung der bei der Oxidation von B₄C freigesetzten Gase CO, CO₂ und CH₄ erfolgte, kann die aus dem Temperaturvergleich verschiedener Versuche resultierende Interpretation der Experimentatoren nicht eindeutig quantifiziert werden. Im Hinblick auf Simulationen, wie z. B. die Nachrechnung des Unfalls von Fukushima wurde es als erforderlich betrachtet, den Einfluss der Oxidation des hier verwendeten Absorbermaterials Borkarbid berücksichtigen zu können. Hierzu ist es notwendig, das bereits vorhandene und für DWR-Absorber getestete Modell der B₄C-Oxidation (s. Kapitel 2.4.1.1) für die in SWR-Anlagen verwendete B₄C-Absorberstabanordnung zu erweitern und zu koppeln.

Eine im Vorfeld durchgeführte Literatur-Recherche zeigte, dass die im DWR-Modell von ATHLET-CD berücksichtigten Daten und Korrelationen einen aktuellen Stand auf-

weisen und derzeit keine speziell für SWR-Anlagen abgeleitete Modellierung existiert. Einen Überblick über den derzeitigen aktuellen Stand zu Experimenten und zur Modellbildung für die Simulation der Borkarbid-Reaktionen zeigen vor allem die Quellen /ZHE 14/, /STE 14/ und /HAS 10/.

Unterschiede der Geometrie

In den einzeln angeordneten Kontrollstäben einer DWR-Anlage ist das Borkarbid in Pellet- bzw. Pulverform von einem Absorber-Hüllrohr aus Edelstahl (SS) umgeben und außerdem von einem Führungsrohr aus Stahl bzw. Zircaloy umhüllt. Dagegen befindet sich das kreuzförmige Absorberblatt im SWR zwischen den Brennelementkästen und enthält in jedem der 4 Schenkel des Stahlblattes 19 Stäbe mit Borkarbid-Pulver (Abb. 2.31). Die U-förmig gebogenen Edelstahlbleche, die die Borstäbe seitlich halten, besitzen regelmäßig angeordnete Bohrungen, durch die das Kühlmittel eintreten und die Stäbe kühlen kann. Die Borstäbe haben Hüllrohre aus Edelstahl; in jedem Stab sind im Abstand von 500 mm Stahlkugeln verschweißt, auf die das Hüllrohr aufgedrückt wird. Damit wird die Borkarbidssäule in einzelne Abschnitte unterteilt, damit im Falle eines Lecks maximal der Inhalt eines Abschnittes aus dem Stab ausgewaschen werden kann.

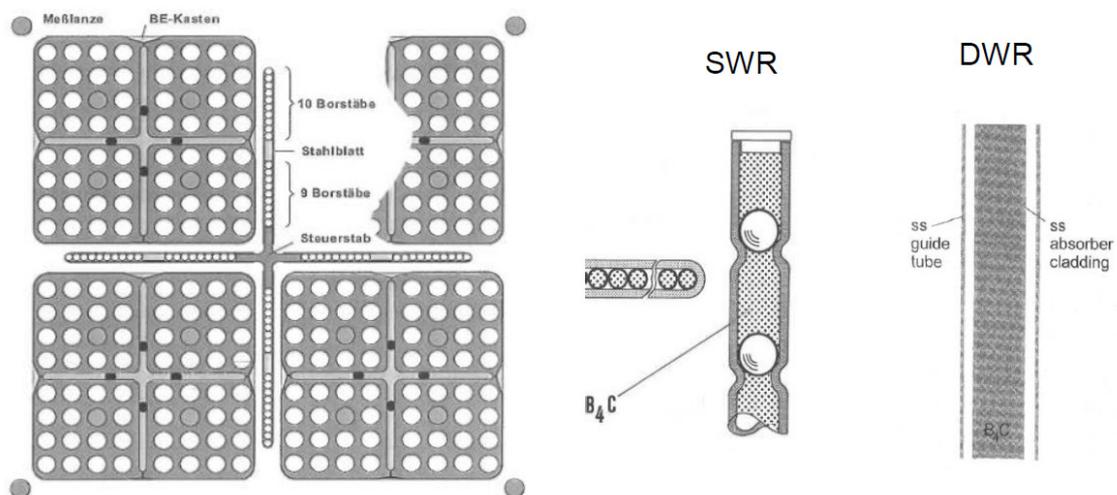


Abb. 2.31 Geometrie des Absorberblattes im SWR bzw. des Steuerstabes im DWR

Übernahme der vorhandenen Korrelationen mit Berücksichtigung der abweichenden Geometrie

Aufgrund von fehlenden neueren Versuchsdaten für die Weiterentwicklung des vorhandenen DWR-B₄C-Modells wurden die vorhandenen Korrelationen und Gleichungen

an den SWR-Programmteil von ATHLET-CD gekoppelt. Hierbei musste insbesondere die unterschiedliche Geometrie im Hinblick auf die für die Reaktion zur Verfügung stehende Masse und Oberfläche berücksichtigt werden. Aus den Eingabedaten im Abschnitt „CRODBWR“ ist mit der Größe ABMB4C die zur Verfügung stehende B₄C-Masse pro Länge für einen Arm des Absorberblattes gegeben; mit den Größen ABSBRE und ABSTHI sind auch die Breite sowie die Dicke eines Arms des Absorberblattes definiert.

Im bestehenden Modell wird die oxidierte Dicke über Volumen und Masse eines kreisförmigen Stabes mit dem Durchmesser CDB4C bilanziert. Aus der längenbezogenen Masse ABMB4C (kg/m) des vorhandenen Borkarbid wird daher ein äquivalenter Durchmesser berechnet, der die Massenbilanz erfüllt:

$$CDB4C = 2 * \text{SQRT}(ABMB4C / (\rho_{B4C} \pi))$$

wobei die Dichte von B₄C mit 1.700 kg/m³ angenommen wird (Dichtefaktor 0,67 für B₄C-Pulver berücksichtigt).

Um die von der Oberfläche abhängige Reaktion richtig zu berücksichtigen, wird der bereits in den Eingabedaten des B₄C-Oxidationsmodells aufgrund der Porosität vorhandene Flächenfaktor FAREA mit einem weiteren Faktor multipliziert, der sich aus dem Quotienten der Absorberblattbreite und dem Umfang des äquivalenten Stabes ergibt:

$$FAREA = FAREA(\text{standard}) * 2 * ABSBRE / (CDB4C * \pi),$$

(Standard-Eingabewert für FAREA = 2.0).

Hierbei wird angenommen, dass 2 Breitseiten des Absorberblattes (Vorder- und Rückseite) als Reaktionsfläche für den Dampf zur Verfügung stehen.

Durchgeführte Programmänderungen

Als Eingabedaten werden im Anschluss an die bisherigen Daten unter PW CRODBWR die Daten aus PW CRB4COXID des DWR-Modells benötigt, die die zu verwendende Korrelation (Reaktionsstufen R1 und R2, s. Kapitel 2.4.1.1), die Aufteilung zwischen den 3 möglichen Reaktionen der ersten Stufe zur Bildung von CO, CO₂ und CH₄ (z. B. aus Messdaten für QUENCH-07) sowie die Porosität des verwendeten B₄C-Materials definieren (Standard: FAREA = 2, FDENS = 0.67).

Anders als im Fall der B₄C-Oxidation beim DWR, bei der die Oxidation durch die eutektische Reaktion der B₄C-SS-Lösung gestartet wird, beginnt die Borkarbid-Oxidation für den SWR sobald im bisherigen Modell an der heißesten axialen Position ein erstes

Versagen des Absorberblattes angezeigt wird ($KZRAB > 2$), da erst dann ein Dampfzutritt zu dem Absorbermaterial angenommen werden kann. Die Anwendung der B_4C -SS-Lösung als Startkriterium für die Oxidation könnte hier zu einem Konflikt mit dem bisher angewendeten Versagensmodell führen.

Sobald das Oxidationsmodell gestartet ist, werden alle axialen Positionen durchlaufen, an denen das Versagensmodell noch kein bereits erfolgtes Abschmelzen anzeigt ($KZRAB \leq 2$). Bei den Größen, die im Austausch mit dem Thermofluid-Modell stehen (Input: ausreichend Dampf vorhanden? Output: Dampfverbrauch, Wasserstoffherzeugung, Wärmeabfuhr) muss unterschieden werden, ob sich das Absorberblatt innerhalb eines Kernrings oder zwischen zwei Kernringen befindet. (FAABI, FAABK). Hierzu wurden innerhalb der Steuerroutine des Oxidationsmodells (ecrb4c) Unterscheidungen getroffen, die nur für den Aufruf aus dem SWR-Modell notwendig sind und für DWR-Kontrollstäbe übersprungen werden.

Die Oxidationsreaktion endet, wenn für alle Positionen ein Versagen gemeldet wird bzw. wenn die gesamte B_4C -Masse oxidiert ist.

Tab. 2.5 listet die Routinen und Module auf, für die zum Anschluss des Borkarbid-Oxidationsmodells an die SWR-Komponenten Änderungen durchgeführt wurden.

Tab. 2.5 Liste der geänderten Routinen und Module

Routine (fort)	Änderung
eheat1	Zusätzliche Daten für B ₄ C-Oxidationsmodell einlesen (PW CRODBWR); äquivalenten Durchmesser und Oberflächenfaktor berechnen;
ehbwr	Belegung von IKZRAB als Steuergröße für den Beginn der Oxidation, Addition der Wasserstofferzeugung und der erzeugten Wärme (Kanister + Absorber)
ebabkr	Aufruf von ecrb4c (Steueroutine für B ₄ C-Oxidation),
ecrb4c	Unterscheidung SWR – DWR für Belegung des Fluidzellenindex (ICELLB - ICELL) (→ Dampfverbrauch)
eb2o3ev	Unterer Grenzwert der vorliegenden B ₂ O ₃ -Oxidschichtdicke für Auswertung der Reaktion R2 reduziert (1.D-10 → 1.D-12)
ecopri	Print zusätzlicher Größen für SWR-Modell BWRSTRUC: QOXABS: erzeugte Wärme durch Absorber-Oxidation in W/m, ABOXL: Dicke der insges. durch Oxidation verbrauchten B ₄ C-Dicke in m Print zusätzlicher Größen für COREIDATA: ACH2ABS: durch B ₄ C-Oxidation im Absorber erzeugte H ₂ -Masse in kg CRACCO,-CO ₂ ,-CH ₄ : in Reaktion R1 erzeugte CO/CO ₂ /CH ₄ -Masse in kg CRACHBO ₂ : in Reaktion R1 erzeugte Masse von HBO ₂ in kg SUMB4COX: Summe der insgesamt oxidierten B ₄ C-Masse in kg FB4COX: Anteil des oxidierten B ₄ C gegenüber der Ausgangsmasse
ecopy	Speicherung von SUMB4COX (integral oxidierte B ₄ C-Masse in kg), Speicherung von ACH2ABS (integral aus Absorber-Oxidation erzeugte H ₂ -Masse in kg),
erest	Ausgabe der Steuergröße IKZRAB für deckungsgleichen Restart
Modul (mod)	Ergänzung
emodb4c	CDB4C (äquival. Durchmesser in m), TOTMB4C (Gesamtmasse von B ₄ C im Absorber in kg)
emodincl	ACH2ABS (integrale H ₂ -Masse aus Absorber-Oxidation in kg)
emodraaxr	QOXABS (im ax. Abschnitt erzeugte Wärme aus Absorber-Oxid. in W/m); (QOXABS+QOXCAN=QOXBWR - Absorber + Kanister-Ox.)

2.4.1.3 Testrechnungen

SWR-Versuche der CORA-Anlage

Um den Anschluss des Borkarbid-Oxidationsmodells an die SWR-Modellierung zu überprüfen, wurden die CORA-Versuche CORA-17, -28 und -33 herangezogen, wobei jedoch kein quantitativer Vergleich von eindeutig der B_4C -Oxidation zugeordneten Messdaten möglich ist, da bei den in den Jahren 1989 (CORA-17) und 1992 (-28, -33) durchgeführten CORA-Experimenten keine Messung der Gase CO , CO_2 und CH_4 erfolgte. Es kann daher nur beurteilt werden, ob die Ergebnisse in Hinblick auf die Rechnung ohne bzw. mit Berücksichtigung der B_4C -Oxidation in sich schlüssig und logisch erklärbar sind.

In Tab. 2.6a und Tab. 2.6b sind die wesentlichen Ergebnisse der Testrechnungen hinsichtlich der B_4C -Oxidation für die SWR-CORA-Versuche 17, 28 und 33 gelistet. Es bedeuten:

Tab. 2.6a Bedeutung der ATHLET-CD Variablen

CRACCO	Summe von erzeugten CO
CRACCO2	Summe von erzeugten CO_2
CRACH4	Summe von erzeugten CH_4
SUMB4COX	insgesamt oxidierte B_4C -Masse
FB4COX	Anteil des oxidierten B_4C zur ursprünglich vorhandenen Gesamtmasse
ACCH2ABS	integral aus der Absorber-Oxidation erzeugten H_2 -Masse
BWACH2	integral aus Absorber- und Kanister-Oxidation erzeugte H_2 -Masse
BWACH2	integral im Kern erzeugte H_2 -Masse (mit Rod-Oxidation, incl. Schmelze)

Tab. 2.6b Wesentliche Ergebnisse der ATHLET-CD Simulationen zu den CORA-Versuchen 17, 28 und 33 (die Massen in g angegeben)

Test	CRAC CO	CRAC CO ₂	CRAC CH ₄	SUM B ₄ COX	FB4 COX	ACCH 2ABS	BWA CH ₂	ACC H ₂
CORA-17	3,0	4,0	0,07	11,1	4,3 %	3,0	40,0	56,0
CORA-28	2,7	3,6	0,06	10,1	4,0 %	2,7	15,7	29,1
CORA-33	7,9	5,4	0,085	22,6	8,7 %	6,0	16,6	27,6

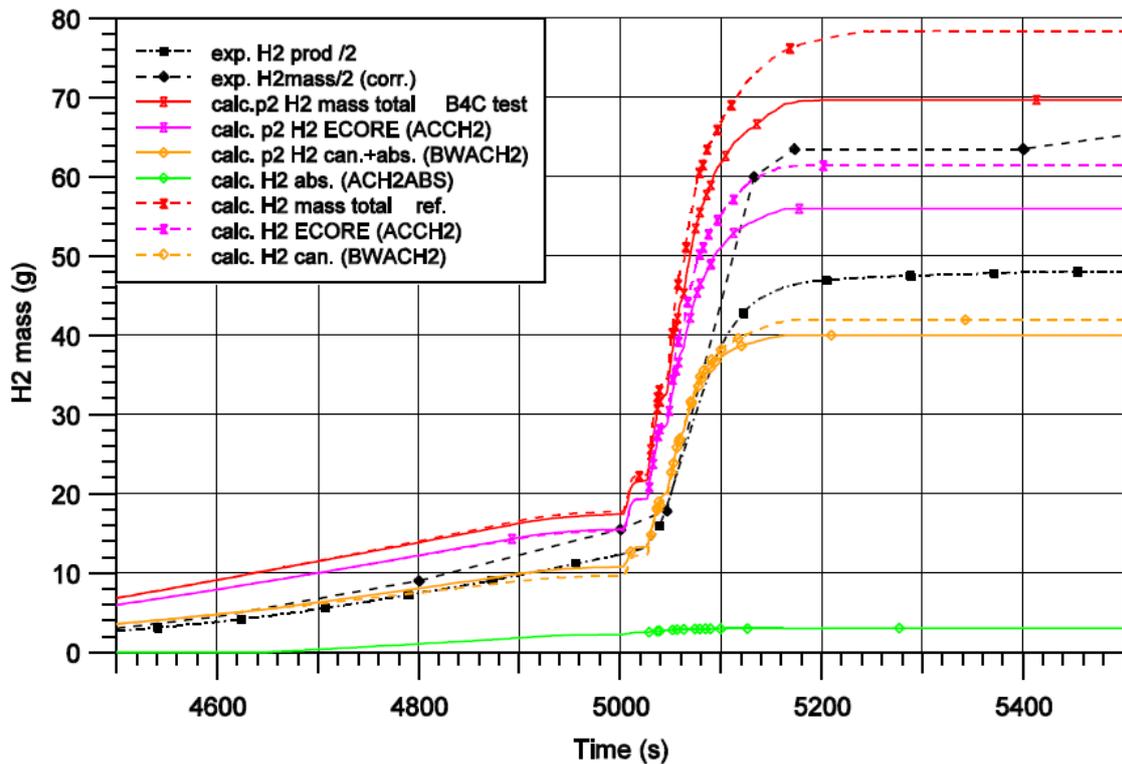


Abb. 2.32 Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-17 (ohne bzw. mit B₄C-Oxidation)

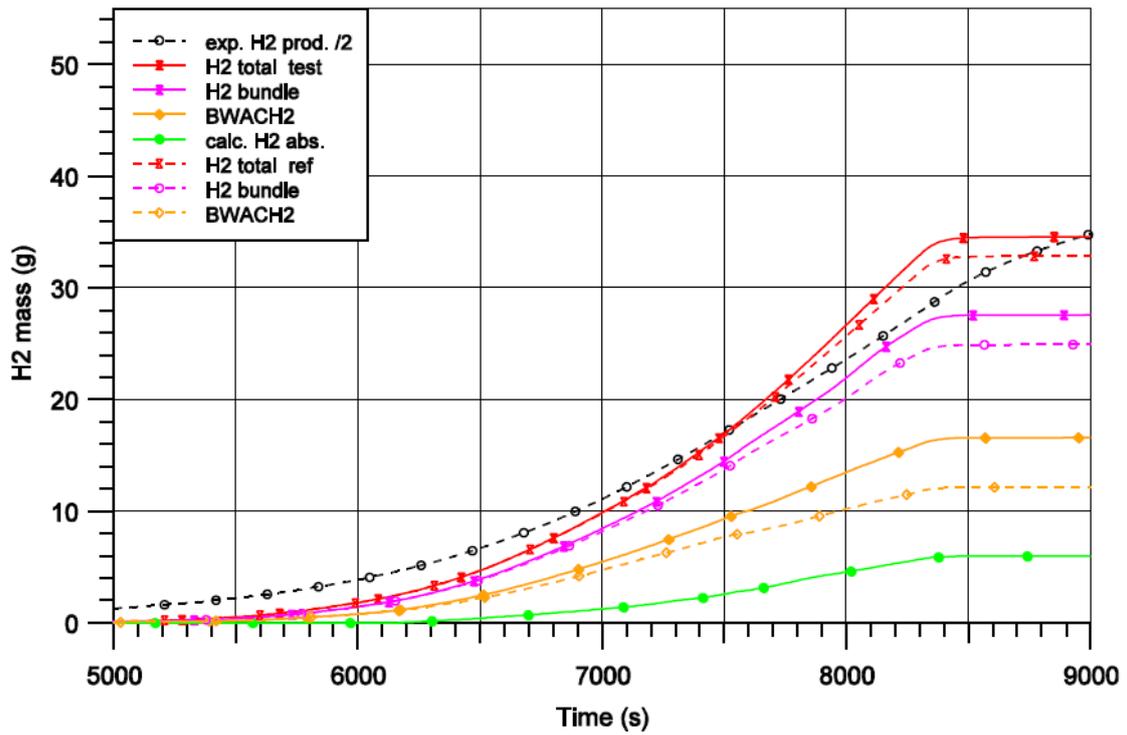


Abb. 2.33 Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-33 (ohne bzw. mit B_4C -Oxidation)

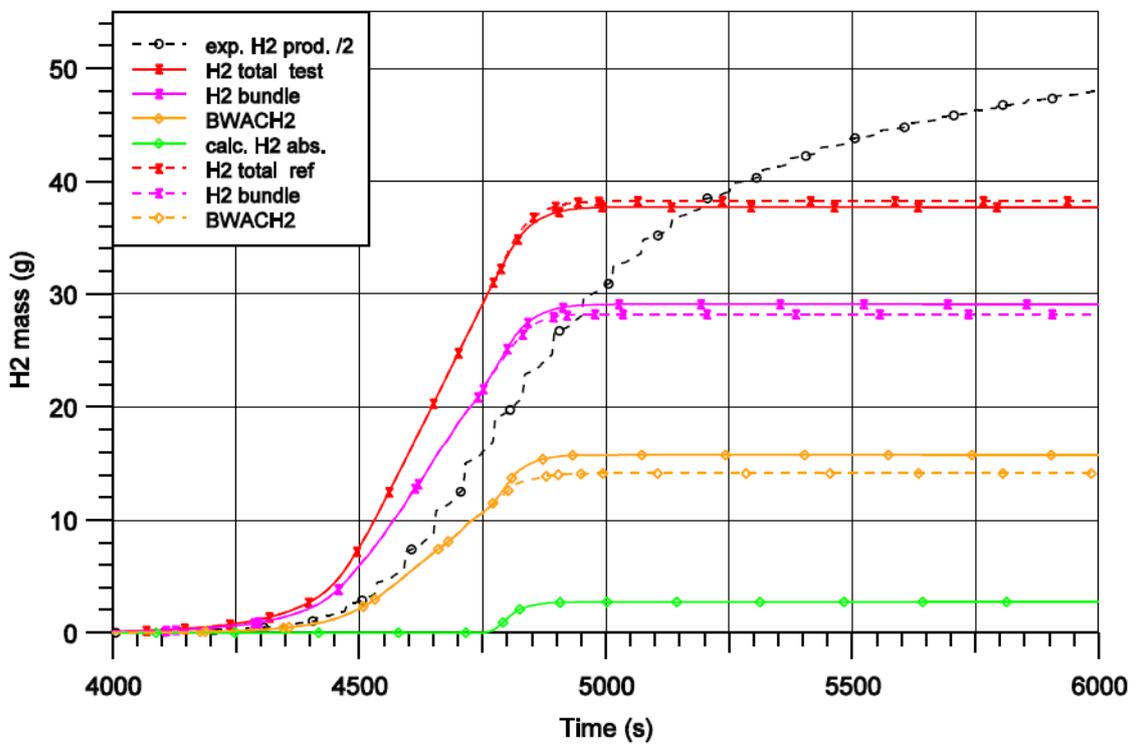


Abb. 2.34 Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-28 (ohne bzw. mit B_4C -Oxidation)

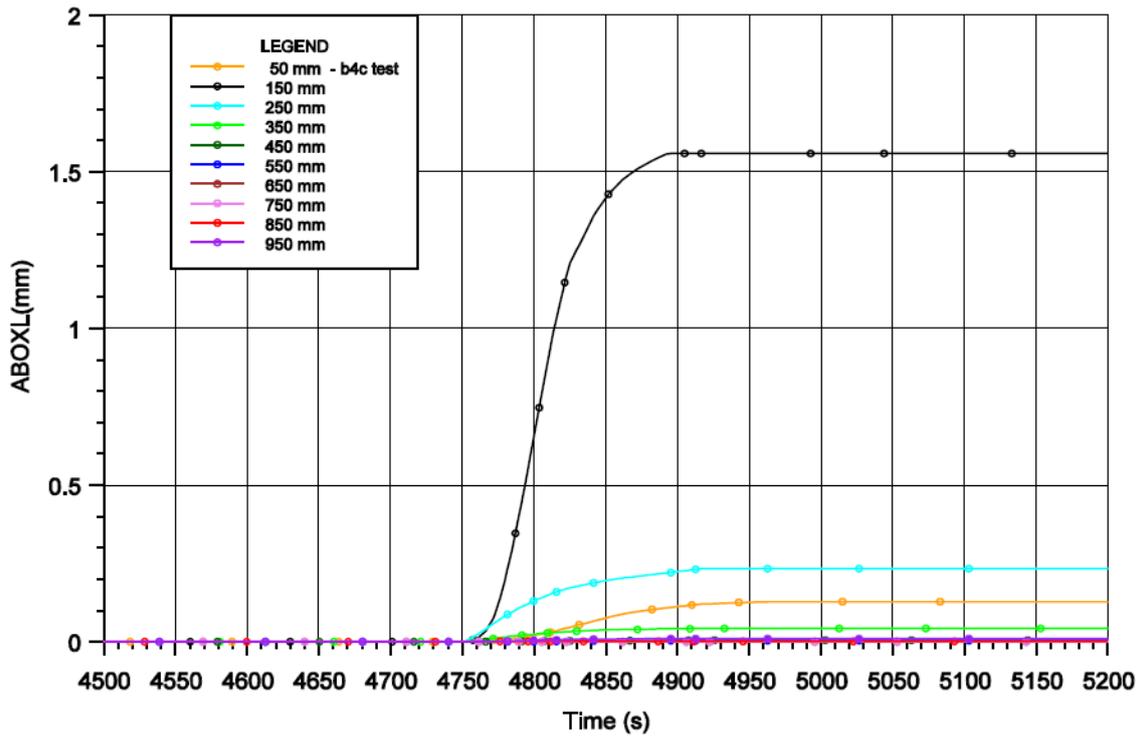


Abb. 2.35 Schichtdicke des durch Oxidation verbrauchten B₄C

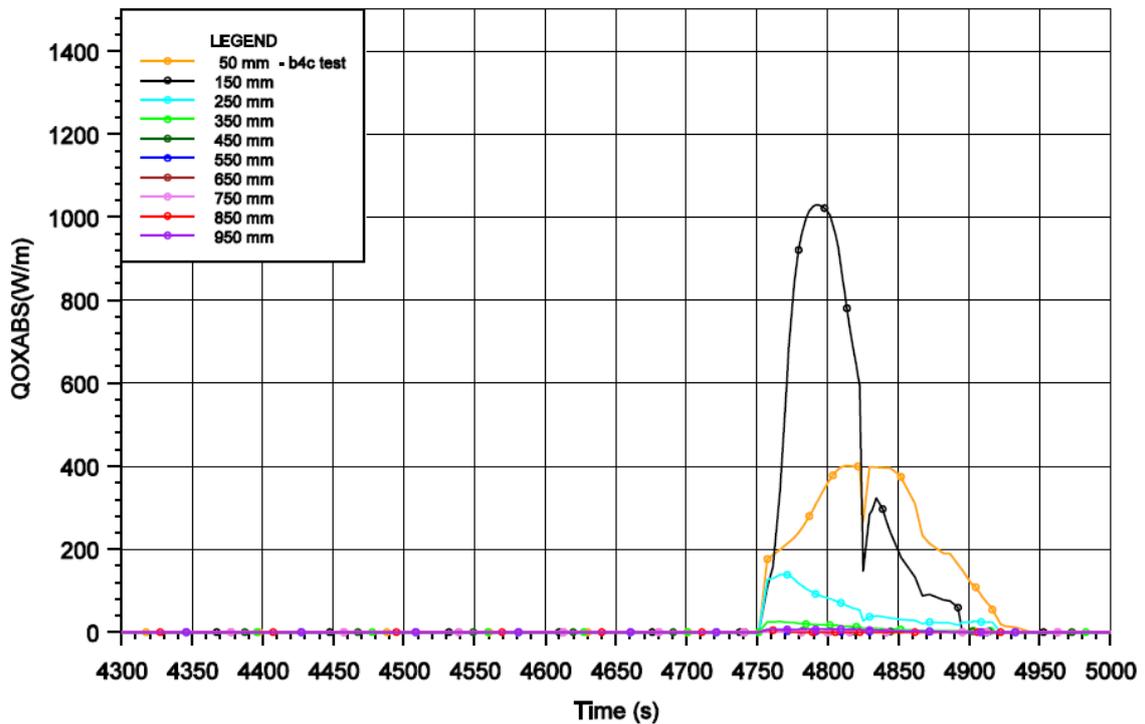


Abb. 2.36 Oxidationswärme QOXABS (Absorberblatt)

Aus Tab. 2.6 geht hervor, dass für alle drei Versuche trotz eines nur relativ geringen Anteils des oxidierten Borkarbidis von < 10 % der Wasserstoff-Beitrag des Absorbers zur Gesamterzeugung (aus ECORE, ohne Shroud) zum Teil nicht zu vernachlässigen

ist (CORA-33: 22 %). Dies erklärt sich aus der in Kapitel 2.4.1.1 beschriebenen chemischen Reaktion, bei der aus einem Mol Borkarbid 7 Mol (CO) bzw. 8 Mol (CO₂) Wasserstoff gebildet werden, wogegen bei der Zirkon-Wasserdampf-Reaktion aus einem Mol Zr 2 Mol H₂ entstehen. Wie Abb. 2.32 bis Abb. 2.34 für diese drei Experimente zeigen, hat sich im Vergleich zur Simulation ohne Berücksichtigung der B₄C-Oxidation (in den Abbildungen mit „ref“ gekennzeichnet) die gesamte Wasserstoffproduktion hierdurch jedoch kaum erhöht bzw. sogar reduziert. Die Suche nach der Ursache hierfür wird im Folgenden für den Versuch CORA-28 erklärt, da hier bei Dampfkühlung geringere Oszillationen auftreten als im wassergekühlten Versuch CORA-17.

In Abb. 2.35 ist für die Simulation von CORA-28 die von dem Masse-äquivalenten Absorberstab durch Oxidation verbrauchte B₄C-Schichtdicke für einzelne axiale Positionen des Absorberblatts aufgetragen. Die hierbei entstehende Oxidationswärme ist aus Abb. 2.36 zu ersehen. Die beiden Darstellungen lassen erkennen, dass die Oxidation nur am unteren Ende des Absorberblattes eine Rolle spielt, da nach dem Startsignal mit dem Auftreten des ersten Absorber-Versagens zum Zeitpunkt 4.752 s mehrere Positionen innerhalb eines kurzen Zeitintervalls ebenfalls als abgeschmolzen gekennzeichnet sind und daher für die Oxidation nicht mehr betrachtet werden bzw. aufgrund der Reduktion bei Dampfemangel nur noch minimale Beiträge liefern. Nur an der Position 150 mm zeigt sich ein stärkerer Anstieg. In Abb. 2.37 ist die Auswirkung der Absorber-Oxidation auf den Dampfgehalt der Strömung aufgetragen. Daraus ist zu sehen, dass durch den zusätzlichen Dampfverbrauch der Absorber-Oxidation an der betrachteten Position 150 mm ein stärkerer Dampfemangel vorliegt als in der Vergleichsrechnung („ref“), bei der der Dampf nur durch die Oxidation der Kanisterwand sowie der Heizstäbe und des Shroud verbraucht wird. Da der reduzierte Dampfgehalt der Strömung bei Unterschreitung eines bestimmten Partialdruckes (RDIFOX<1) eine niedrigere Reaktionsrate auch für die Oxidation der Zirkon-beschichteten Materialien bewirkt, erklärt der Vergleich der Oxidationsenergien in Abb. 2.38 bis Abb. 2.40 (stark reduzierte Oxidation von Kanisterwand und Shroud in 150 mm Höhe) die in Abb. 2.34 gezeigte Auswirkung auf die Wasserstoffherzeugung.

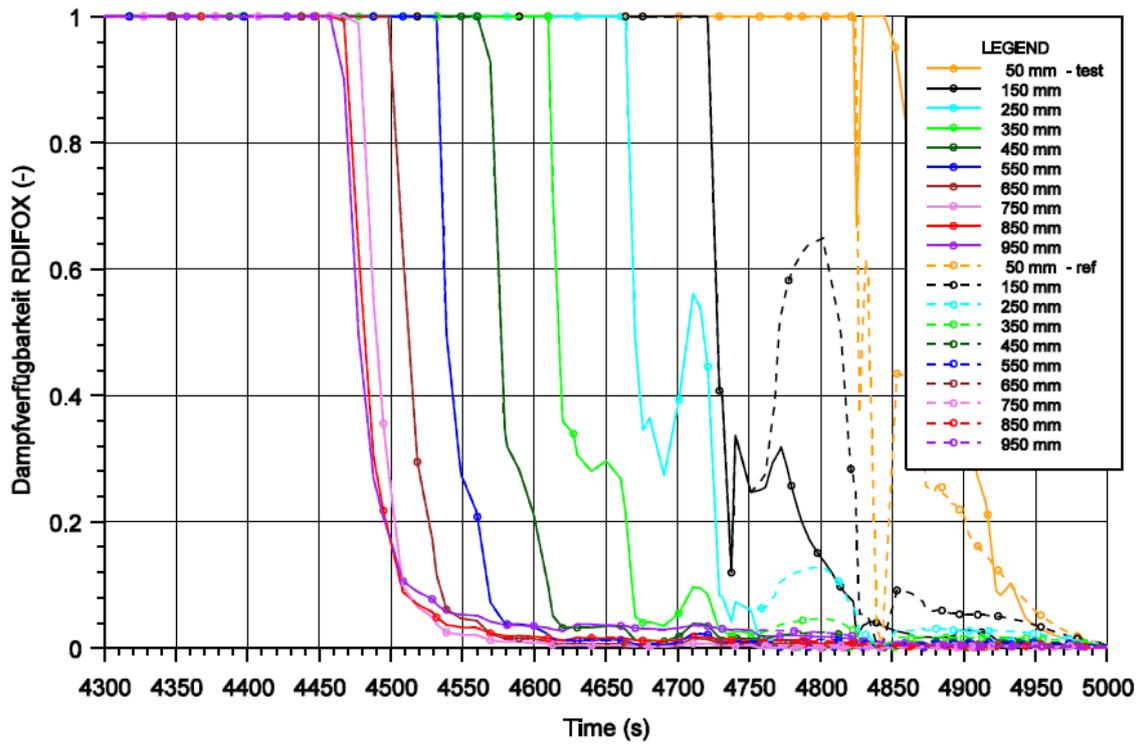


Abb. 2.37 Dampfgehalt der Strömung (RDIFOX)

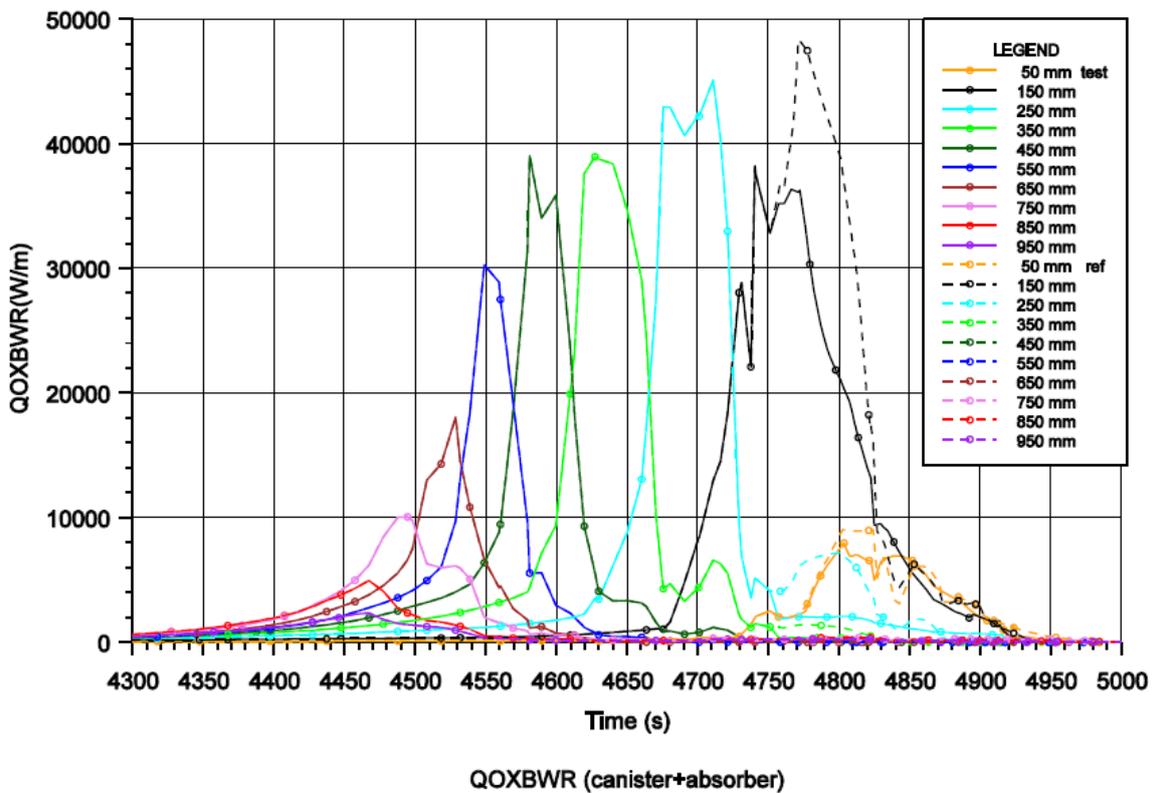


Abb. 2.38 Oxidationswärme QOXBWR (Absorberblatt und Kanisterwand)

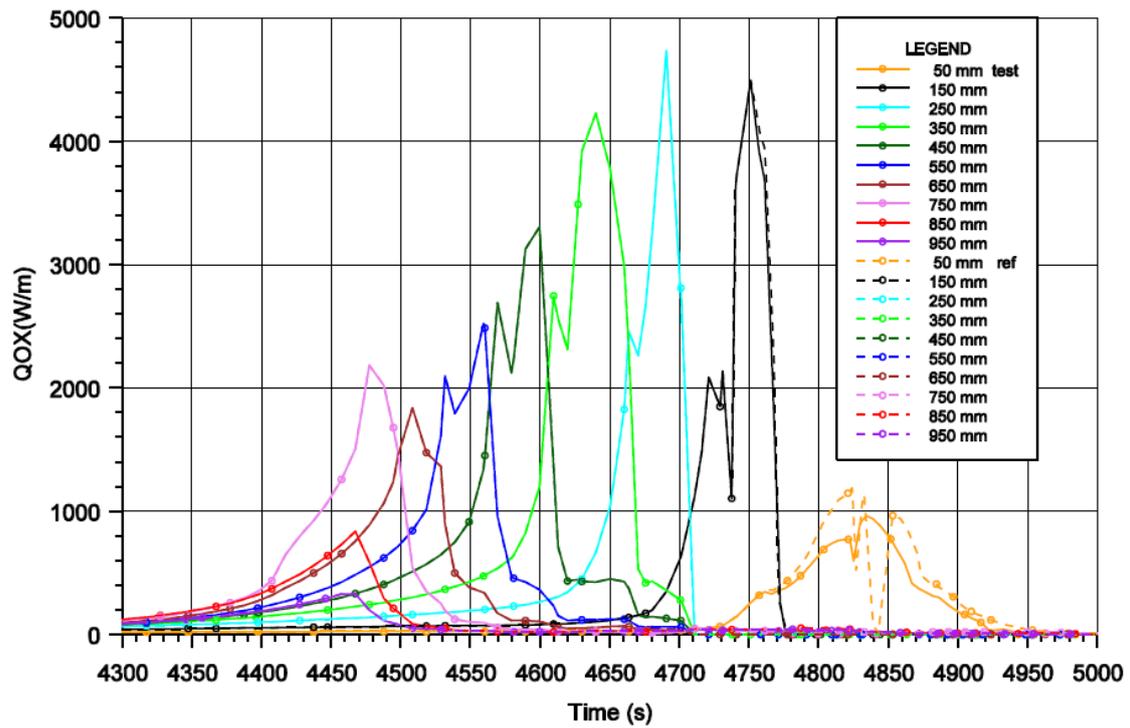


Abb. 2.39 Oxidationswärme Q_{OX} (Heizstab-Hüllrohre)

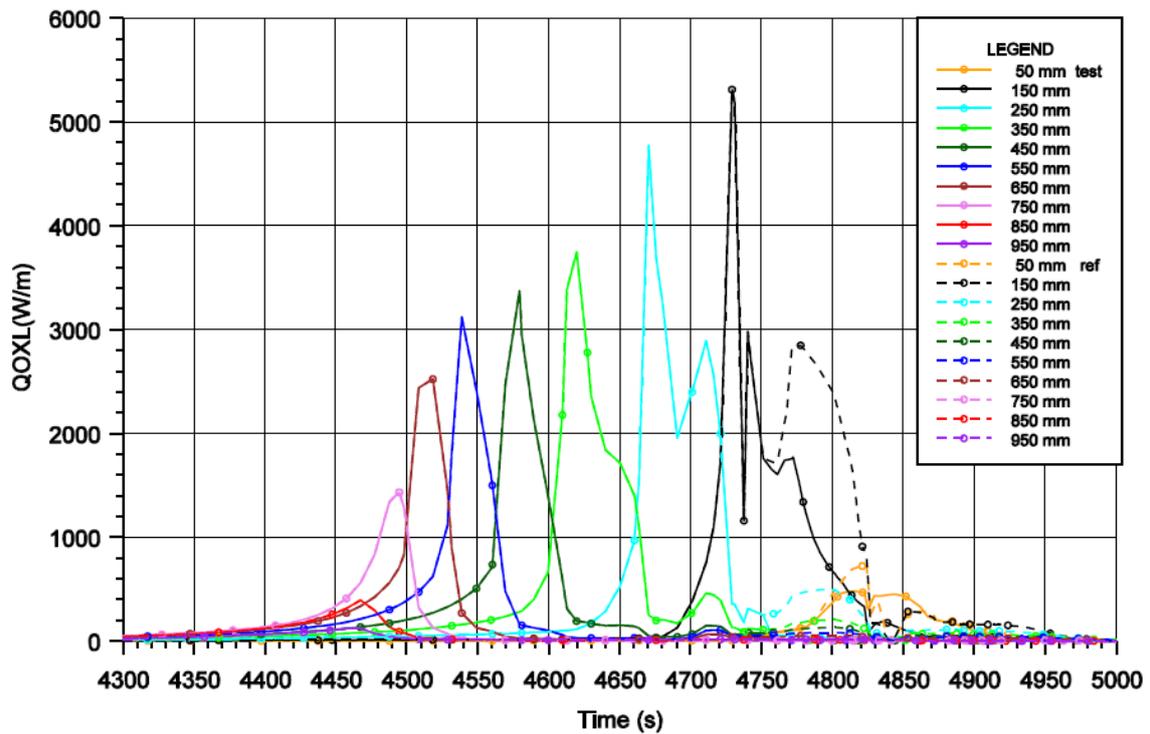


Abb. 2.40 Oxidationswärme Q_{OXL} (Shroud)

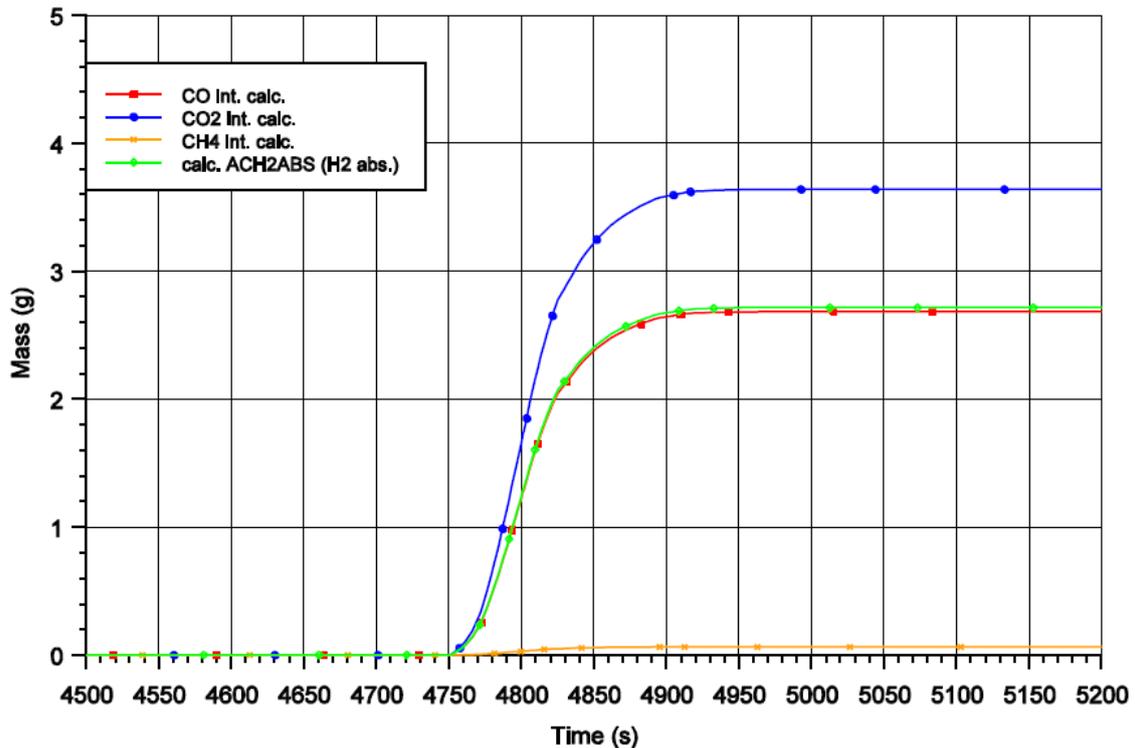


Abb. 2.41 Integral erzeugte Massen von CO, CO₂ und CH₄ sowie H₂-Erzeugung der Absorber-Oxidation

Trotz der lokal sehr begrenzten Wirkung der Oxidation im unteren Bereich des Absorberblattes ist die Auswirkung auf die Erzeugung der Gase CO und CO₂ deutlich, wogegen die Produktion von CH₄ geringfügig ist, wie Abb. 2.41 zeigt (Verteilung gegeben durch Eingabewerte, verwendet wurden die Daten aus der Messung der Werte im Versuch QUENCH-07). Die hierbei generierte Wasserstoff-Erzeugung von 2,7 g ist für sich betrachtet nicht zu vernachlässigen, aufgrund der oben erläuterten Zusammenhänge führt dieser Anteil jedoch nicht zur Zunahme der Gesamtmenge an H₂.

Beispiel SWR

Zusätzlich zu den drei CORA-Versuchen mit SWR-Charakteristik wurde ein für ATHLET-CD vorhandener Beispieldatensatz für eine deutsche SWR-Anlage als Test für die Absorber-Oxidation verwendet. Als weiterer Schritt zu der bereits bei CORA getesteten Modellerweiterung ist bei dieser Simulation eine Mehrzahl vorhandener Absorberblätter im Bereich innerhalb und außerhalb der Kernzonen definiert (FAABI>1, FAABK>1).

Nach einer Anpassung der B₄C-Masse an typische SWR-Verhältnisse im vorhandenen Beispieldatensatz (Reaktor: 9,4 kg B₄C pro Steuerstab, bei 145 Steuerstäben →

1.363 kg B₄C; Datensatz: bei 580 Absorberelementen (Summe von FAABI+FAABK über alle Rods) → ABMB₄C=0,58 kg/m) ergeben sich die in Tab. 2.7 gelisteten integralen Ergebnisse für die Simulation der SWR-Anlage nach Beendigung der Rechnung bei 5.000 s.

Tab. 2.7 Wesentliche Ergebnisse der ATHLET-CD Simulation für die SWR-Anlage (Massen sind in kg angegeben)

Test	CRAC CO	CRAC CO ₂	CRAC CH ₄	SUM B ₄ COX	FB ₄ COX	ACC H ₂ ABS	BWA CH ₂	ACC H ₂
SWR-Anlage mit B ₄ C-Ox.	19,3	26,2	0,46	72,5	5,6 %	19,5	92,2	254,8
SWR-Anlage ohne B ₄ C-O.							73,4	249,8

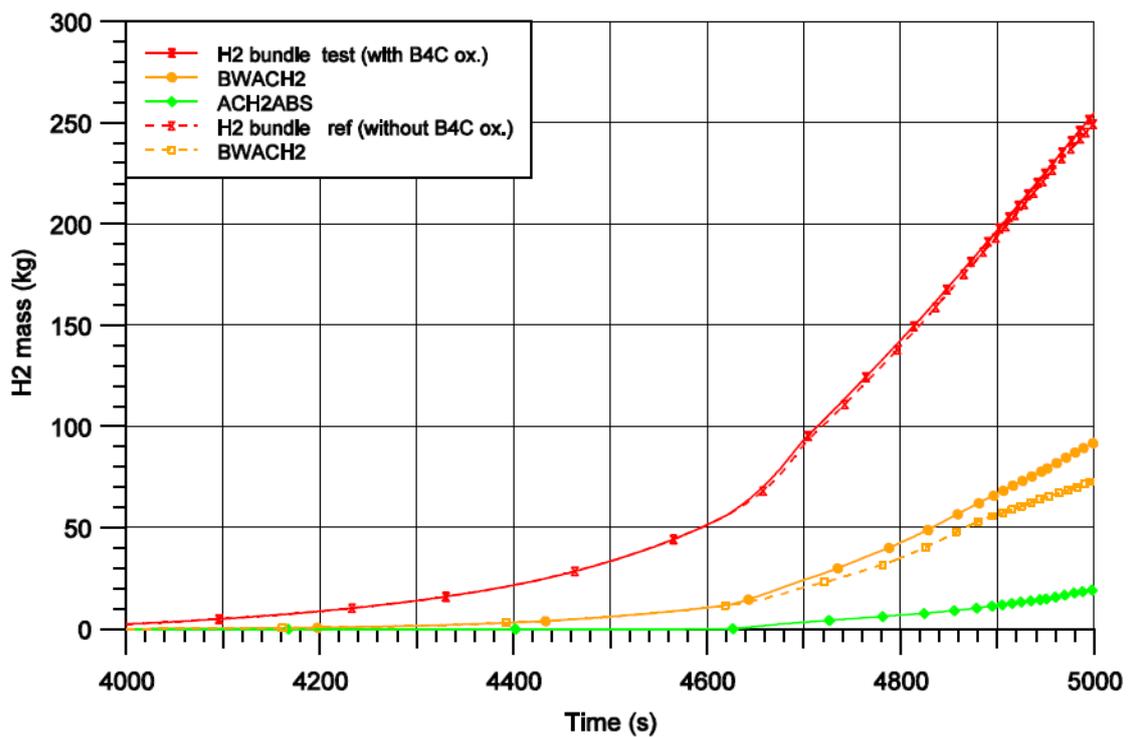


Abb. 2.42 Wasserstoff-Erzeugung für Beispiel SWR-Anlage (ohne bzw. mit B₄C-Oxidation)

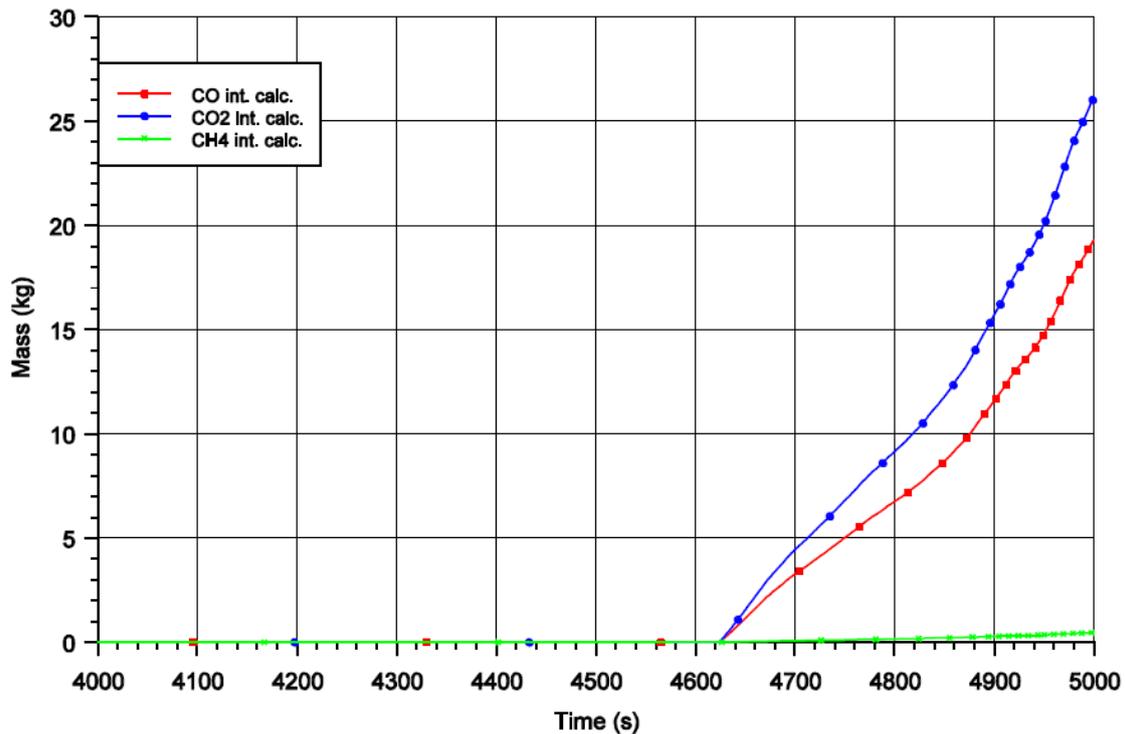


Abb. 2.43 Integral erzeugte Massen von CO, CO₂ und CH₄ für SWR-Beispiel

Daraus geht hervor, dass ähnlich zu den CORA-Simulationen ein nicht zu vernachlässigender Anteil an Wasserstoff aus der Absorber-Oxidation (ACCH2ABS / ACCH2 = 7,7 %) gegenüber einer Referenzrechnung ohne B₄C-Oxidation eine geringere Zunahme an insgesamt erzeugtem H₂ bewirkt (+5,0 kg = 2,0 %). Dieser zumindest geringe Effekt der zusätzlichen Wasserstofferzeugung ergibt sich aus der Tatsache, dass hier im Bereich der Absorber-Reaktion weniger Dampfangel vorliegt und sich demnach die Reduktion der Oxidationsreaktion für den Kanister und die Brennstäbe nicht so stark auswirkt. Die zusätzliche Oxidationswärme aus dem Absorber wirkt der reduzierten Dampfverfügbarkeit entgegen, so dass sich zumindest ein geringer Anstieg des insgesamt im Kern erzeugten Wasserstoffs ergibt.

Abb. 2.42 stellt die Wasserstofferzeugung für die Vergleichs- und Testrechnung gegenüber. Der zeitliche Verlauf der CO- und CO₂-Erzeugung ist Abb. 2.43 zu entnehmen.

2.4.1.4 Zusammenfassung und Bewertung

Um den Einfluss der zusätzlichen Wärmeerzeugung und der Wasserstofferzeugung aus der B₄C-Oxidation im Absorberblatt von SWR-Reaktoren simulieren zu können, wurde das bestehende, für DWR-Komponenten entwickelte Modell an die SWR-

Modellierung von ATHLET-CD (Version 3.1B) gekoppelt. Hierzu waren aufgrund der unterschiedlichen Geometrie des Absorberblattes Anpassungen notwendig, die die vorhandenen B₄C-Massen und die wechselwirkenden Oberflächen realistisch berücksichtigen.

Zur Überprüfung der erstellten Version wurden drei CORA-Versuche mit SWR-Charakteristik (CORA-17, -28, -33) herangezogen und weiterhin ein Beispieldatensatz einer typischen deutschen SWR-Anlage (Anpassung der B₄C-Masse entsprechend KKP1). Wie bereits bei Simulationen der B₄C-Reaktion für DWR-Konfigurationen trat bei der Anwendung für SWR keine merkliche Erhöhung der Rechenzeit auf. Während bei den für den Test verwendeten CORA-Versuchen infolge der im Reaktionsbereich vorliegenden Dampf mangelsituation kein Anstieg der Wasserstoff-Erzeugung festzustellen ist, liegt der Anstieg der H₂-Generierung bei der Simulation der SWR-Anlage bei 2 %. Dieser Wert liegt unterhalb der erwarteten Größenordnung. Ein wirklich quantitativer Vergleich für die Auswirkung der Absorberoxidation mit Experimentdaten ist jedoch derzeit noch nicht möglich, da bei den CORA-SWR-Versuchen keine Messung der Gaskomponenten CO, CO₂ und CH₄ durchgeführt wurde. Das bei KIT bereits in Planung befindliche Experiment QUENCH-20 soll diese auch quantitative Verifikation der Borkarbid-Oxidation für eine SWR-Konfiguration ermöglichen, da hierbei die Messung dieser Gase vorgesehen ist und nur so ein wirklich exakter Vergleich des Umfangs der B₄C-Reaktion für den Absorber möglich wird.

2.4.2 Überprüfung des Quenchmodells für die Anwendung auf Strukturen von Siedewasserreaktoren

Die CORA-Versuchsreihe war ein Teil des Severe Fuel Damage Programms zur Untersuchung schwerer Kernschäden und bestand aus insgesamt 19 elektrisch beheizten Versuchen, die in den Jahren zwischen 1987 und 1993 im damaligen Kernforschungszentrum Karlsruhe (KfK), dem heutigen Karlsruhe Institute of Technologie (KIT) durchgeführt wurden. Während in 11 Tests das Verhalten von Druckwasserreaktor-Stab-bündeln untersucht worden ist und die beiden letzten Tests mit VVER-typischen Brennelementen durchgeführt wurden (W1, W2), ist CORA-17 eines von insgesamt sechs Experimenten, bei denen eine Siedewasserreaktor-(SWR-)typische Bündelkonfiguration verwendet wurde. Da bei fünf dieser SWR-relevanten Versuche eine Abkühlung mit Dampf erfolgte, ist CORA-17 bisher der einzige Test, bei dem das Verhalten beim Quenchen von SWR-typischen Komponenten (Absorberblatt, Kanisterwand) überprüft wurde. Während bei den DWR-Versuchen Silber-Indium-Cadmium (AIC) als typisches

Absorbermaterial für DWR's westlicher Bauart eingesetzt war, verwendete man bei den Versuchen mit SWR- und VVER-Anordnung Borkarbid (B_4C) als Absorbermaterial.

Im Rahmen der GRS-eigenen sowie der externen Validierung (RUB, KIT) wurde der Test CORA-17 aufgrund seiner Stellung als einziger SWR-typischer Versuch mit Wasserkühlung mehrmals zur Validierung der ATHLET-CD Modelle verwendet. Hieraus ergaben sich zwar überwiegend zufriedenstellende Ergebnisse hinsichtlich des thermischen Verhaltens der Heizstäbe, jedoch Probleme mit der frühen Version 1.2B bei der Materialverlagerung von Bündelkasten und Absorberblatt /STE 00/, Probleme bei der richtigen Nachrechnung des Wasserfüllstands /ERD 09/ bei Verwendung der Version 2.2A, Verbesserungspotential hinsichtlich der Kopplung des Quenchmodells mit den SWR-typischen Komponenten /HOF 13/, /MAR 14/ sowie eine Unterschätzung der Wasserstoffproduktion in der Quenchphase aufgrund der noch nicht berücksichtigten Modellierung der Oxidation des Absorbermaterials B_4C /MAR 14/.

Aufgrund dieser Befunde wurde der Test CORA-17 nochmals zur Überprüfung der Modelle von ATHLET-CD in der derzeit aktuellen Version 3.1A herangezogen, wobei das Augenmerk vor allem auf die Anwendung des Quenchmodells bei der Abkühlung von Absorberblatt und Kanisterwand gelegt wurde. Bei der vorliegenden Rechnung war es daher ein Hauptziel, den in bisherigen Rechnungen weitgehend unterschätzten Wasserstand in der Flutphase richtig zu erfassen, um daraus Schlussfolgerungen für die Anwendung des Quenchmodells auf die SWR-Strukturen ziehen zu können.

2.4.2.1 CORA-17: Versuchseinrichtung und Durchführung

Bei den mit älteren ATHLET-CD Versionen durchgeführten Nachrechnungen wurde sowohl die CORA Versuchsanlage als auch der Ablauf des Tests CORA-17 ausführlich beschrieben /STE 00/, /ERD 09/, /HOF 13/, /MAR 14/. Im Rahmen dieses Berichts werden daher die experimentellen Gegebenheiten nur kurz erläutert, soweit sie zum Verständnis der dargestellten Ergebnisse erforderlich sind. Eine ausführlichere Beschreibung der Anlage und der Versuchsbedingungen ist auch den Berichten der Experimentatoren /HAG 96/, /HAG 96a/ und /SEP 09/ zu entnehmen.

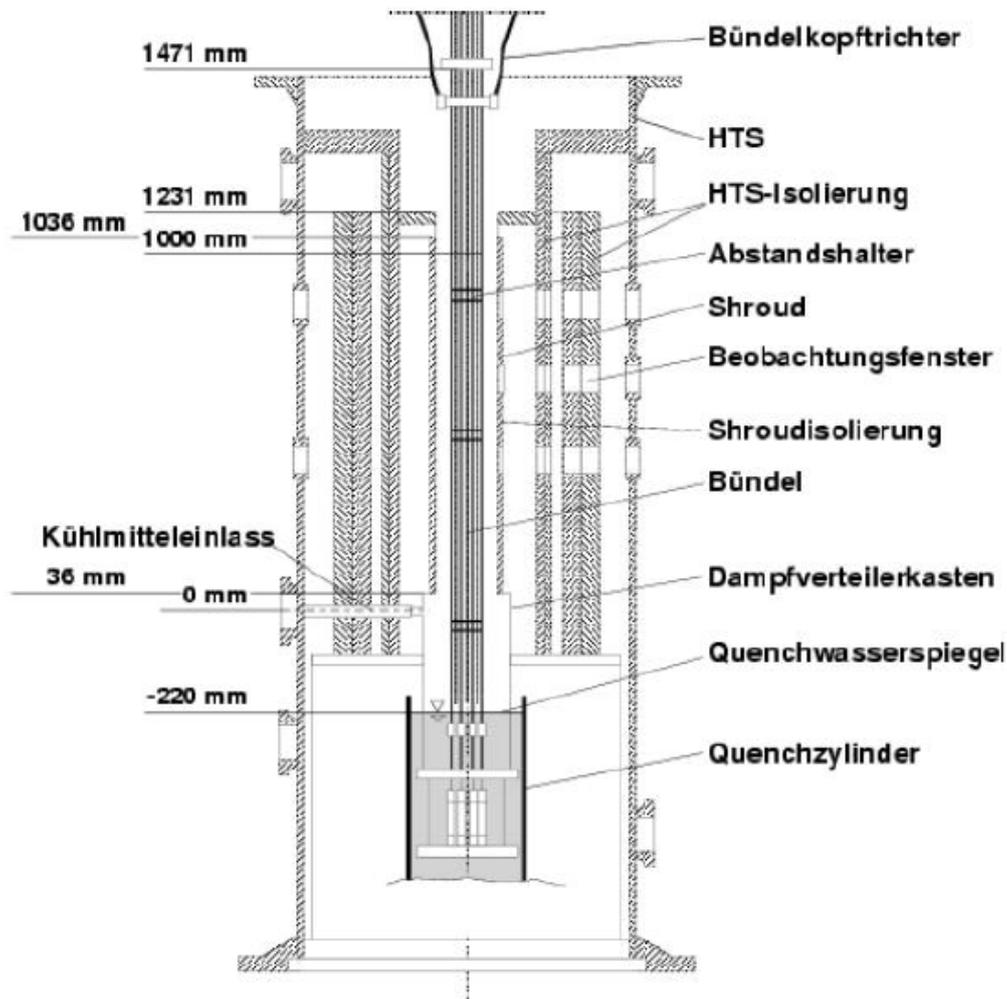


Abb. 2.44 Schematische Darstellung der CORA-Teststrecke /STE 00/

CORA-Versuchsanlage

Abb. 2.44 zeigt eine schematische Darstellung der CORA-Teststrecke. Die zentrale Einheit des Versuchsstandes war das Stabbündel, das vom Shroud umgeben war. Der Shroud bestand auf der Innenseite aus einer 1,2 mm dicken Zirkaloy-4-Schicht und war im beheizten Bereich auf der Außenseite mit einer 19 mm dicken ZrO₂-Isolierung versehen, um die Wärmeverluste der Anlage zu reduzieren. Der Hochtemperaturschild (HTS), der auf der Innenseite isoliert war, umgab die Teststrecke der Versuchsanlage. Unterhalb des Hochtemperaturschildes war der Quenchbehälter angeordnet, der den wassergefüllten Quenchzylinder einschloss. Der wassergefüllte Quenchzylinder konnte über ein Hubwerk mit einer definierten Geschwindigkeit hochgefahren werden. Dadurch bestand die Möglichkeit, im Testbündel einen aufsteigenden Wasserspiegel zu realisieren, wodurch das Wiederfluten von Reaktoren simuliert werden konnte. Beim

Heben des Quenchzylinders taucht der nach unten offene Shroud in das Quenchwasser ein und bildet dadurch eine Abdichtung gegen eventuellen Kühlmittelverlust. Mit Hilfe einer Verdampfer-/Überhitzer-Einheit wurde Wasserdampf erzeugt und auf Temperaturen bis 900 °C erhitzt. Weiterhin wurde Argon aufgeheizt und dem heißen Wasserdampf beigemischt. Beides wurde über eine isolierte Rohrleitung zum Kühlmittelleinlass geleitet und auf der Höhe 0 mm in das Testbündel eingespeist.

Das Brennstabbündel stellt den Kern der Anlage dar. Dieses besteht bei allen Versuchen aus elektrisch beheizten Simulatorstäben sowie aus unbeheizten, abgereicherten Originalbrennstäben, die in Abhängigkeit vom jeweiligen Versuch durch zusätzliche Absorberstäbe ergänzt wurden. Das hexagonale Testbündel der SWR-Versuche ist in Abb. 2.45 dargestellt, wobei das CORA-Absorbererelement einen Teil des Absorberkreuzes zwischen den Bündelkästen einer SWR-Anlage abbildet, wie aus dem schematischen Querschnitt zu erkennen ist. Der Ausschnitt stellt 12 beheizte Simulatorstäbe, 6 unbeheizte Brennstäbe und 11 B₄C-Absorberstäbe mit Edelstahl-Hüllrohren dar. Die Absorberstäbe sind zu einem Absorberblatt zusammengefasst, welches das Testbündel in der Mitte teilt. Um das Absorberblatt von den Brennstäben zu trennen, werden sie durch Brennelementkästen aus Zirkaloy eingefasst, die gleichzeitig die Führung des Absorbers darstellen.

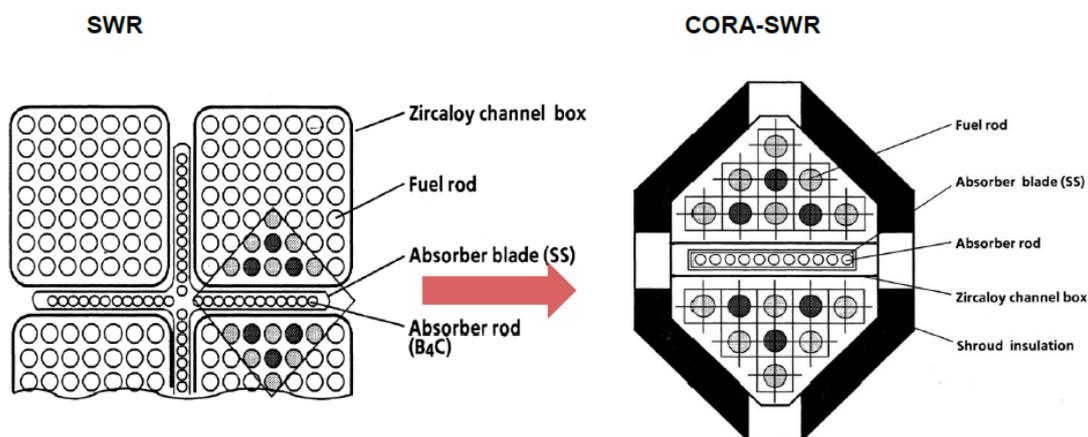


Abb. 2.45 Schematischer Querschnitt des Testbündels /SEP 09/

Die beheizten Stäbe bestehen aus 1.000 mm langen Wolframstäben mit einem Durchmesser von 6 mm, die von abgereicherten UO₂-Ringpellets und Zry-4-Hüllrohren umgeben sind. Die Stäbe entsprechen in ihren Abmessungen und in der Materialpaarung UO₂/Zry-4 den typischen Stäben westeuropäischer SWR-Brennelemente. Zur Gewährleistung einer gleichmäßigen radialen Wärmeverteilung wird die Anordnung von beheizten und unbeheizten Stäben so gewählt, dass jeder unbeheizte Stab von

mindestens 3 beheizten Stäben umgeben ist. Damit kann durch den Strahlungswärmeaustausch und den konvektiven Wärmeübergang zwischen den Stäben eine gleichmäßige Temperaturverteilung ermöglicht werden.

Die CORA-Anlage ist mit einer umfangreichen Instrumentierung zur Temperaturmessung ausgestattet. Weiterhin wurde der Wasserstoffanteil des Abgases hinter der Teststrecke an zwei verschiedenen Stellen mit Hilfe von Massenspektrometern ermittelt, um die Wasserstoffzeugung durch die Hüllrohroxidation zu quantifizieren. Für die visuelle Beobachtung des Schadensablaufs waren in der HTS-Isolierung, in der Shroud-Isolierung und im Shroud Beobachtungsöffnungen angebracht. Diese waren während der Versuchsführung geöffnet, so dass Leckageströme zwischen Bündel und Bypass auftraten. Zur Kühlung der Videokope, und um diese von Ablagerungen freizuhalten, wurde während des ganzen Versuchs ein Gesamtargonmassenstrom von 1 g/s vom HTS aus durch die 8 Fenster in den Bypass geleitet /STE 00/, /SEP 09/, /HOF 13/.

In der Tabelle in Abb. 2.46 sind die wichtigsten Anlagendaten für CORA-17 zusammengefasst /HAG 96/, /HOF 13/.

Versuchsablauf

Der Versuch CORA-17 lässt sich in die 3 Phasen Vorheizphase, transiente Phase und Abkühlphase einteilen. Die wichtigsten Randbedingungen sind in Abb. 2.47 dargestellt.

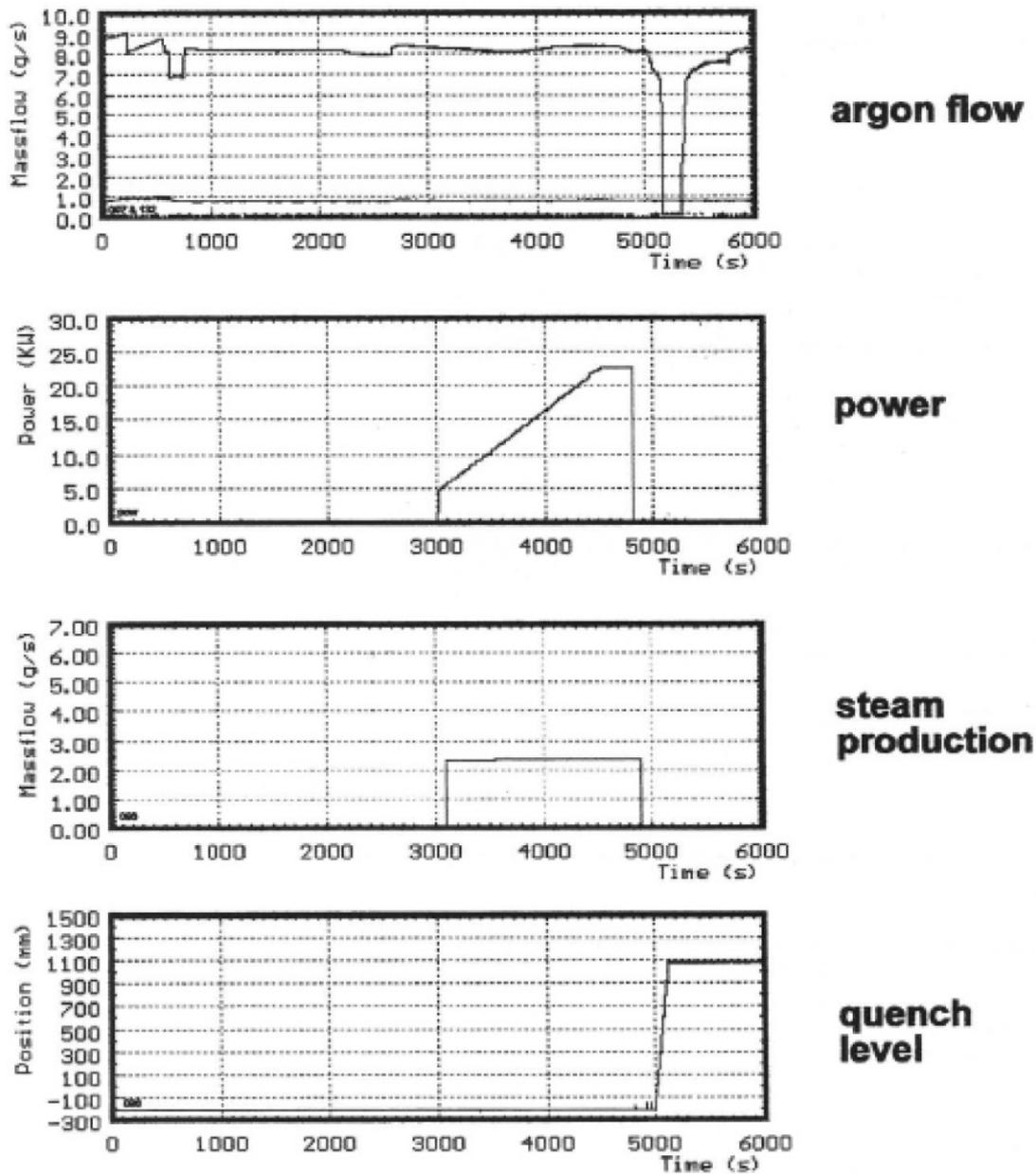
Während der Vorheizphase (0 – 3.000 s) wurde das Testbündel durch einen Argonstrom von 8,2 g/s bei einer Temperatur von 480 – 500 °C und einer geringen elektrischen Leistung aufgewärmt, so dass bei der späteren Dampfeinspeisung keine Kondensation auftreten konnte. Der Gesamtdruck im System betrug 2,2 bar.

Die transiente Phase wurde bei 3.000 s durch einen sprunghaften Anstieg der elektrischen Leistung auf 4,6 kW eingeleitet. Bis 4.500 s stieg die Leistung linear bis auf 22,6 kW an und wurde bis 4.800 s auf diesem Wert konstant gehalten. Ab 3.100 s wurde zusätzlich zum Argonstrom von 8,2 g/s ein auf 500 °C aufgeheizter Dampfstrom von 2,34 g/s am Bündeleinlass zugeführt. Bis zum Ende der transienten Phase stieg die Eintrittstemperatur des Argon-Dampf-Gemisches auf ca. 600 °C an. Die elektrische Aufheizung der Stäbe führte zusammen mit der bei Hüllrohrtemperaturen über 1.000 °C zunehmenden exothermen Oxidation des Hüllrohrmaterials Zry-4 ab ca.

4.300 s an manchen Positionen zur Eskalation sowohl der Stabtemperaturen als auch der Kanisterwand- und Absorberblatttemperaturen.

Bündeltyp	SWR	
	- Bündelgröße	18 Stäbe
	- Anzahl beheizter Brennstäbe	12
	- Anzahl unbeheizter Brennstäbe	6
	- Stababstand (Pitch)	14,30 mm
Brennstabhüllrohr	- Außendurchmesser	10,75 mm
	- Innendurchmesser	9,30 mm
	- Material	Zirkaloy-4
	- Wandstärke	0,725 mm
Absorberstäbe	- Anzahl	11
	- Material	B ₄ C
	- Außendurchmesser	5,8 mm
	- Innendurchmesser	4,6 mm
	- Material	Edelstahl
	- Wandstärke	1,2 mm
	- Länge	1.600 mm
	- Absorbiermaterial Höhe	-270 bis +1.300 mm
Absorberblatt	- Äußere Dimensionen	76 x 6 mm
	- Material	Edelstahl
	- Wandstärke	1 mm
Stablänge	- Beheizte Brennstäbe	1.840 mm, -369 bis +1.471 mm
	- Unbeheizte Brennstäbe	1.672 mm, -201 bis +1.471 mm
Heizelemente	- Material	Wolfram (W)
	- Durchmesser	6 mm
	- Beheizte Länge	1.000 mm
Pellets	- Beheizte Brennstäbe	UO ₂ -Ringpellets; Ø 9,10/6,10 mm
	- Unbeheizte Brennstäbe	UO ₂ -Vollpellets Ø 9,10 mm
Pelletstapel	- Beheizte Brennstäbe	0 bis +1.000 mm
	- Unbeheizte Brennstäbe	-200 bis +1.300 mm
Abstandhalter	- Material	Zirkaloy-4
	- Höhe	42 mm (Zry-4)
	- Anzahl	4 (Zry-4)
	- Bündelhöhe (untere Kante)	-33 mm +578 mm +1.167 mm
Shroud	- Material	Zirkaloy-4
	- Wandstärke	1,2 mm
	- Äußere Abmessung	94,4 x 116 mm
	- Länge	40 – 1.235 mm
Shroud-Isolierung	- Material	ZrO ₂
	- Wandstärke	19 mm
	- Länge	-40 bis 1.070 mm
Molybdän-Kupfer-Elektroden	- Länge der oberen Elektrode	969 mm (300 Mo, 669 Cu)
	- Länge der unteren Elektrode	489 mm (300 Mo, 189 Cu)
	- Durchmesser	8,6 mm
Bündelkasten	- Material	Zirkaloy-4
	- Äußere Abmessung	13 x 92 mm
	- Wandstärke	1,2 mm
Volumen	- Beheizte Stäbe	19,8*10 ⁻⁵ m ³
	- Unbeheizte Stäbe	39,0*10 ⁻⁵ m ³

Abb. 2.46 Wesentliche Anlagendaten für CORA-17 /HAG 96/, /HOF 13/



Oberste Position des Quenchzylinders

Abb. 2.47 Wesentliche Versuchsbedingungen für CORA-17 /HAG 96/

Ab 4.800 s begann mit der Abschaltung der elektrischen Leistung die Abkühlphase des Versuchs. Nach weiteren 100 s wurde die Dampfeinspeisung beendet und mit der Abkoppelung der Einspeiseleitung das Hochfahren des Quenchzylinders vorbereitet. Ab 5.000 s wurde der Quenchvorgang begonnen, wobei der wassergefüllte Zylinder mit einer mittleren Geschwindigkeit von 1 cm/s angehoben wurde. Nach 5.130 s erreichte die Oberkante des Quenchzylinders die Endposition bei einer Bündelhöhe von

1.080 mm; anhand der Druckdifferenz der Wassersäule im Zylinder wurde ein resultierender Wasserstand von 730 mm ermittelt. /HAG 96/.

Als Folge der erneuten Oxidationsreaktion während des Quenchens kam es zu einer erneuten Eskalation der Temperaturen, sodass im Zeitbereich der Abkühlphase ein ausgeprägter Anstieg der Wasserstoffproduktion zu beobachten war. Im Anschluss an die kurzzeitige Eskalation der Temperatur kommt es zur langsamen Abkühlung des Testbündels.

Ergebnisse der Nachuntersuchungen

Bei den im Anschluss an den Versuch durchgeführten Nachuntersuchungen wurden zunächst HTS und die Shroud-Isolierung entfernt, um durch eine visuelle Inspektion des zerstörten Testbündels erste Schlussfolgerungen ziehen zu können. Im Weiteren wurden auch zerstörende Untersuchungen vorgenommen. Hierzu wurde das Bündel in Scheiben zerschnitten und für weitere metallographische Analysen präpariert.

Die Bündelzerstörung begann in der oberen Bündelhälfte mit dem Schmelzen des Absorberkastens bei ca. 1.250 °C durch die eutektische Wechselwirkung zwischen Borcarbid und dem Stahl der Absorberstabhülle und des Absorberkastens. Nach der Zerstörung der Kühlkanalwände begann die Absorberschmelze die Hüllrohre anzugreifen und mit den UO₂-Tabletten zu reagieren. Der verflüssigte B₄C/SS-Absorberbereich verlagerte sich vollständig von der oberen Hälfte des CORA-Testbündels nach unten und führte zur Bildung ausgedehnter Blockaden. Diese Umverteilung von Absorbermaterial dürfte bei einem derartigen Unfallablauf mit nachfolgendem Fluten des teilzerstörten Reaktorkerns mit unboriertem Notkühlwasser zu lokalen Rekritikalitäten führen.

Die Versprödung der Hüllrohre durch die Oxidation sowie die Bildung von (Zr,O)- bzw. (Zr, UO₂)-Schmelze nimmt mit ansteigenden Temperaturen zu. Da die Oxidation durch das Quenchen des heißen CORA-17-Bündels weiterhin beschleunigt wird, kann ein Aufbrechen der Stäbe und die lokale Bildung und Verlagerung von Metallschmelzen beobachtet werden. Die Eskalation der Temperaturen besonders im unteren Bereich des Testbündels weist auf die Oxidation von Dampf und Wasser mit den hier freigelegten B₄C-Absorberstrukturen hin /SEP 09/.

Zur Wasserstoffproduktion gibt es keine direkten Messdaten. Als Messwert liegt nur der relative H₂-Anteil in der Mischkammer 2 vor. Aus den Auswertungen der Experi-

mentatoren /SCH 92/, /SEP 09/ ist jedoch davon auszugehen, dass während der transienten Phase 31 g Wasserstoff erzeugt wurden, während sich für den Zeitraum nach dem Beginn des Quenchens 119 g Wasserstoff ergeben. Daraus resultiert insgesamt eine H₂-Erzeugung von 150 g, die aufgrund des in /SEP 09/ veröffentlichten Diagramms der Wasserstofferzeugungsrates zuverlässig erscheinen (Abb. 2.48).

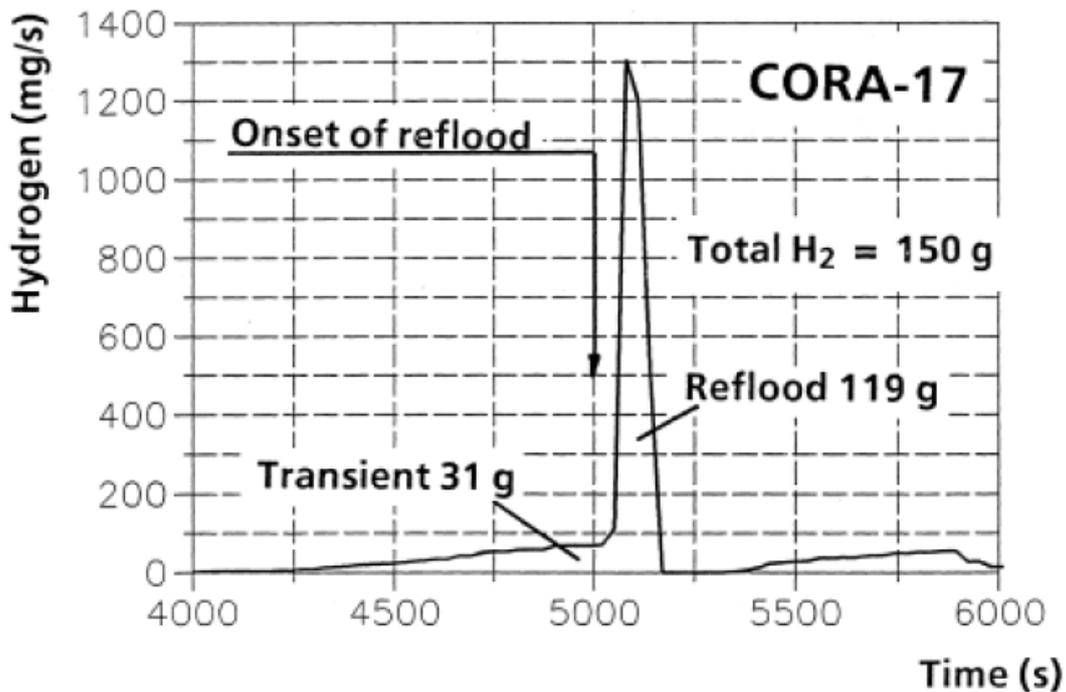


Abb. 2.48 Diagramm der Wasserstoff-Erzeugungsrates für CORA-17 /SEP 09/

2.4.2.2 Modellierung mit dem Programm ATHLET-CD

Als Ausgangsbasis für den verwendeten Datensatz diente die mit der ATHLET-CD Version 2.2A durchgeführte Nachrechnung /ERD 09/. Die aktuelle Nachrechnung erfolgte mit der Version ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A.

2.4.2.2.1 Nodalisierung

Abb. 2.49 zeigt die schematische Darstellung der CORA-Anlage. Aufgrund der Achsensymmetrie des CORA-Testbündels wird nur die Hälfte des Bündels modelliert.

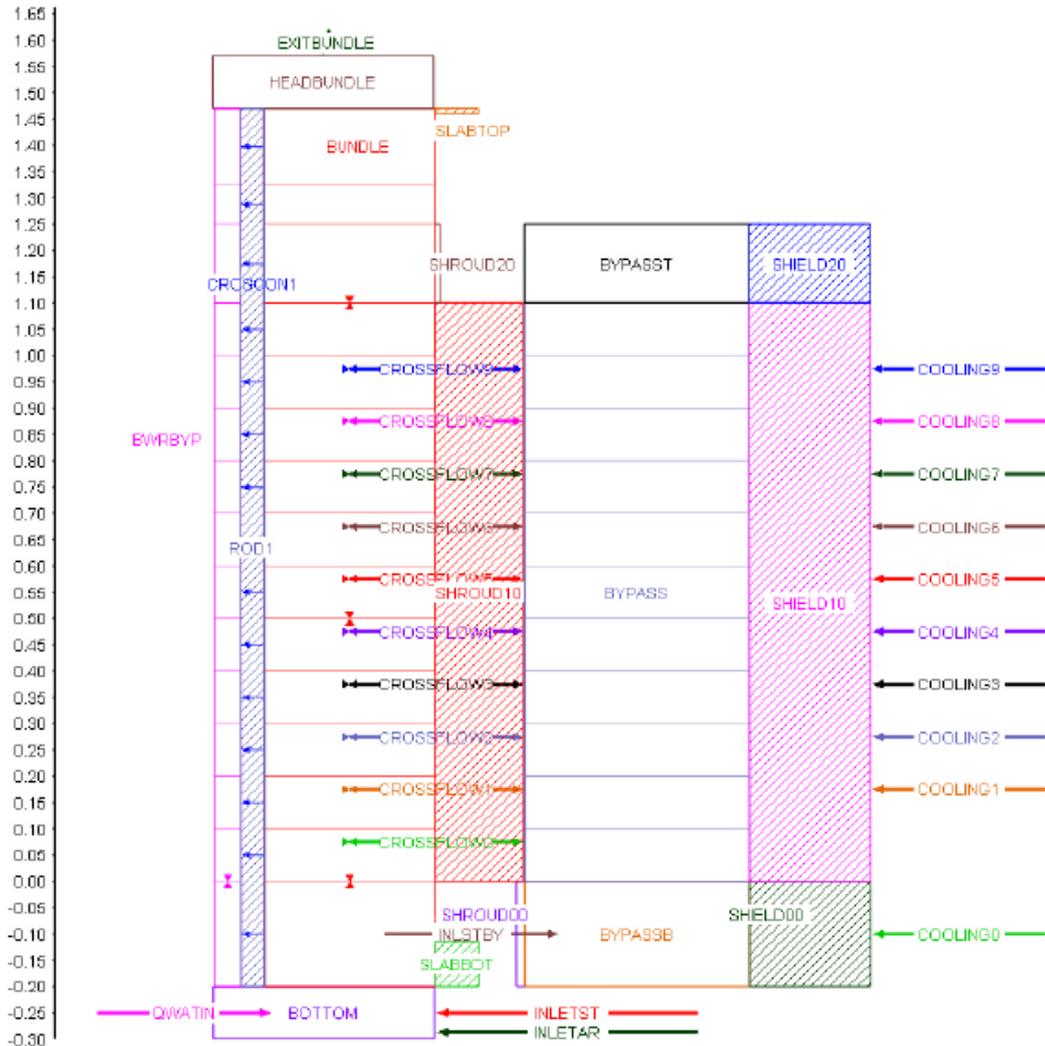


Abb. 2.49 Nodalisierung der CORA-Teststrecke

Modellierung der Strömungspfade (TFD Modul)

Der Hauptströmungspfad wird durch das TFO BUNDLE mit insgesamt 15 axialen Zonen gebildet, wobei der beheizte Bereich 10 Zonen im Bereich zwischen 0.0 und 1.0 m Höhe umfasst. Der Spalt zwischen Bündelkasten und Absorberblatt wird durch das TFO BWRBYP modelliert, der ebenfalls in 15 Nodes aufgeteilt ist. Das TFO BOTTOM dient dazu, die Einspeisung von Argon (INLETAR) und Dampf (INLETST), als auch das Quenchwasser (QWATIN) aufzunehmen und unter Berücksichtigung der jeweiligen Querschnitte und Druckverluste auf die gekoppelten TFO's BUNDLE und BWRBYP zu verteilen. Im Unterschied zu bisherigen Nodalisierungen wurde die Höhe des TFO's BOTTOM von 0.2 m auf 0.1 m halbiert, um nach Beginn der Wassereinspeisung die Zeitdauer zur Füllung dieses zusätzlichen Volumens zu reduzieren und den Eintritt des

Wasserspiegels in den Bündelbereich (BUNDLE) entsprechend dem Versuch bei der Hebung des Quenchzylinders zu erhalten. Die beiden Hauptkomponenten BUNDLE und BWRBYP sind durch ein ‚Cross Connection Objekt‘ (CCO) verbunden, so dass in der Höhe eines jeden Volumens auch Querströmung möglich ist (CROSCON1). An ihrem oberen Ende werden die beiden Strömungspfade BUNDLE und BWRBYP im Kontrollvolumen HEADBUNDLE zusammengeführt, über das der verbleibende Dampf, Argon und der entstehende Wasserstoff nach außen (EXITBUNDLE) abgeführt werden.

Die 3 Abstandshalter der Versuchsanordnung sind im TFO BUNDLE auf den jeweiligen Höhen als Ventile vorgesehen, um damit evtl. Querschnittsverengungen bei Blockadebildung durch erstarrte Schmelze abbilden zu können. Diese wurden jedoch in der vorliegenden Nachrechnung nicht verwendet und als offene Strömungspfade betrachtet.

Der Ringspalt zwischen dem Shroud und dem Hochtemperaturschild wird durch die drei TFO's BYPASSB, BYPASS und BYPASST dargestellt. Die in der Versuchsanlage vorhandenen Beobachtungsfenster im Shroud werden durch die Querverbindungen CROSSFLOW0 bis CROSSFLOW9 berücksichtigt, die über Ventile geschlossen bzw. geöffnet werden können. Zu den Querströmungen liegen keine Messungen aus dem Experiment vor; um aber den aus dem Versuch ermittelten Anstieg des Wasserspiegels sowie die gemessenen Shroud-Außenwandtemperaturen befriedigend nachrechnen zu können, wurden die Fenster bis 0,7 m Höhe geschlossen gehalten und die darüber liegenden Verbindungen (CROSSFLOW7,-8,-9) halb geöffnet, so dass hier in der Quenchphase Wasser in den Bypass-Bereich abströmen kann.

Die im Versuch vorhandene Argonkühlung der Videofenster mit insgesamt 0,8 g/s ist im Datensatz durch die Strömungskanäle COOLING0 bis COOLING9 vorgesehen; dieser wurde jedoch in der vorliegenden Rechnung nur für den unteren Bereich (COOLING0) benutzt, für die darüberliegenden Fenster ist der Argonmassenstrom mit 0 belegt.

Modellierung der Strukturen des ECORE-Modells

Bei der Modellierung der Heizstäbe mit dem Modell ECORE werden die 9 Stäbe des halben Bündels in einer repräsentativen Struktur ROD1 zusammengefasst, da mit der Eingabeoption ICORA=1, mit der die speziellen geometrischen Gegebenheiten von Absorber und Kastenwand der CORA-Anlage für das BWR Modell von ATHLET-CD berücksichtigt sind, nur eine Stabzone zulässig ist. Somit ist eine Unterscheidung zwi-

schen beheizten und unbeheizten Stäben nicht möglich und die elektrische Leistung wird auf alle 9 Stäbe aufgeteilt. Die Messergebnisse der Temperaturen zeigen jedoch nur geringe Unterschiede zwischen beheizten und unbeheizten Stäben, da sowohl der Strahlungswärmeaustausch als auch der konvektive Wärmeübergang für einen Ausgleich sorgen.

Außerdem werden mit dem ECOPE-Modell die SWR-typischen Komponenten Bündelkasten, Absorberblatt und die Absorberstäbe modelliert. Hierbei werden mit der Option ICORA = 1 zwei Bündelkastenwände, zwei Absorberblatteile und 9 Absorberstäbe angenommen, deren Anordnung für die Modellierung in Abb. 2.50 zu sehen ist. Die eutektische Wechselwirkung zwischen dem Absorbermaterial B_4C und Edelstahl sowie die Oxidation von Borkarbid ist bisher nur in der Modellierung von DWR-Komponenten enthalten und kann daher nicht berücksichtigt werden.

Die Heizstäbe, die Kastenwand sowie die Komponenten des Absorbers sind in dem ECOPE-Objekt ROD1 zusammengefasst (s. Abb. 2.49).

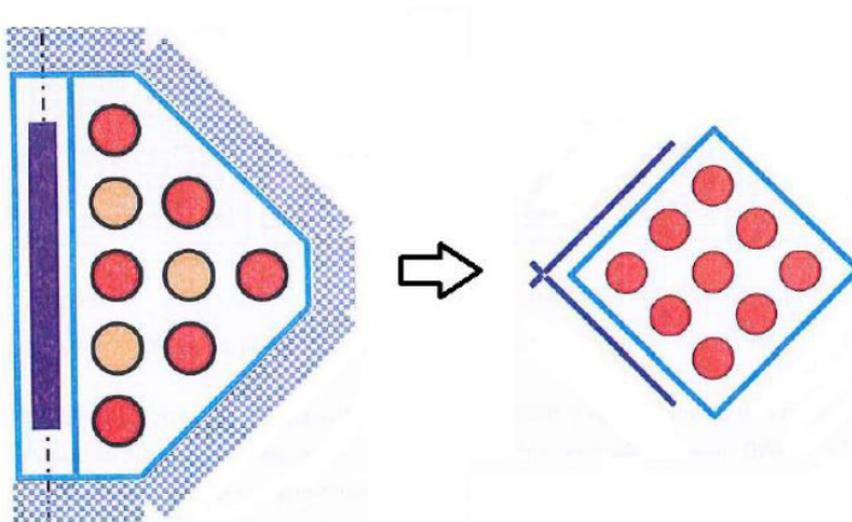


Abb. 2.50 Modellierung des Bündelquerschnitts für CORA-17 /MAR 14/

Modellierung der übrigen Strukturen (HECU)

Die weiteren Komponenten der CORA Anlage, die für den Wärmeaustausch berücksichtigt sind, werden im Modul HECU definiert. Das sind hauptsächlich der Shroud und der Hochtemperaturschild, die entsprechend dem halben Bündel jeweils nur mit der halben Fläche definiert sind. Der Shroud (SHROUD00, SHROUD10, SHROUD20) ist auf der Innenseite (Zry-4) an das TFO BUNDLE gekoppelt, rechtsseitig ist der Shroud

mit dem Bypass verbunden, wobei die Isolierung auf den beheizten Bereich begrenzt ist (SHROUD10). Im Unterschied zum zuletzt verwendeten GRS-Datensatz /ERD 09/ wird auf der den Heizstäben zugewandten Shroud-Innenseite die Oxidation des 1,2 mm starken Zry-Liners berücksichtigt. Das Abschmelzen des Shroud ist dagegen nicht modelliert. Der Hochtemperaturschild ist linksseitig an den Bypass gekoppelt und wie der Shroud in drei Objekte SHIELD00, SHIELD10 und SHIELD20 unterteilt; die den Außenbereich der Anlage darstellende rechte Seite des HTS ist durch eine konstante Temperatur von 20 °C gegeben.

Des Weiteren ist am Fuß sowie am oberen Rand des TFO BUNDLE je ein zusätzliches Wärmeleitvolumen SLABBOT bzw. SLABTOP definiert, mit denen der Wärmeverlust aus dem Bündel durch axiale Strahlung simuliert wird. Die Außentemperaturen dieser Elemente entsprechen den in -250 mm Höhe bzw. 1.245 mm Höhe gemessenen Temperaturen.

2.4.2.2.2 Anfangs- und Randbedingungen

Wie in Abb. 2.51 bis Abb. 2.53 dargestellt, werden die Bündelleistung und die Argon- und Dampfeinströmung entsprechend den Messdaten des Versuchs vorgegeben, wobei berücksichtigt ist, dass nur eine Bündelhälfte modelliert wird. Aus der in Abb. 2.51 gezeigten Heizleistung ist zu ersehen, dass mit dem für den externen Widerstand der zuführenden Leitungen gewählten Wert von 1,0 mΩ/Stab die Leitungsverluste nur maximal 0,5 kW betragen.

Die Einströmung von Argon wird nach Beginn des Quenchvorgangs auf 0 geführt (Abb. 2.52), da im Versuch die Einspeiseleitung zum Heben des Quenchzylinders entfernt wurde. Bei der Einströmung von Argon und Dampf wurde bei früheren Nachrechnungen eine Verzögerung von 100 s verwendet, da dies als typische Zeitkonstante in Verbindung mit dem im Test eingesetzten Dampferzeuger und Heizer angenommen wurde /ERD 09/, /MAR 14/. In der vorliegenden Rechnung wurde die Verzögerung für die Argoneinströmung als vernachlässigbar klein definiert (Heizer: LAG = 1 s), die Verzögerung bei der Dampfeinströmung wurde auf 50 s (Dampferzeuger) reduziert. Da bei voller Einströmung der gemessenen Dampftrate in das Bündel (Abb. 2.53) nahezu die gesamte Wasserstoffproduktion bereits vor Beginn der Wassereinspeisung berechnet wird, wie auch frühere Nachrechnungen gezeigt haben /STE 00/, /HOF 13/, /MAR 14/, wird die entsprechend den Messdaten eingespeiste Dampfmenge zum Teil in den Bypass umgeleitet. Dieses Vorgehen erscheint insofern berechtigt als im Versuch die

frühzeitige Blockadebildung durch Absorberschmelze in der Höhe von 0 – 0,2 m, die in der Rechnung nicht simuliert wird, eine Dampfabströmung zum Bypass über die zur visuellen Beobachtung des Bündels offenen Querverbindungen ermöglicht.

Die Temperatur des eingespeisten Argon-Dampf-Gemisches wird wie aus den Messdaten hervorgehend mit 480 °C, in der Aufheizphase auf 580 °C ansteigend, definiert (Abb. 2.54). Nach dem Abschalten der Dampfeinströmung bei 4.900 s ist die Temperatur nicht mehr relevant. Der Druck ist konstant und beträgt 2,11 bar.

Eine besondere Herausforderung für die Simulation des Versuchs CORA-17 besteht in der Abbildung der realen Bedingungen in der Quenchphase, wobei im Versuch der wassergefüllte Quenchzylinder mit einer durchschnittlichen Geschwindigkeit von 1 cm/s angehoben wird. Die Simulation der Wasserkühlung in ATHLET-CD muss dagegen durch die Einspeisung einer bestimmten Wassermenge in den BOTTOM-Bereich des Testbündels vorgenommen werden und wird durch das TFO QWATIN modelliert. Bei einem freien Strömungsquerschnitt von 0.00226 m² und einer konstant angenommenen Wasserdichte von 1.000 kg/m³ ergibt sich ein theoretisch eingespeister Quenchwassermassenstrom von 22,6 g/s, um das Anheben des Quenchzylinders mit 1 cm/s abzubilden. Hierbei ist jedoch nicht berücksichtigt, dass beim Hochfahren des Quenchzylinders zuerst der Shroud und schließlich auch die unbeheizten Stäbe, die ursprünglich oberhalb des Wasserspiegels ihre Ausgangslage hatten, immer weiter in das Wasser eintauchen und somit das für das Wasser verbleibende Volumen reduzieren, womit sich der Wasserspiegel mehr anhebt, als der Hubgeschwindigkeit von 1 cm/s entspricht. Andererseits bewirkt mit zunehmender Eindringtiefe in das Bündel die mit höheren Temperaturen ansteigende Verdampfung eine Abnahme des Wasserspiegels, so dass eine über die Quenchperiode konstante Einspeiserate den tatsächlich aus dem Versuch ermittelten Wasserstand (Abb. 2.55) nicht wiedergeben kann. Es zeigte sich, dass die mit dem theoretisch ermittelten Wert von 22,6 g/s beginnende Einspeisung (halbes Bündel) über einen Zeitraum von 60 s den Wasserspiegel entsprechend den Versuchsdaten nachbildet; dieser Wert muss jedoch im Zeitbereich 5.050 – 5.100 s auf das 4-fache erhöht werden (linearer Anstieg auf 90 g/s), um den aus den Versuchsdaten abgeleiteten Füllstand von 0,73 m zu erreichen. Abb. 2.56 zeigt die in der Simulation für die Abbildung des Wasserspiegels im Versuch verwendete Einspeiserate des Quenchwassers.

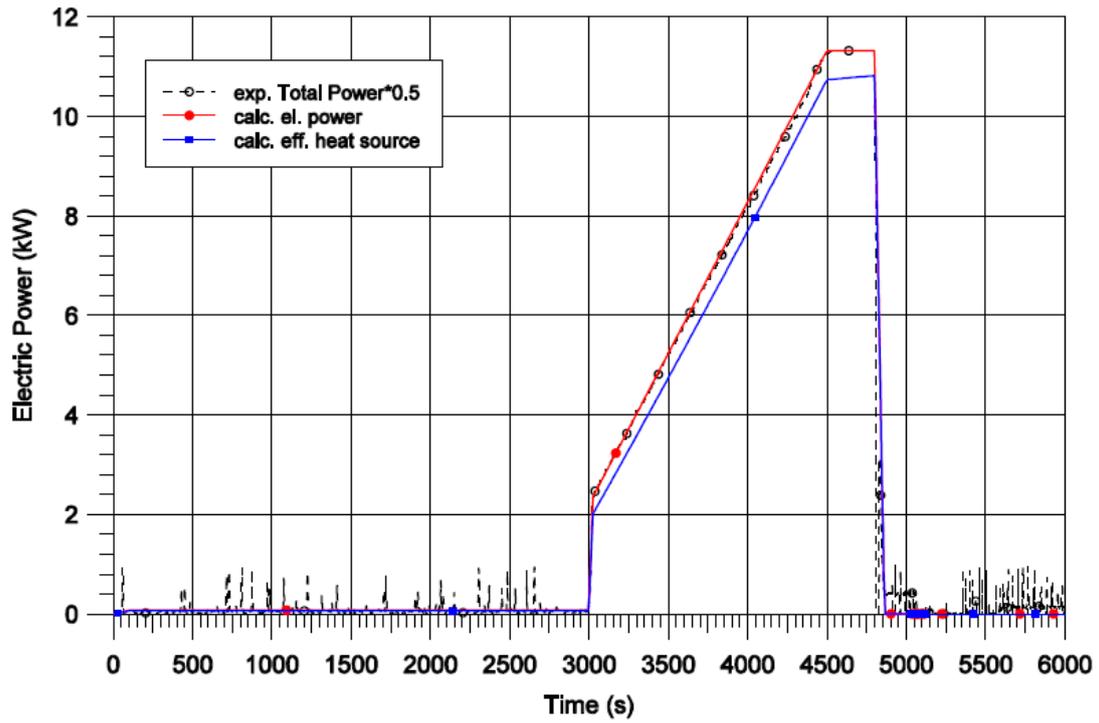


Abb. 2.51 Heizleistung des halben Bündels

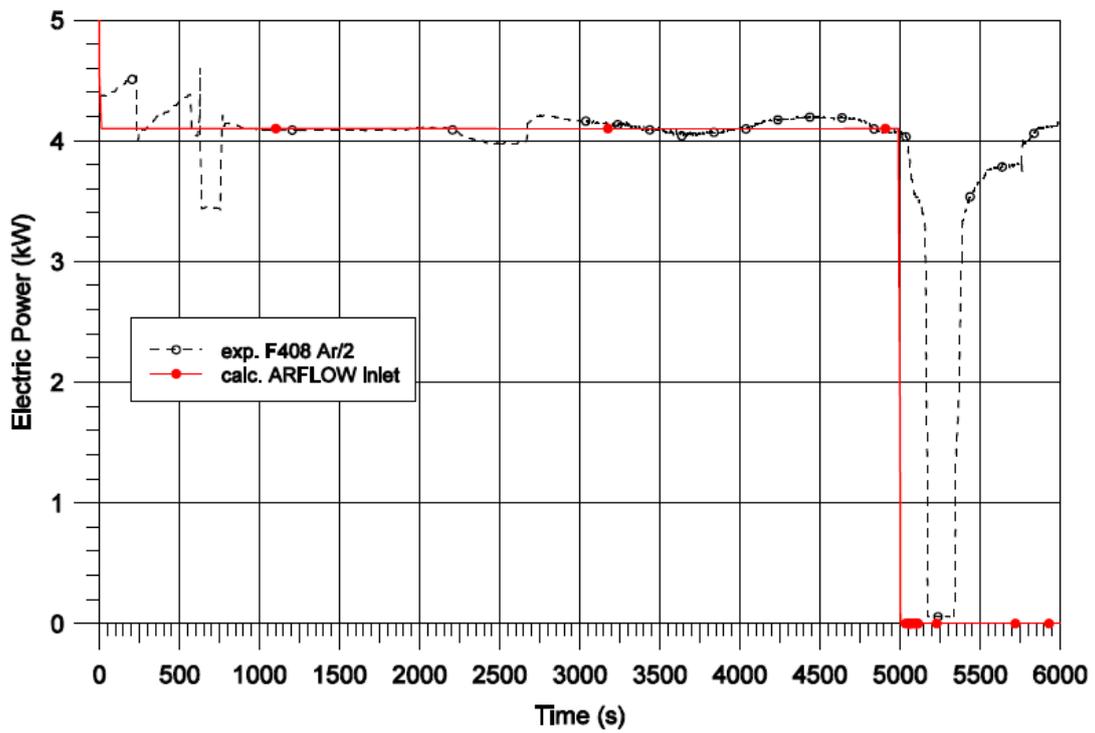


Abb. 2.52 Massenstrom der Argon-Strömung im halben Bündel

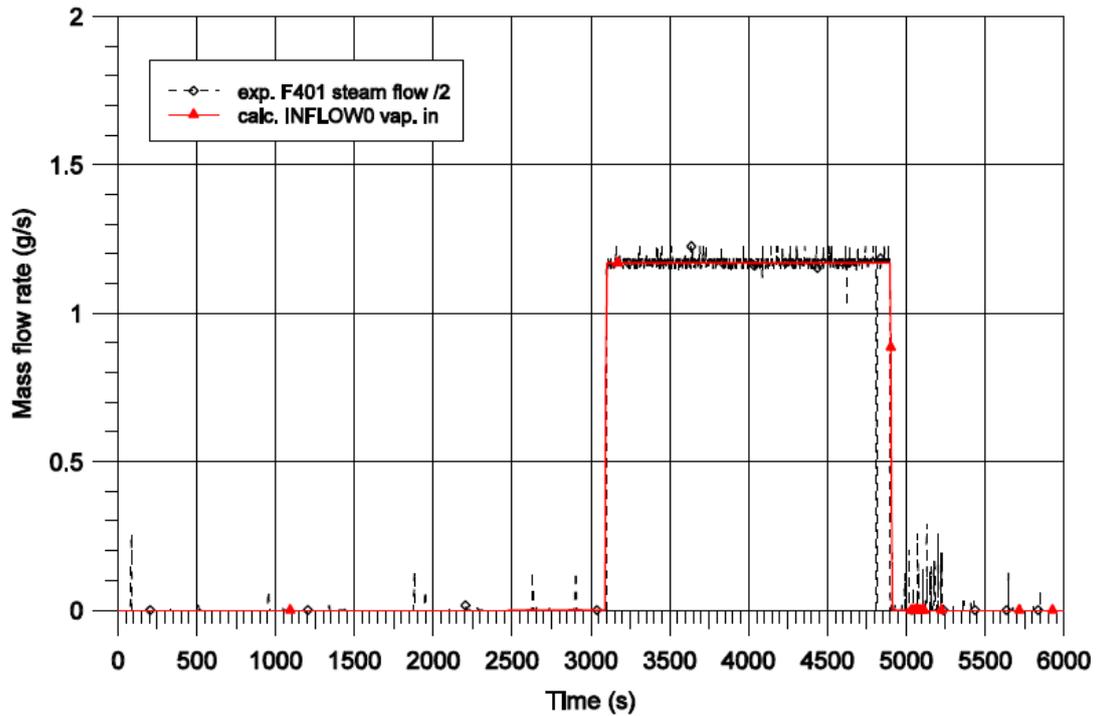


Abb. 2.53 Massenstrom der Dampf-Einströmung im halben Bündel

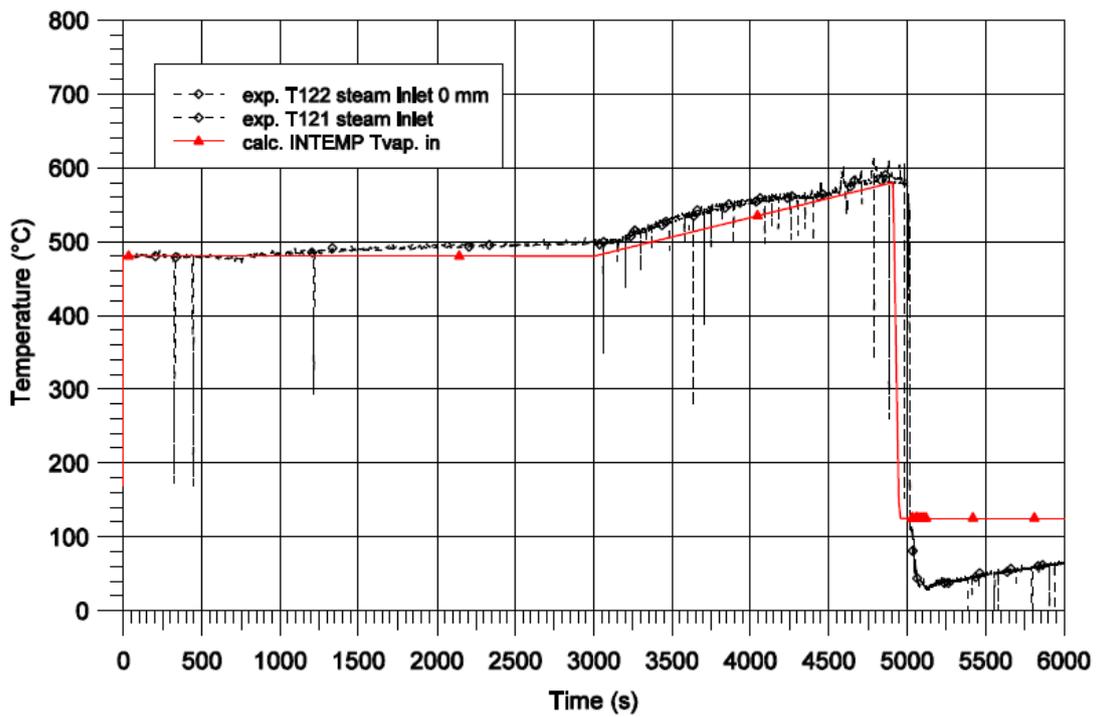


Abb. 2.54 Temperatur der Dampfeinspeisung

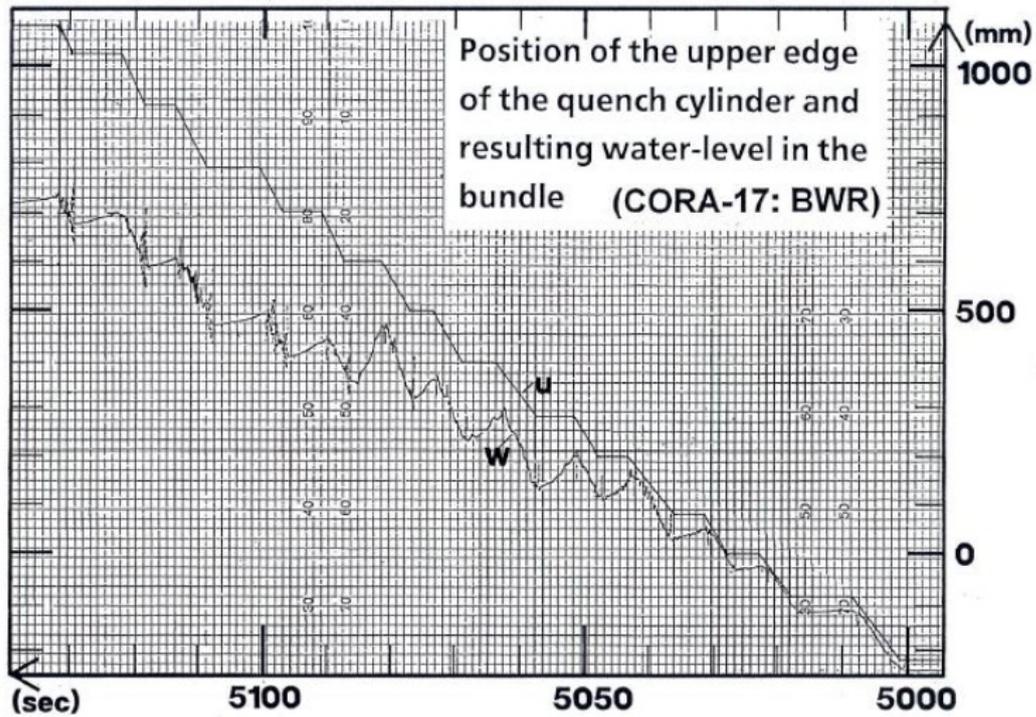


Abb. 2.55 Position des Quenchzylinders und resultierender Wasserspiegel im Bündel /HAG 96/

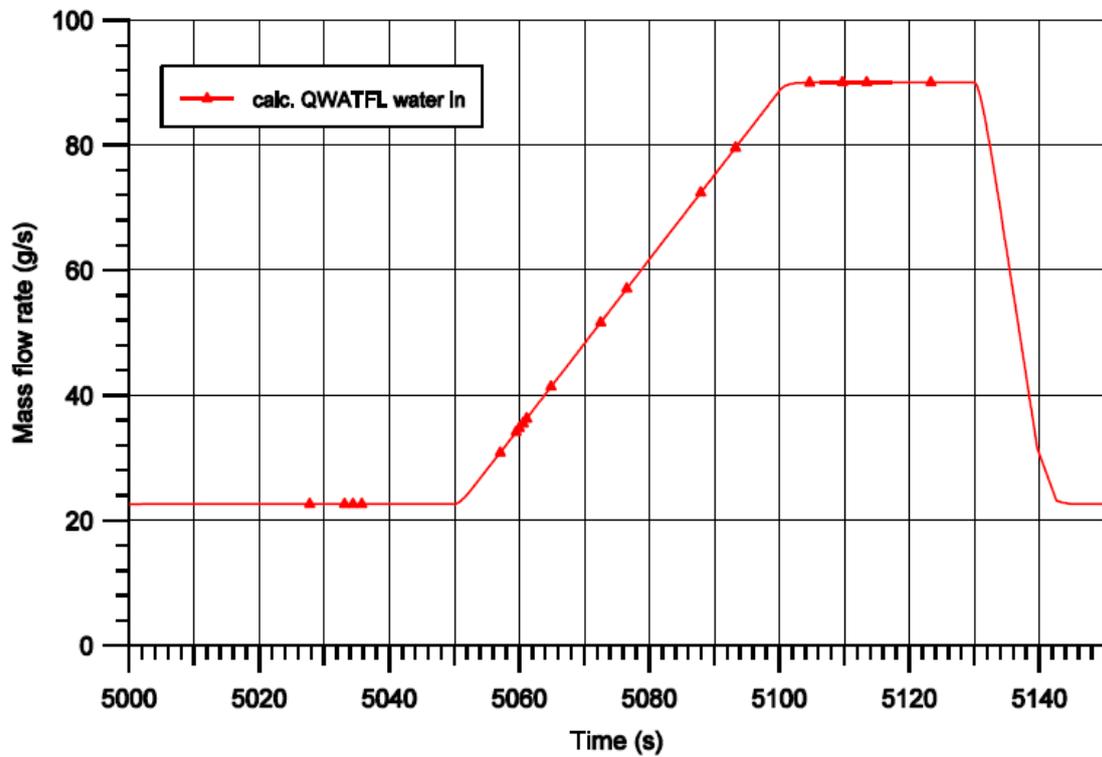


Abb. 2.56 Einspeiserate des Quenchwassers für die Nachrechnung

2.4.2.2.3 Wichtige Modelloptionen und Annahmen für die Simulation

Für die hier gezeigte Nachrechnung wurde die Version ATHLET-CD 3.1A eingesetzt, wobei im Wesentlichen die Standardoptionen und die empfohlenen Werte der Eingabedaten verwendet wurden. Die für die Rechnung wichtigsten Optionen werden im Folgenden kurz beschrieben.

Oxidationsmodell

Für die Berechnung der Reaktion von Zirkon mit dem in der Strömung vorhandenen Dampf bzw. mit dem Notkühlwasser wird die Korrelation von Leistikow - Prater/Courtright (Option 3, entspricht bei früheren Programmversionen Option 19) verwendet. Diese Korrelation wird einheitlich sowohl für die Brennstab-Hüllrohre (IOXMOD) und deren Schmelze (IOXML), als auch für die Schmelze der SWR-Komponenten (IBCOXM) sowie die Shroud-Innenseite (MODOXI) benutzt.

Der Übergang von parabolischer zu linearer Oxidationsrate, der den Zustand vor bzw. nach dem Aufplatzen bzw. Abblättern der Hüllrohre charakterisiert, wird im Programm durch die Vorgabe einer bestimmten Oxidschichtdicke (0,1 – 0,5 mm) und entsprechend einer Empfehlung des KIT durch die zusätzliche Einhaltung einer Temperaturobergrenze ($T < 1.300 - 1.400 \text{ K}$) modelliert. In der durchgeführten Simulation wurde durch die Wahl einer hohen Grenzsichtdicke (ROXLIM = 1.0) der Übergang auf lineare Oxidationsraten (damit höhere Werte der exothermen Reaktion) für den Feststoff nicht verwendet; für die Schmelze wurde der Wert entsprechend dem empfohlenen Wert gesetzt (ROXLMM = 1.D-4). Für den Shroud wurde dieser Übergang ebenfalls nicht benutzt (HROXLM = 1.).

Quenchfrontmodell

Das GCSM-Signal für den Start des Quenchfrontmodells wird zu einem beliebigen Zeitpunkt vor Beginn der Einspeisung gesetzt (QSTART: $t = 1.000 \text{ s}$), erst mit dem Beginn des Quenchens und dem ersten Auftreten von Wasser im Bündelbereich wird das Quenchfrontmodell tatsächlich aktiviert. Der Einspeisebeginn ist im Hinblick auf die angestrebte Übereinstimmung des Wasserspiegelanstiegs in Versuch und Rechnung bei 4.990 s angegeben, ca. 10 s vor dem Beginn des Flutens im Versuch, da in der Simulation auch das im Test nicht vorhandene TFO BOTTOM mit Wasser gefüllt werden muss. Bei einer Höhe des Volumens BOTTOM von 0,1 m und einem Querschnitt entsprechend der Summe der TFO's BUNDLE und BWRBYP erreicht der Wasserspiegel

mit der anfänglichen Einspeiserate von 22,6 g/s mit einer Verzögerung von 10 s den Eintritt in das TFO BUNDLE und beginnt somit kurz nach 5.000 s in zeitlicher Übereinstimmung mit dem Test den Anstieg im Bündelbereich.

Die Eingabewerte für das Quenchmodell wurden sowohl für die Heizstäbe (IBWRB = 0) als auch für die Außenseite von Kanisterwand und Absorberblatt (IBWRB = 1) gleich und entsprechend den empfohlenen und bisher für Nachrechnungen von Quench-Experimenten verwendeten Werten gesetzt. Im Folgenden sind nur die Eingabedaten für die untere Quenchfront aufgelistet, da die obere Quenchfront aufgrund des Dampfgehalts $\alpha = 1.0$ im oberen Bündelbereich während der gesamten Quenchphase nicht aktiviert wird.

IQCORB = 1: Die Korrelation von Semeria/Martinet wird verwendet für die Berechnung der Quenchfront (QF)-Geschwindigkeit;

CQVELB = 0.1: maximal möglicher Wert der QF-Geschwindigkeit;

CQHTWB = 3.0E5: maximal möglicher Wert des Wärmeübergangskoeffizienten auf der benetzten Seite der QF; der Wert wird für die Berechnung der Quenchgeschwindigkeit verwendet;
empfohlener Wertebereich (Hein): 2.0E5 – 1.0E6

ITSUBB = 1: Berücksichtigung der Unterkühlung

Da ein Vorrücken der Quenchfront nur möglich ist, wenn ein minimaler Wasseranteil für die Benetzung vorhanden ist und gleichzeitig der Bereich direkt oberhalb der Quenchfront ausreichend abgekühlt ist, ergibt sich die im Modell berechnete Quenchgeschwindigkeit in enger Kopplung an den Wasserspiegelanstieg in der Simulation. Es wurde daher für die vorliegende Nachrechnung großer Wert auf die richtige Nachbildung des Wasserspiegels entsprechend dem Befund des Versuchs gelegt. Wie in Kap. 3.2 erläutert, war es hierzu erforderlich, die ursprünglich der Hubgeschwindigkeit des Quenchzylinders von 1 cm/s entsprechende Einspeiserate von 22,6 g/s bis auf 90 g/s zu steigern (Abb. 2.56), um die durch das Heben des Zylinders erzwungene Wassereinbringung im Versuch in Übereinstimmung mit Abb. 2.55 zu erreichen.

Wichtige Optionen der Eingabedaten

Für die durchgeführte Nachrechnung wurde das 5-Gleichungsmodell verwendet, wobei die Optionen für das Driftmodell für die TFO's BUNDLE und BWRBYP ein vertikales Bündel definierten (JFLO0 = 2, JDRIFT = 2).

Während die Querschnittsflächen von BUNDLE und BWRBYP aus der früheren GRS-Rechnung beibehalten wurden ($A_{\text{ges}} = 2.26 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$) /ERD 09/ wurden die hydraulischen Durchmesser aus der letzten Nachrechnung /MAR 14/ übernommen (BUNDLE: $D_h = 1.69 \cdot 10^{-2} \text{ m}$, BWRBYP: $D_h = 6.5 \cdot 10^{-2} \text{ m}$). Ebenso wurden für den Bypass-Bereich die Geometriedaten der KIT-Rechnung verwendet ($A_{\text{Byp}} = 1.29 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2$, $D_h = 7.8 \cdot 10^{-2} \text{ m}$) /MAR 14/.

Während im Versuch beim Heben des Quenchzylinders eine Wassereinbringung mit etwa konstanter Geschwindigkeit erzwungen wird, können in der Modellierung der Nachrechnung (FILL in das Volumen BOTTOM) durch Druckstöße bei massiver Verdampfung auch negative Geschwindigkeitsrichtungen der Wasserströmung am unteren Bündelende auftreten. Um das Eindringen von Wasser in den Bündelbereich möglichst realistisch abzubilden, wurden daher für den Eintritt in die TFO's BUNDLE und BWRBYP hohe Formverlustbeiwerte für Rückwärtsströmung gewählt (dimensionslos $K \sim 1.000$).

Mit der Wahl von QGAMC = -1 in der Modellierung von Verdampfung und Kondensation (CW EVAPORATION) wird die Direktkondensation an der Wand nicht berücksichtigt.

Der Wert des externen Widerstands der zuführenden Leitungen hat bei den Nachrechnungen der Versuche großen Einfluss auf die Ergebnisse. Die gezeigten Ergebnisse wurden mit WHRES0 = 1.0 mΩ/rod erzielt (s. auch Abschnitt 2.4.2.2.1, Abb. 2.49).

Die für den Übergang des metallischen bzw. oxidierten Hüllrohrmaterials Zr und ZrO_2 vom Feststoff zur Schmelze verantwortlichen Eingabewerte TAM bzw. TALLOW – TALHIGH wurden entsprechend den Empfehlungen in den Eingabedaten belegt (TAM = 2.250 K, TALLOW = 2.300 K, TALHIG = 2.500 K). Dementsprechend wurde auch die Versagenstemperatur der Kanisterwand mit derselben Temperatur definiert (BCTVS = 2.250 K). Die Versagenstemperatur von Absorberstäben und Absorberblatt ist die Schmelztemperatur der eutektischen Mischung von B_4C und Stahl

(ABTAM = 1.520 K). Die Verlagerungsgeschwindigkeit der Schmelzen (Heizstäbe, Absorber, Kanisterwand) liegt mit dem Wert von 1 cm/s innerhalb des empfohlenen Wertebereichs.

Die Wärmeleitfähigkeiten der metallischen und keramischen Schmelzen, die im ursprünglichen GRS-Datensatz /ERD 09/ am unteren Rand des angegebenen Wertebereichs lagen, wurden wie in der KIT-Nachrechnung /MAR 14/ angehoben (ALAMSL = 12,5 W/(m·K), ALAMUO = 3,5 W/(m·K)) und entsprechen damit genau dem Mittelwert des empfohlenen Wertebereichs. In gleicher Weise wurde der Wert für die Verlagerung der geschmolzenen Kanisterwand (ALAMBC = 12,5 W/(m·K)) geändert.

Bei einem Vergleich der Temperaturverläufe muss berücksichtigt werden, dass der in der Anlage vorhandene achteckige Strömungsquerschnitt mit ATHLET-CD nicht modelliert werden kann. Für die Simulation wird ein rotationssymmetrischer Strömungskanal angenommen, der vor allem beim Strahlungswärmeaustausch zwischen den Strukturen eine Rolle spielt /ERD 09/, /MAR 14/.

2.4.2.3 Ergebnisse

Ab 0 s beginnt der Vergleich mit dem Experiment. Die Simulation wurde bis zu einer Problemzeit von 6.000 s durchgeführt, wobei die Rechenzeit auf dem GRS-Cluster ‚manni‘ 3.582 s betrug. In den Vergleichsdiagrammen erfolgt die Kennzeichnung der experimentellen Ergebnisse (gestrichelte Linien) entsprechend der Instrumentierungsliste. Die Kennzeichnung der mit ATHLET-CD errechneten Daten (durchgezogene Linien) ergibt sich aus dem Nodalisierungsmodell (Abb. 2.49). Die Höhenangaben in den Darstellungen entsprechen den Angaben der Versuchsanlage; die beheizte Länge der Brennstäbe liegt zwischen 0,0 m und 1,0 m.

2.4.2.3.1 Wasserspiegelanstieg und Quenchfrontverlauf

Mit der in Abb. 2.56 dargestellten Einspeiserate wurde in der Simulation ein Wasserspiegelanstieg erreicht, der näherungsweise dem durch das Anheben des Quenchzylinders für den Versuch protokollierten Wasserspiegelanstieg (Abb. 2.55) entspricht. Aus dem direkten Vergleich des berechneten Wasserspiegelanstiegs in den TFOs BUNDLE und BWRBYP mit dem Soll-Pegel des Versuchs in Abb. 2.57 ist zu ersehen, dass die der Hubgeschwindigkeit des Quenchzylinders von 1 cm/s entsprechende Ein-

strömrate von 22,6 g/s bis 5.050 s den Verlauf im Test gut wiedergibt. Mit ansteigender Rate in der Simulation (s. Kapitel 2.4.2.2) wird im späteren Verlauf annähernd der Pegel des Experiments erreicht, bis übereinstimmend in Versuch und Rechnung in 0,73 m Bündelhöhe ein Endstand erreicht ist. Obwohl in der Simulation das CCO CROSCON1 Querströmung in jedem Volumen ermöglicht, entstehen kurzfristig Unterschiede im Wasserspiegel zwischen dem Bereich der Heizstäbe (BUNDLE) und dem Spalt zwischen Bündelkasten und Absorberblatt (BWRBYP) bis zur Höhe der einzelnen Zellen (0,1 m), die durch die bei heftiger Verdampfung auftretenden Druckunterschiede verursacht werden.

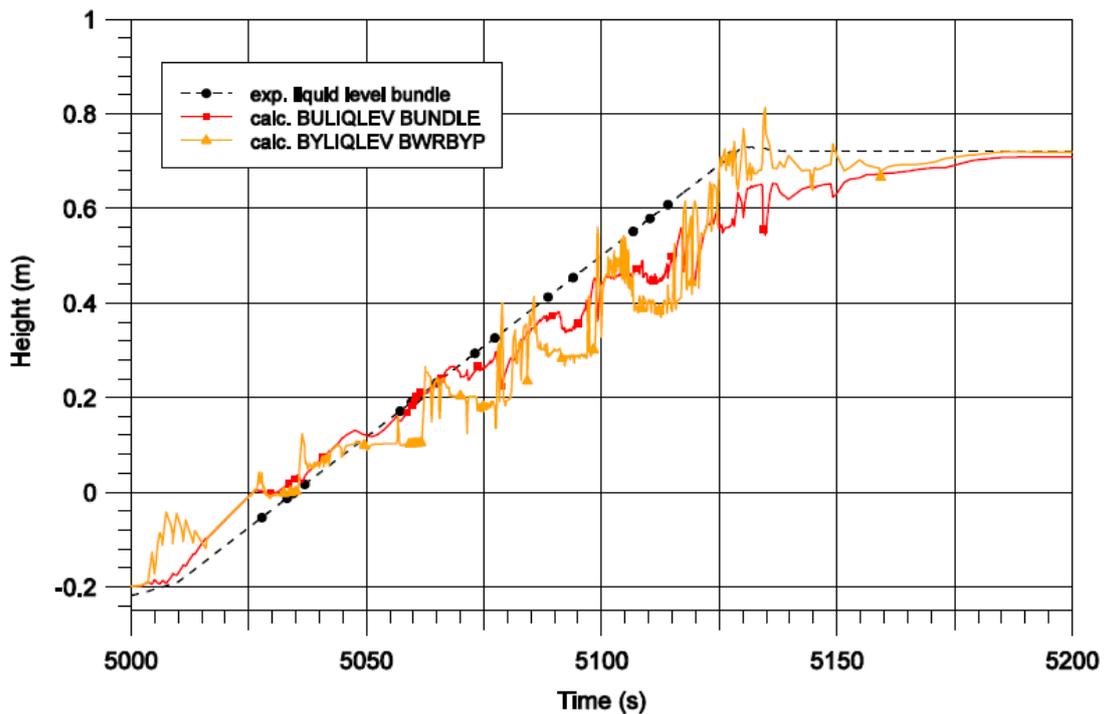


Abb. 2.57 Wasserspiegelanstieg in Versuch und Rechnung

Die in der Simulation berechneten Quenchfront-Verläufe für das Stabbündel und die SWR-Komponenten Kastenwand - Absorberblatt sind in den Abb. 2.58 und Abb. 2.59 zusammen mit dem Wasserspiegelanstieg aufgetragen. Es zeigt sich, dass sich die beiden Quenchfront-Bereiche sehr ähnlich verhalten. Während die oberen Quenchfronten während der gesamten Abkühlphase in der Ausgangsposition bleiben, sind die unteren Quenchfronten sehr eng an den jeweiligen Wasserspiegel gekoppelt. Dieses Verhalten ist im Hinblick auf den Dampfgehalt in den einzelnen Zellen (Abb. 2.60, Abb. 2.61) schlüssig, da das Quenchfrontmodell ein Vorrücken nur ermöglicht, wenn Wasser vorhanden ist (Dampfgehalt $\alpha < 1$); außerdem müssen die Temperaturen unmittelbar über der unteren Quenchfront ausreichend abgekühlt sein, so dass die Wand

benetzt werden kann ($T < T_{\text{Leidenfrost}}$). Da eine Wasserverteilung nur über wenige Zellen vorliegt, ist im oberen Bündelbereich ($h > 800 \text{ mm}$) bis zum Ende der Kühlphase kein Wasser vorhanden (Wasserabströmung über die Querverbindungen zum Bypass) und die obere Quenchfront bleibt auch nach Abkühlung der Stäbe und der Kanisterwand in der Position am oberen Bündelrand. Dies entspricht dem Verhalten im Test, bei dem die Abkühlung nur durch Kühlung von unten erfolgt, also kein durch Kondensation von Dampf oder Wassermittels entstandener und ablaufender Wasserfilm ein Quenchen auch von oben ermöglicht.

Die untere Quenchfront bewegt sich mit der Durchschnittsgeschwindigkeit des Wasserspiegels nach oben, da wegen des hohen Dampfgehalts über der Quenchfront die Vorkühlung aus dem Bereich von Temperaturen um 2.000 °C sehr langsam erfolgt und die Kühlung dadurch fast nur vom Fortschreiten des Wasserspiegels abhängig ist. Zum Ende der Abkühlphase nimmt die untere Quenchfront eine Position von $0,80 \text{ m}$ ein, da in den darüber liegenden Zellen kein Wasser vorhanden ist.

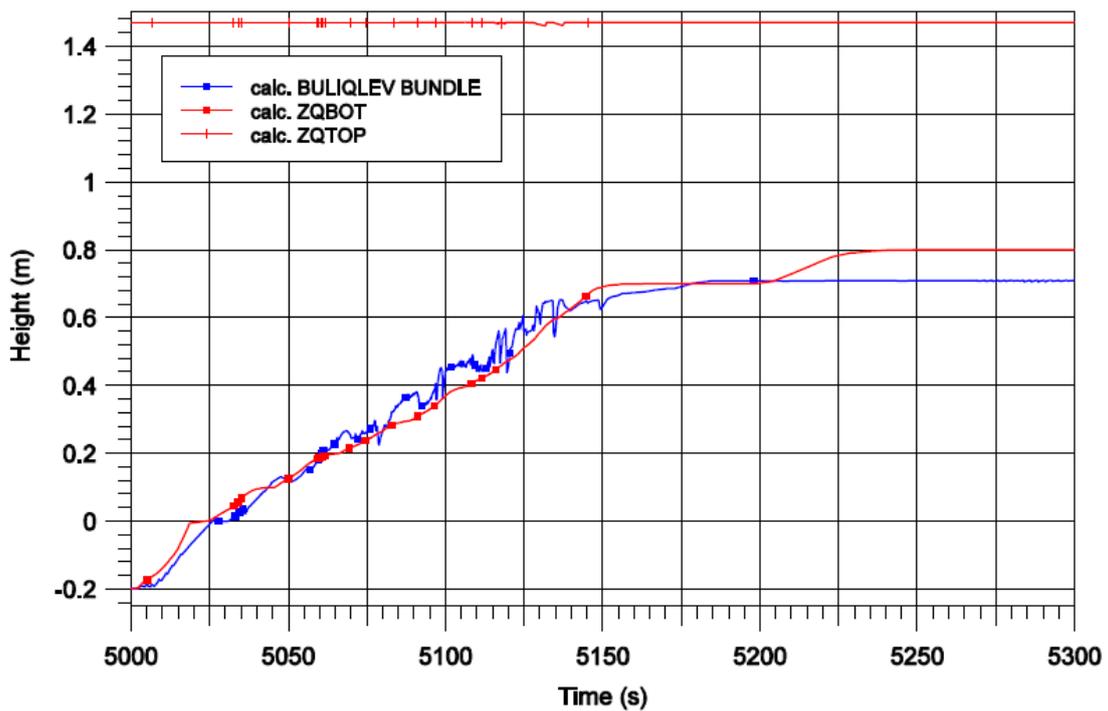


Abb. 2.58 Quenchfront-Verlauf für das Heizstabbündel

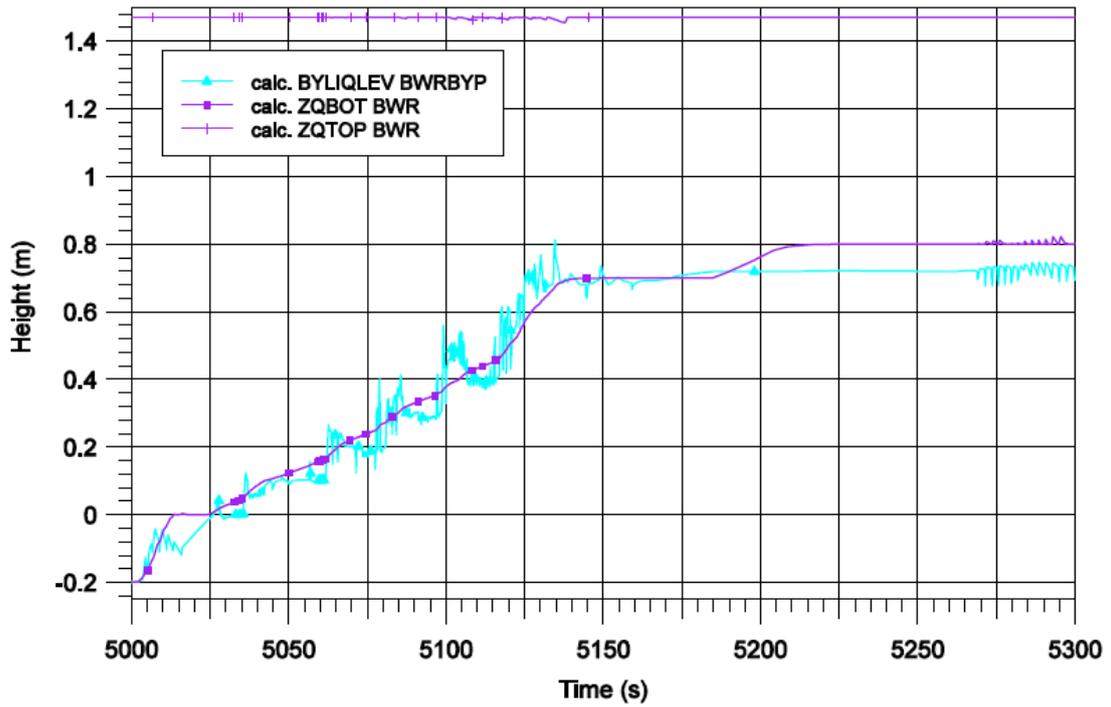


Abb. 2.59 Quenchfront-Verlauf für die SWR-Komponenten

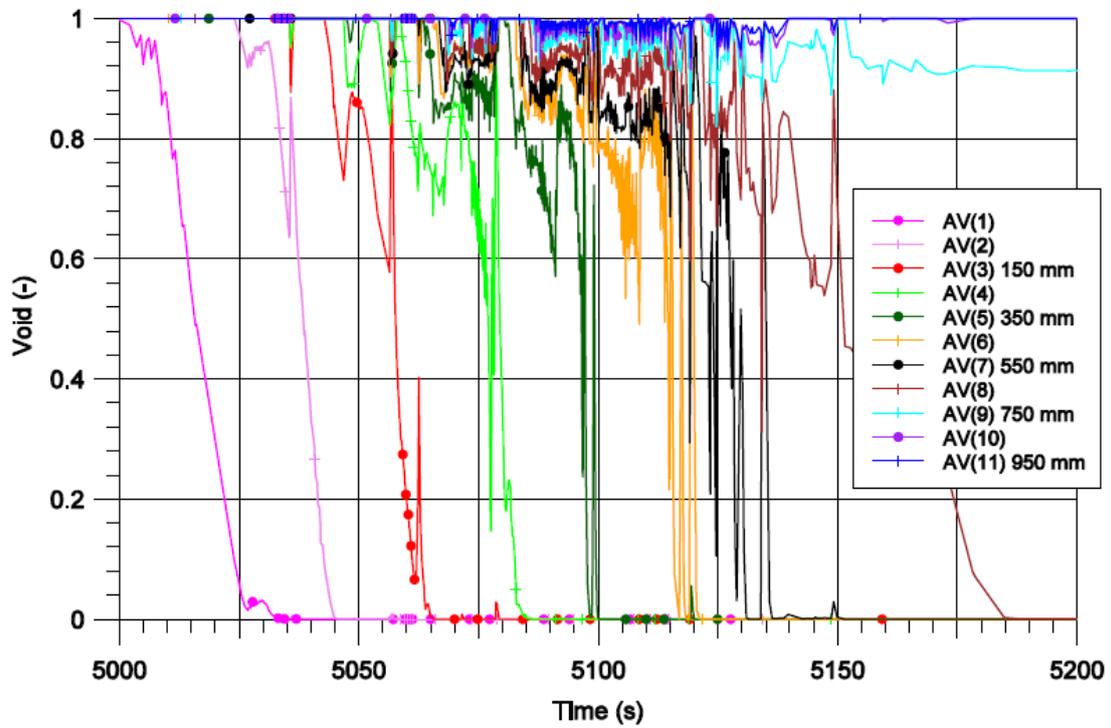


Abb. 2.60 Dampfgehalt im TFO BUNDLE

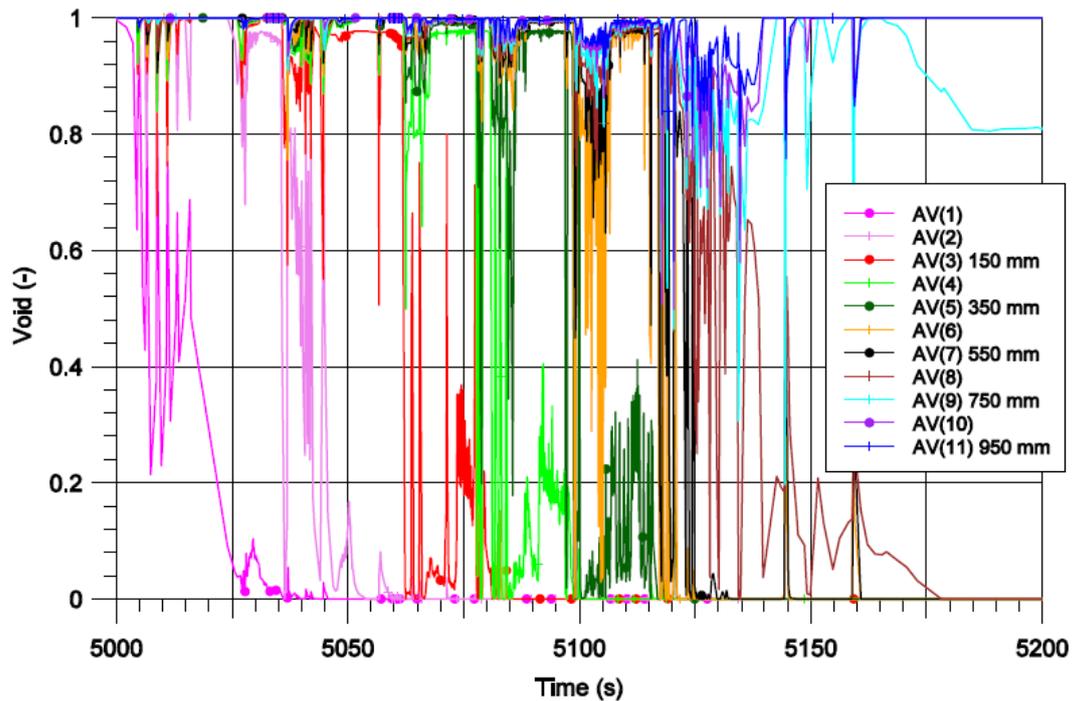


Abb. 2.61 Dampfgehalt im TFO BWRBYP

2.4.2.3.2 Temperaturen

Heizstabtemperaturen

Die gemessenen und berechneten Temperaturverläufe der Heizstab-Hüllrohre sind in den Abb. 2.62 bis Abb. 2.65 für die Höhen 350 mm, 550 mm, 750 mm und 950 mm gegenübergestellt. Hierbei zeigt der Vergleich der Messdaten von beheizten und unbeheizten Stäben in der Aufheizphase nur geringe Unterschiede, sodass die ATHLET-CD-Modellierung mit einer Umverteilung der Eingangsleistung auf ausschließlich beheizte Stäbe als zulässig erscheint. Im Zeitbereich der Aufheizung bis zur ersten Eskalation der Messwerte nach ca. 4.400 s stimmen die berechneten Temperaturen sehr gut mit den Versuchsdaten überein. Die zum Ende der transienten Phase im Test nach ca. 4.500 s auftretende Temperatureskalation wird in der Simulation nicht nachgerechnet und lässt sich mit der bis 5.000 s geringen Wasserstoff-Erzeugungsrate des Versuchs (s. Abb. 2.74) nicht vereinbaren. Nach dem Abschalten der Heizleistung im Zeitbereich von 4.800 bis 5.000 s zeigen die Messdaten größere Unterschiede zwischen einzelnen Messpositionen, werden jedoch im Mittel von der Simulation gut wiedergegeben.

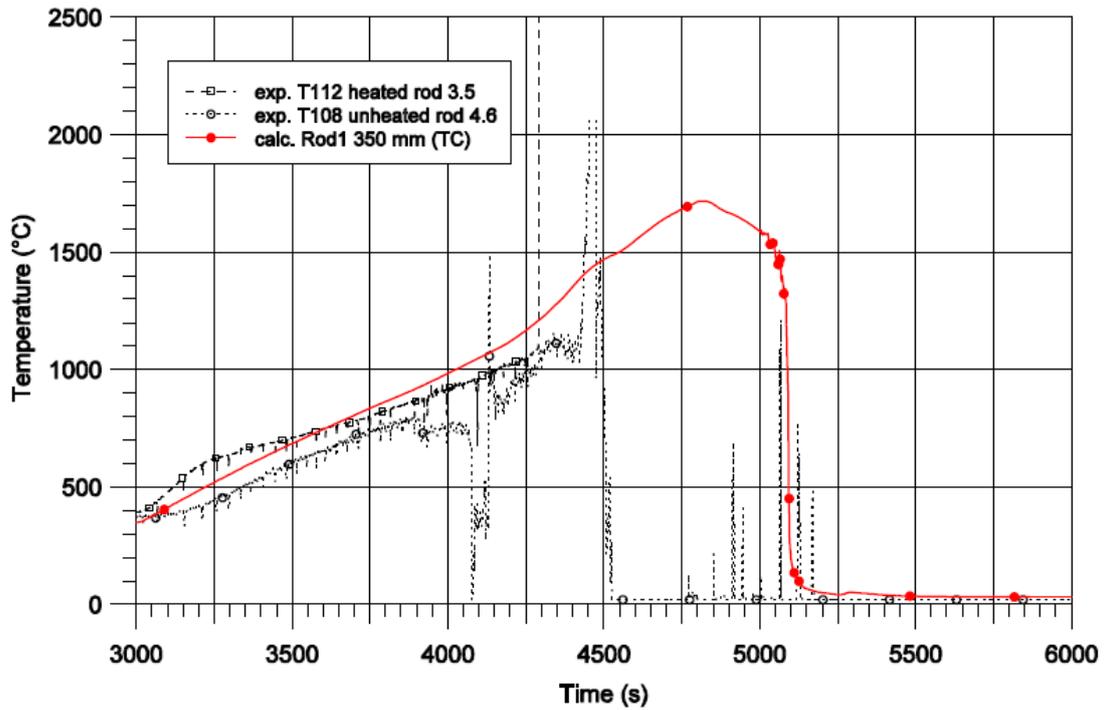


Abb. 2.62 Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 350 mm Höhe

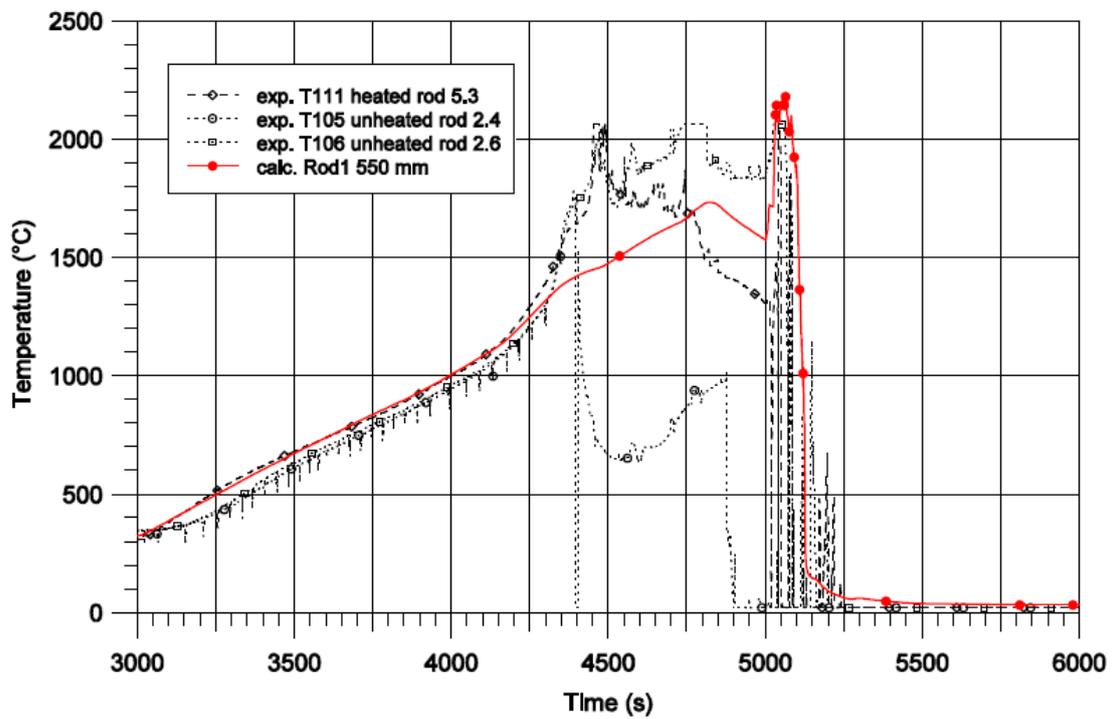


Abb. 2.63 Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 550 mm Höhe

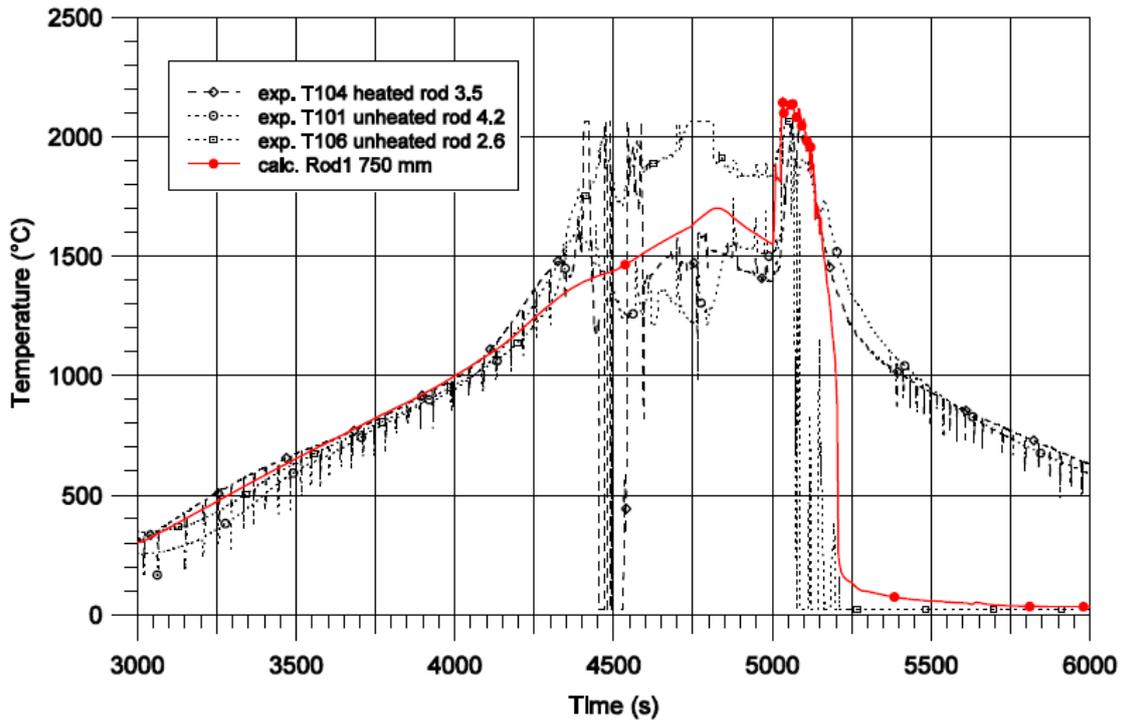


Abb. 2.64 Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 750 mm Höhe

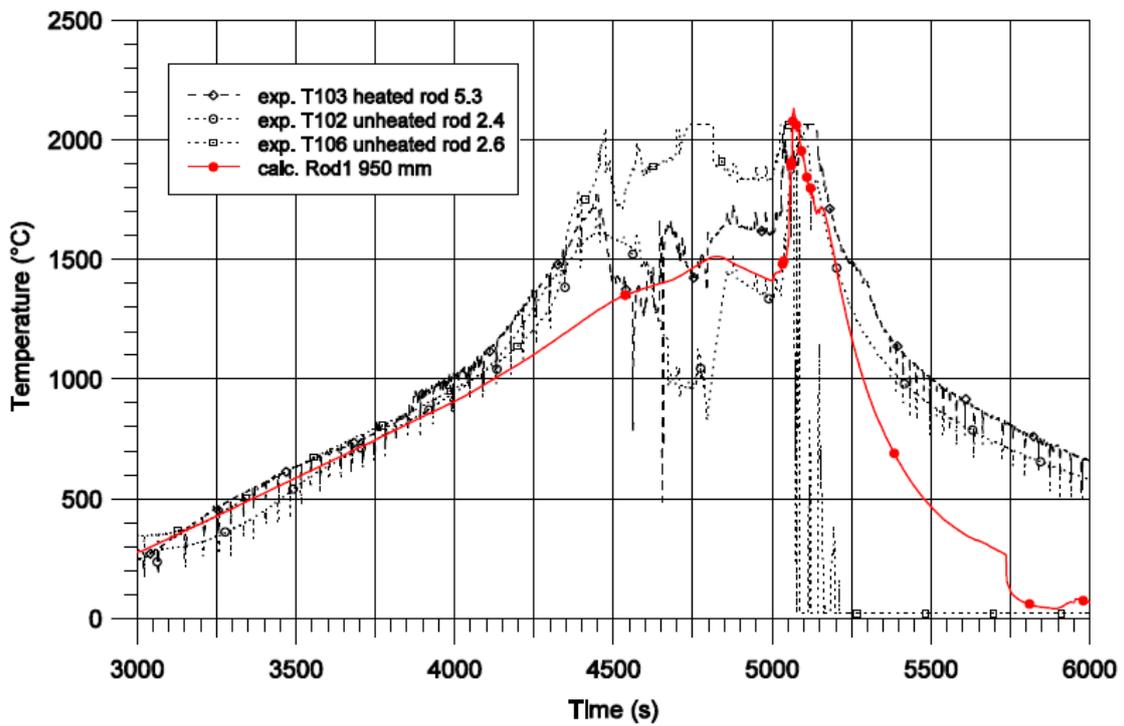


Abb. 2.65 Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 950 mm Höhe

Nach dem Beginn der Einspeisung erfolgt an allen Positionen oberhalb der Bündelmitte ein plötzlicher Temperaturanstieg, der im Einklang mit dem Signal der Wasserstoffzeugung auf eine starke Oxidationsreaktion des Dampfes mit dem Zirkon der Hüllrohre hinweist, bis der ansteigende Wasserspiegel die endgültige Kühlung einleitet. Das thermische Verhalten des Bündels in der Quenchphase wird durch die Simulation gut nachgebildet: durch die exotherme Reaktion des Hüllrohrmaterials an den Positionen der oberen Bündelhälfte werden in Deckung mit den Messdaten Temperaturen bis ca. 2.200 °C erreicht. Die Abkühlung erfolgt in Versuch und Simulation in 550 mm Höhe in Einklang mit dem Wasserspiegel sehr plötzlich (Abb. 2.63). Die für 750 mm Höhe dargestellten Verläufe (Abb. 2.64) zeigen 3 Messpositionen, die sich sehr unterschiedlich verhalten, da die Rods 3.5 und 4.2 offensichtlich gerade nicht mehr im Bereich des Wasserspiegels (0,73 m) liegen, wogegen Rod 2.6 noch von der direkten Wasserkühlung erfasst wird. In der Nachrechnung liegt die Zone noch gerade im Bereich der Quenchfront und wird daher ähnlich der Messstelle von Rod 2.6 abgekühlt. Die eindeutig über dem Wasserspiegel liegende 950 mm Position (Abb. 2.65) zeigt im Vergleich mit den Messdaten der Rods 2.4 und 5.3 eine etwas zu schnelle Abkühlung, wobei jedoch aus dem Verlauf der Abkühlung zu erkennen ist, dass im Test und in der Rechnung Dampfkühlung vorliegt. Unter Einbeziehung der Messstelle von Rod 2.6, die vermutlich punktuell durch Wassertropfen abgekühlt wird, stellt der berechnete Verlauf eine Mittelung der Messdaten dar.

Temperaturen der Brennelementeinfassung (Kastenwand)

In Abb. 2.66 bis Abb. 2.69 sind die Temperaturen der Kastenwand in den Höhen 350 mm, 550 mm, 750 mm und 950 mm aufgetragen. Die Messdaten und Rechenergebnisse zeigen auch hier generell eine sehr gute Übereinstimmung im Zeitbereich der Aufheizung bis ca. 4.000 s. Die in der transienten Phase bei den Hüllrohrtemperaturen im Versuch aufgetretene Eskalation ist jedoch für die Kastenwand deutlich weniger ausgeprägt, während die berechneten Kastenwand-Temperaturen das thermische Verhalten der Hüllrohrtemperaturen nachbilden, was auf einen zu großen Einfluss der Strahlung hinweist. Die Temperatureskalation nach dem Beginn der Einspeisung wird dagegen für alle Höhen mit großer Genauigkeit wiedergegeben. Bei der Abkühlung der Brennelementeinfassung zeigt sich, dass der gemäß dem Wasserspiegelanstieg und der damit verknüpften Quenchfrontbewegung berechnete Temperaturabfall im Vergleich zu den Messdaten etwas zu schnell erfolgt. Eine Verlangsamung der Quenchfront für die SWR-Komponenten im Rahmen der Bandbreite der empfohlenen Eingabewerte (niedrigerer Wert für CQHTWB) zeigte jedoch, dass durch den verlangsamten

Beginn der Abkühlung und das dadurch längere Andauern der Oxidationsphase ein zu hoher Wert der Wasserstoffproduktion resultiert. Da die Methode des Anhebens des Quenchzylinders und der dadurch evtl. eingeschränkte Kontakt des Wassers in verschiedenen Bereichen der Anordnung evtl. Einfluss auf die Kühlung hatte, wird die Übereinstimmung hier als zufriedenstellend betrachtet. Die Abkühlung mittels Quenchzylinder ist jedoch reaktoruntypisch; eine zuverlässigere Möglichkeit der Überprüfung des thermischen Verhaltens der SWR-Komponenten wird in dem bei KIT geplanten SWR-Quenchversuch gesehen.

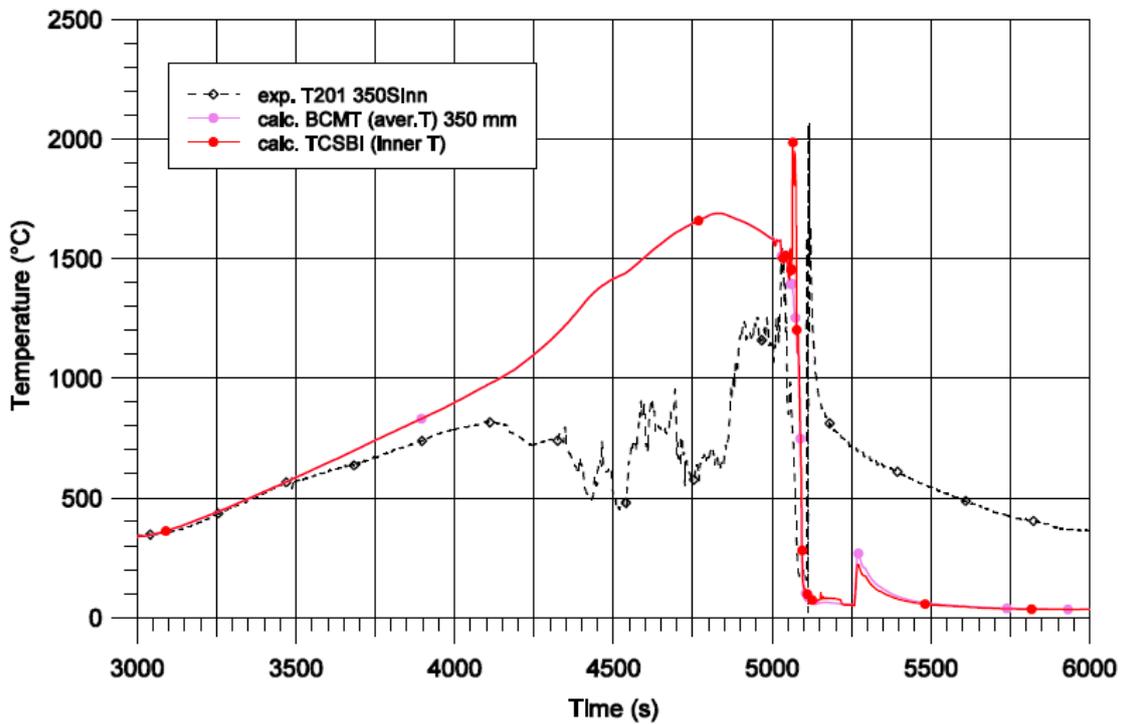


Abb. 2.66 Temperatur der Kastenwand in 350 mm Höhe

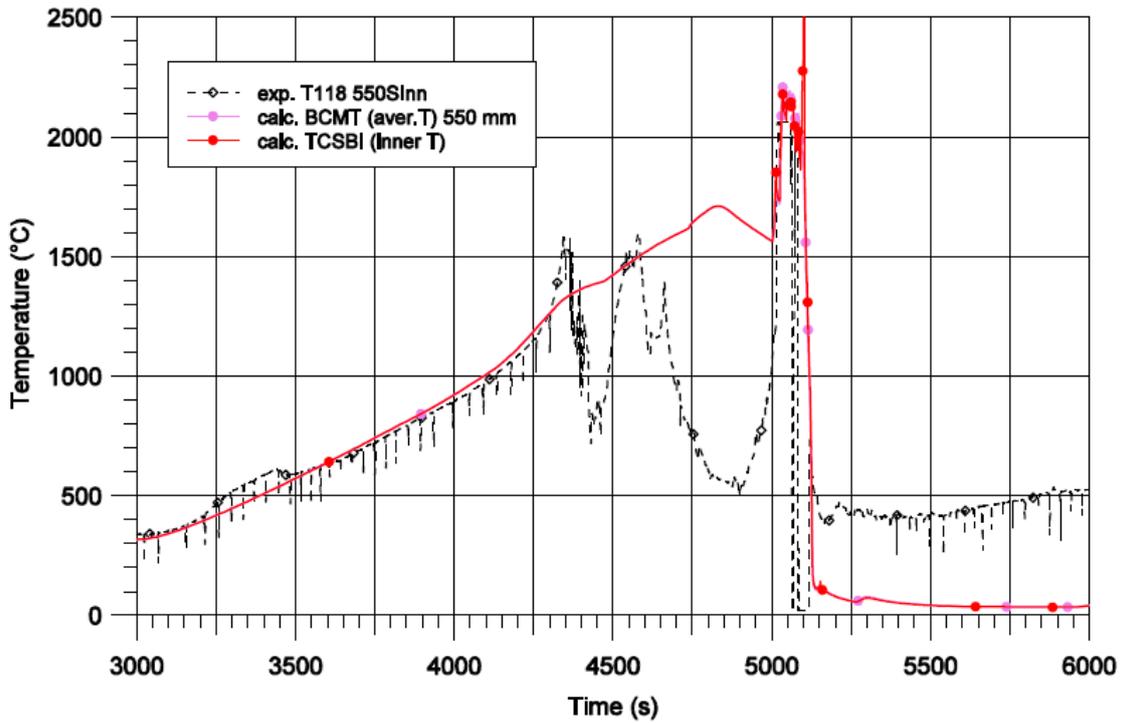


Abb. 2.67 Temperatur der Kastenwand in 550 mm Höhe

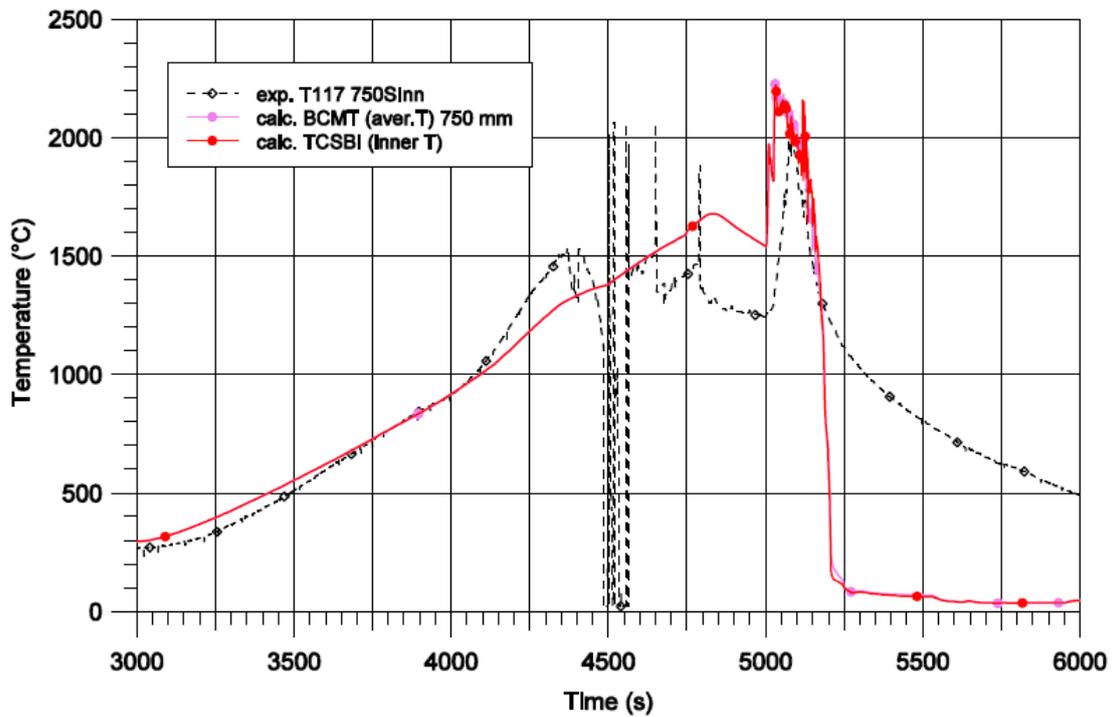


Abb. 2.68 Temperatur der Kastenwand in 750 mm Höhe

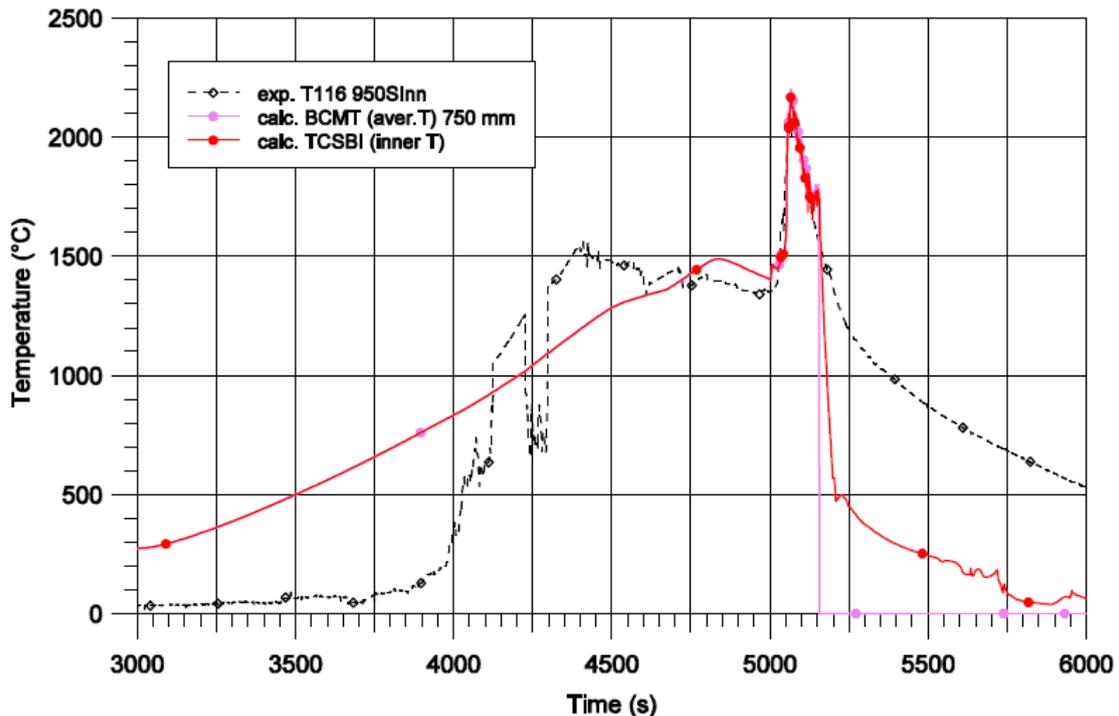


Abb. 2.69 Temperatur der Kastenwand in 950 mm Höhe

Temperaturen des Absorberblatts

Abb. 2.70 bis Abb. 2.73 zeigen die Gegenüberstellung der gemessenen und berechneten Absorberblatt-Temperaturen auf den Höhen 350 mm, 550 mm, 800 mm und 950 mm. Während die Aufheizung der Kastenwandtemperaturen bis 4.000 s in guter Übereinstimmung mit Messdaten berechnet wird, zeigt die Simulation für das Absorberblatt in diesem Zeitbereich für alle Höhen etwas überschätzte Temperaturen an. Diese Abweichung ist vermutlich auf einen zu großen Einfluss der Strahlung in der als rotationssymmetrisch angenommenen Versuchsanordnung zurückzuführen (s. Kapitel 2.4.2.2.3). Im weiteren Verlauf der Transiente treten nach dem Beginn des Abschmelzens bei den gemessenen Temperaturverläufen starke Schwankungen auf, während die Absorberblatt-Temperaturen in der Simulation mit geringer Verzögerung den Kastenwand-Temperaturen folgen. Nach 4.750 s zeigt die für das Absorberblatt berechnete Durchschnittstemperatur ABMT in 550 und 800 mm Höhe bzw. nach 4.900 s in 950 mm Höhe das Versagen der SWR-Komponente an (Temperatur wird auf 0 gesetzt) und nur die berechneten Oberflächentemperaturen (ABMTS) können weiterhin mit den Messdaten verglichen werden. Nach dem Beginn der Wassereinspeisung sind die Schwankungen der Oberflächentemperatur in der Simulation mit denen der Messdaten vergleichbar. Nach dem Erreichen des endgültigen Wasserstands gleicht sich das Absorberblatt im Bereich unter dem Wasserspiegel in 350 und 550 mm Höhe der

Temperatur des Kühlwassers an, wogegen über dem Wasserspiegel (800 und 950 mm Höhe) in Übereinstimmung mit den Messwerten ein langsames Absinken der Oberflächentemperatur festzustellen ist.

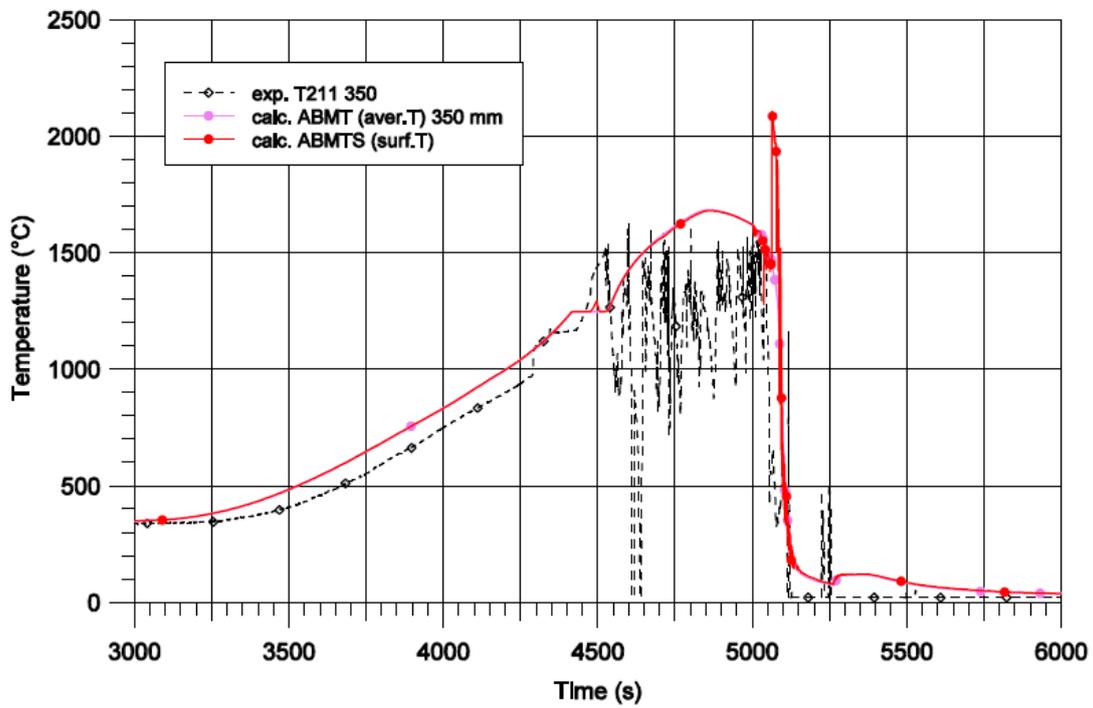


Abb. 2.70 Temperatur des Absorberblattes in 350 mm Höhe

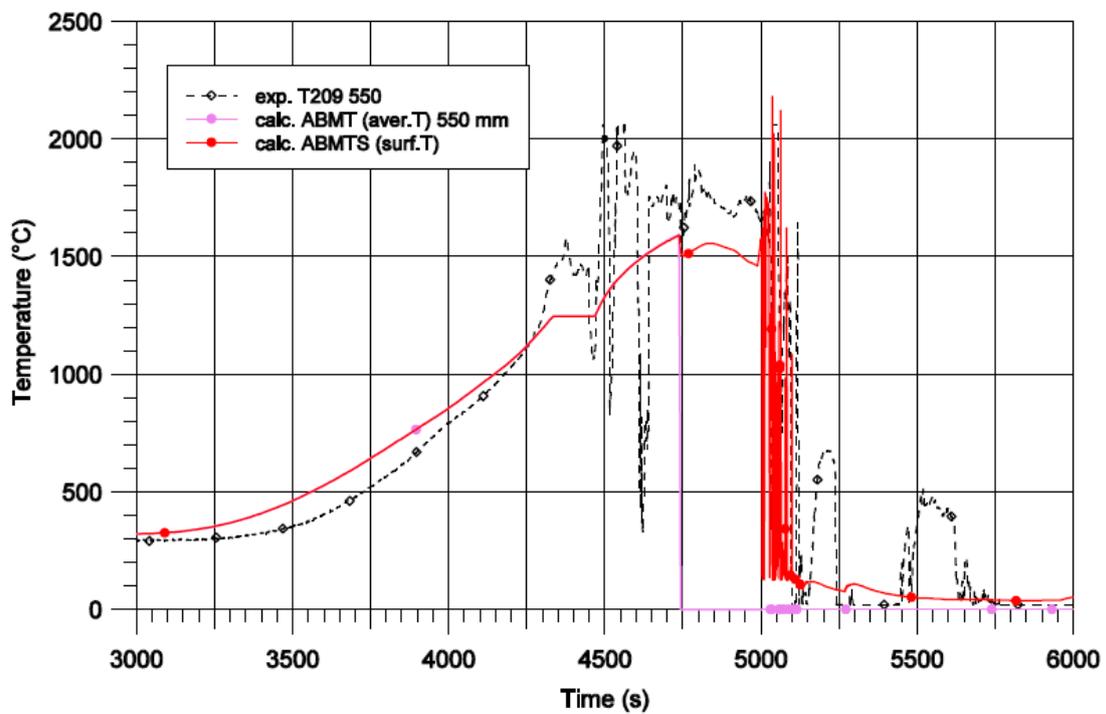


Abb. 2.71 Temperatur des Absorberblattes in 550 mm Höhe

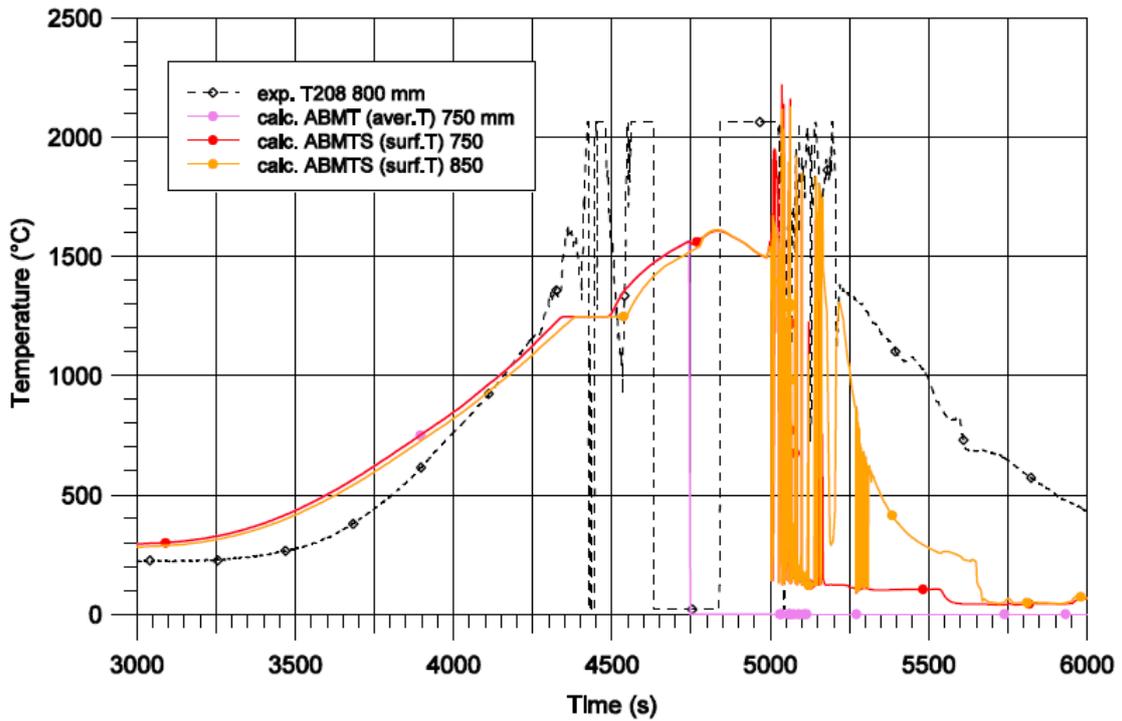


Abb. 2.72 Temperatur des Absorberblattes in 800 mm Höhe

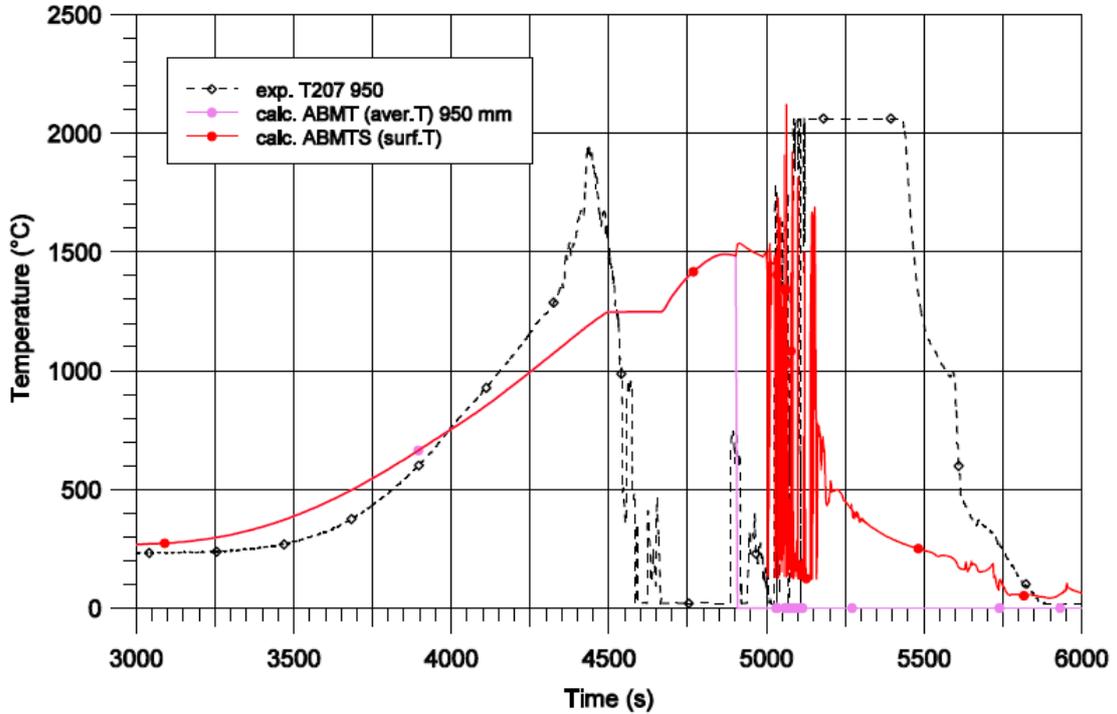


Abb. 2.73 Temperatur des Absorberblattes in 950 mm Höhe

2.4.2.3.3 Wasserstoffherzeugung

Im Versuch wird der bei der Zirkon-Dampf-Reaktion erzeugte Wasserstoff mittels Massenspektrometer gemessen, wobei nur der relative H_2 -Anteil in der Mischungskammer direkt als Messwert zur Verfügung gestellt wurde. Hinsichtlich des erzeugten Wasserstoffs sind verschiedene Angaben zu finden, die zwischen 96 g /ERD 09/ und 210 g /MAR 14/ schwanken. Der niedrige Wert von 96 g für das ganze Testbündel stammt aus einer nicht nachvollzogenen Umrechnung der Oxidationsleistung; der hohe Wert von 210 g resultiert aus der Interpretation des relativen H_2 -Anteils in der Mischungskammer als H_2 -Erzeugungsrate /MAR 14/. Von den Experimentatoren wurde in /SCH 92/ und /SEP 09/ das in Abb. 2.48 gezeigte Diagramm der H_2 -Erzeugungsrate zur Verfügung gestellt, das mit 150 g/s einen verlässlichen Wert der integralen Wasserstoffherzeugung angibt. Dieser Verlauf der H_2 -Erzeugungsrate wird im Folgenden für den Vergleich mit den Rechendaten verwendet.

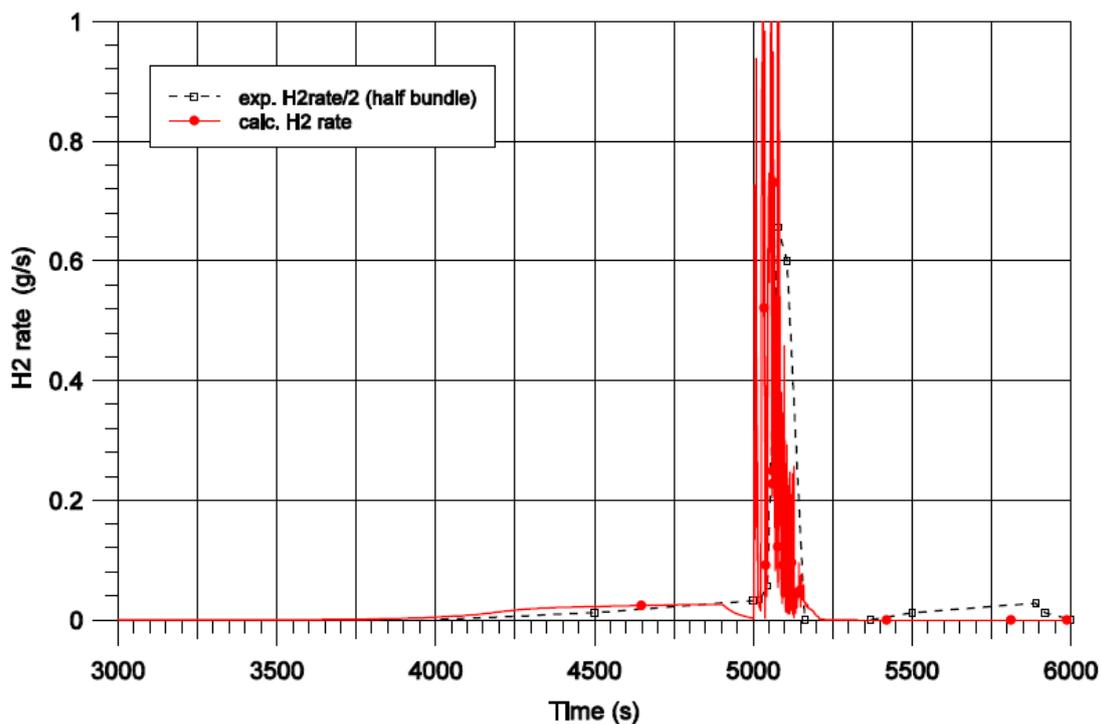


Abb. 2.74 Rate der Wasserstoffherzeugung

Die durch die Oxidation verursachte Wasserstoffherzeugung ist in den Darstellungen Abb. 2.74 und Abb. 2.75 für den Versuch und die Simulation abgebildet, wobei die experimentellen Werte für den Vergleich halbiert wurden, da in der Rechnung nur die halbe Anordnung modelliert ist. Während bei einigen der bisherigen Nachrechnungen der größte Anteil der Oxidation bereits in der transienten Phase vor Beginn der Was-

sereinspeisung auftritt /STE 00/, /HOF 13/, /MAR 14/, konnte in der vorliegenden Rechnung durch Aufteilung der Dampfströmung auf die TFO's BUNDLE, BWRBYP und BYPASS (s. Kapitel 2.4.2.2.1) die Dynamik der Wasserstoffzeugung in Übereinstimmung mit den Versuchsdaten erreicht werden. Die vor Beginn der Wassereinspeisung generierte Wasserstoffmasse beträgt im Versuch 31 g (halbes Bündel 15,5 g); in der Simulation 18,9 g, sodass in dieser Phase nur eine geringe Überschätzung vorliegt. Die zum Ende der Abkühlung vorliegende Menge von 150 g (halbes Bündel 75 g) wird in der Simulation mit insgesamt 58,4 g noch unterschätzt, dies lässt sich jedoch mit der in der Modellierung noch nicht enthaltenen Berücksichtigung der B_4C -Oxidation für die Absorberelemente erklären.

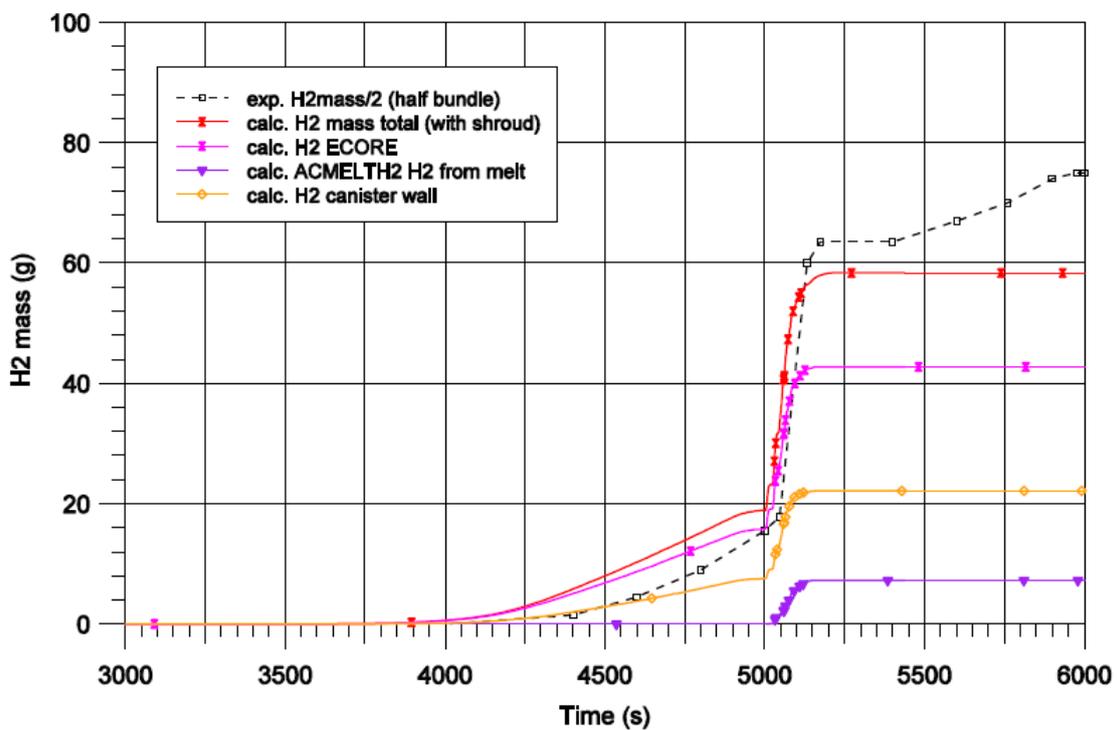


Abb. 2.75 Integrale Wasserstoffzeugung

Zu der in der Nachrechnung insgesamt erzeugten H_2 -Menge von 58,4 g tragen die SWR-Komponenten 22,2 g (38 %) bei (BWACH2). Aus dem ECOPE-Modell ergeben sich insgesamt 42,8 g Wasserstoff aus der Oxidation der Heizstab-Hüllrohre und der Kastenwand. Hierbei haben Schmelze- und Krustenoxidation einen Anteil von 7,3 g (ACMELTH2). Die Aufschlüsselung lässt den Schluss zu, dass 15,6 g der insgesamt erzeugten Wasserstoffmenge der Oxidation der inneren Shroudwand zuzuordnen ist.

2.4.2.3.4 Materialverlagerung

Wie bereits in Kapitel 2.4.2.1 beschrieben, ist für den Versuch ein frühzeitiger Beginn der Verlagerung von eutektischen Schmelzen aus der Wechselwirkung des Absorbermaterials Borkarbid mit dem umgebenden Stahl und die Ansammlung dieser Schmelze im unteren Bündelbereich nachgewiesen /HAG 96/. Die aus /SEP 09/ entnommenen Darstellungen mit den Post-test-Auswertungen der Bündelquerschnitte (Abb. 2.76) zeigen die schwere Zerstörung der Testanordnung in allen Bündelhöhen sowie die völlige Auflösung von Kanisterwand und Absorberelement im Bereich über 500 mm.

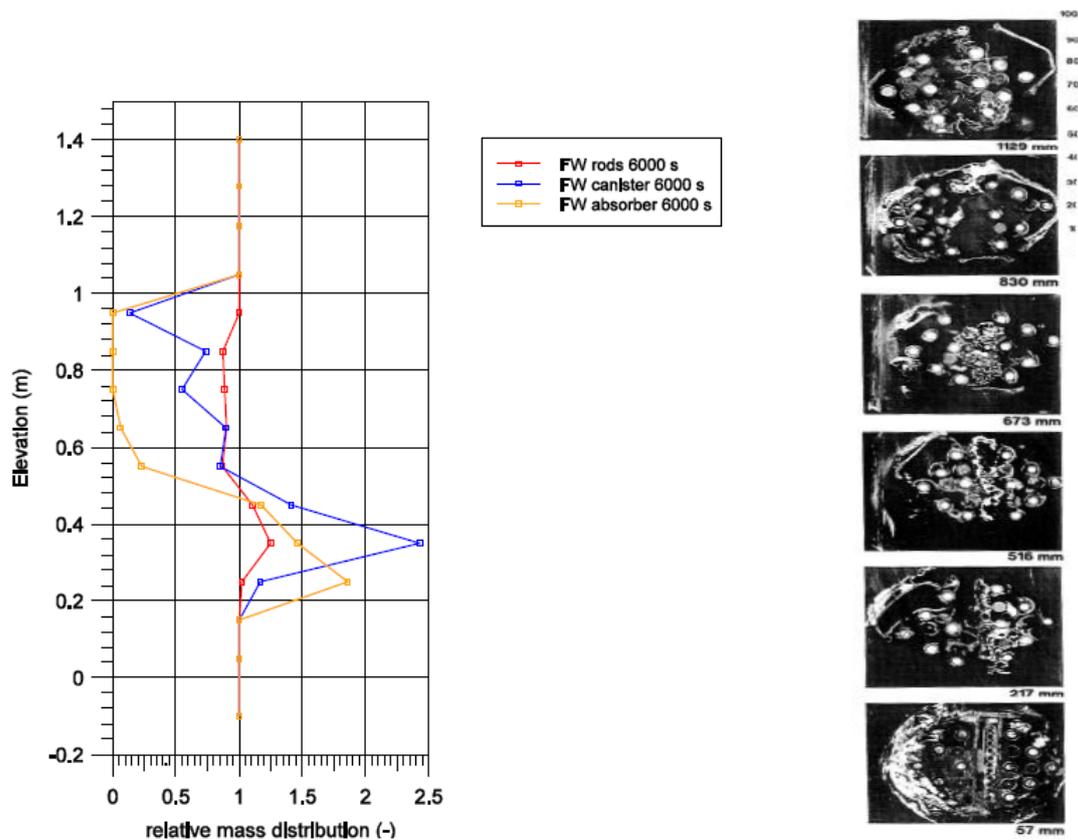


Abb. 2.76 Materialverlagerung von Stabbündel, Kanister und Absorberblatt (rechter Teil aus /SEP 09/)

Für die Rechnung ist der Zustand von Stabbündel, Kanisterwand und Absorberblatt hinsichtlich der Materialverlagerung nach 6.000 s dargestellt. Das Absorbiermaterial ist aus der oberen Hälfte des beheizten Bereichs vollständig nach unten verlagert, während für die Kastenwand eine geringere Abtragung vorliegt. Auch bei den Heizstäben

zeigt die Simulation eine Verlagerung in die untere Bündelhälfte an, allerdings in weit geringerem Ausmaß als es für die SWR-Komponenten berechnet wird.

Somit deckt sich das Ergebnis der Simulation global mit den nachträglichen Untersuchungen des Strömungsquerschnitts im Experiment, wobei jedoch im Versuch die Verlagerung in den Bereich zwischen 0 und 0,2 m erfolgt, in der Rechnung dagegen ist die verlagerte Schmelze in der Höhe zwischen 0,2 und 0,5 m erstarrt. Da die eutektische Reaktion des B₄C mit Stahl und die Wechselwirkung dieser Schmelze mit dem Zirkon der Kanisterwand sowie die Verlagerung dieser Schmelzen in der Modellierung nicht berücksichtigt ist, wird die resultierende Übereinstimmung mit der überwiegenden Verlagerung der SWR-Komponenten in den unteren Bündelbereich als zufriedenstellendes Ergebnis betrachtet.

2.4.2.4 Zusammenfassung und Bewertung

Das Experiment CORA-17 wurde mit dem Rechenprogramm ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A nachgerechnet mit dem Hauptziel, die Kopplung des Quenchmodells mit dem SWR-Modul zu überprüfen, nachdem bei vorausgehenden Nachrechnungen ein inkonsistentes Verhalten bei der Abkühlung des Brennelementkastens festgestellt /HOF 13/ und eine weitere Überprüfung der Quenchphase /MAR 14/ empfohlen wurde.

Das thermohydraulische Verhalten der Anlage während der Aufheizphase und der Phase der Kernzerstörung konnte durch die Aufteilung der Dampfeinströmung auf Bündel und Bypass gut nachgerechnet werden, wobei im Versuch die Querströmung zum Bypass vermutlich wegen der früh auftretenden Blockaden durch die B₄C-Stahl-Schmelze verursacht wurde. In Übereinstimmung mit dem Versuch wird in der Simulation bereits vor Beginn der Wassereinspeisung ein Versagen des Absorberelements und dessen Beginn der Verlagerung aus dem oberen Bündelbereich in die untere Region berechnet.

Ein Hauptziel für die Phase der Wassereinspeisung war es, den im Versuch durch das Anheben des Quenchzylinders erhaltenen Wasserstand mittels der in der Simulation erforderlichen Wassereinspeisung in den Bündelboden richtig nachzubilden, um das Quenchmodell überprüfen zu können. Mit dem Beginn der Wassereinspeisung zeigt sich in der Simulation wie im Versuch eine starke Temperaturskalation bei allen Komponenten der Anordnung aufgrund der exothermen Oxidationsreaktion von Zirkon mit dem entstehenden Dampf. Die gute Übereinstimmung der Reaktionskinetik in den Mo-

dellen mit dem tatsächlichen Verhalten im Versuch zeigt sich neben dem Temperaturverlauf auch in der guten Übereinstimmung der Dynamik der Wasserstofferzeugung, die bisher für die Flutphase überwiegend unterschätzt worden war. Die resultierende Wasserstofferzeugung, die im Endwert noch ca. 20 % unter dem Wert des Versuchs liegt, bestätigt die bisherige Annahme, dass die für SWR-Absorberelemente nicht modellierte Oxidation von Borkarbid eine nicht zu vernachlässigende Rolle spielt.

Aus dem Vergleich der Temperaturverläufe für die Heizstäbe sowie auch für den Bündelkasten und das Absorberelement während der Abkühlphase zeigt sich, dass der Temperaturabfall im unteren Bündelbereich für alle Komponenten in guter Übereinstimmung mit den Messdaten berechnet wird. Für die obere Region des Testbereichs tritt in der Simulation überwiegend eine etwas zu schnelle Abkühlung auf, wobei jedoch zwischen einzelnen Messstellen große Unterschiede vorliegen und die Übereinstimmung im Durchschnitt als zufriedenstellend betrachtet wird. Im Hinblick auf die zu überprüfende Modellierung des Abkühlverhaltens der SWR-Komponenten zeigt sich, dass das Quenchfrontmodell mit den empfohlenen Optionen und Eingabewerten eine Quenchfront berechnet, die in plausibler Weise dem Anstieg des Wasserspiegels folgt. Während die Temperaturen der Kastenwand trotz großer Schwankungen im Dampfgehalt der sich füllenden Zonen ein relativ stabiles Verhalten zeigen, treten bei der Abkühlung des Absorberblatts große Schwankungen im Verlauf der Oberflächentemperaturen auf, die allerdings bei den Messdaten im gleichen Zeitraum ebenfalls zu beobachten sind. Die in /HOF 13/ bemerkten inkonsistenten Temperatursprünge für den Brennelementkasten konnten in der vorliegenden Simulation nicht nachvollzogen werden.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass das Quenchen der Anlage, insbesondere im Hinblick auf die SWR-Bauteile Kastenwand und Absorberblatt in guter Übereinstimmung für den unteren Bündelbereich und in zufriedenstellender Übereinstimmung für den oberen Teil der beheizten Länge berechnet wird. Die bisher festgestellten Abweichungen und Mängel sind vermutlich darauf zurückzuführen, dass der Wasserspiegel nicht entsprechend dem Versuch simuliert worden war bzw. nicht die Oberflächentemperaturen der SWR-Komponenten für den Vergleich verwendet wurden /HOF 13/. Da der Versuch CORA-17 bisher die einzige Möglichkeit darstellt, das Quenchverhalten der SWR-Komponenten zu überprüfen, und hierbei die Kühlung reaktoruntypisch durch das Anheben einer Wasservorlage gegeben war, wird ein für 2019 geplanter SWR-Versuch in der QUENCH-Versuchsanlage zur Klärung der noch bestehenden Unsicherheiten beitragen.

2.5 Erweiterung der Modellierung der Spätphase

Seit den Unfällen in Fukushima Daiichi stehen sogenannte Severe Accident Management (SAM) Strategien verstärkt in Fokus von vielen internationalen Forschungsaktivitäten. Die möglichst realistische Simulation des Verhaltens des geschmolzenen Kernmaterials (Coriums) im unteren Plenum (d. h. in der Spätphase eines Unfalls) ist dabei ein entscheidendes Kriterium, um SAM-Strategien zu beurteilen bzw. zu bewerten. Die Spätphase-Module von ATHLET-CD wurden besonders unter Berücksichtigung der Anforderungen von SAM-Analysen und unter Berücksichtigung neuester Erkenntnisse weiterentwickelt.

2.5.1 Erweiterungen in AIDA

AIDA ist ein eigenes Modul von ATHLET-CD, welches das thermische Verhalten des Coriums nach dessen Verlagerung ins untere Plenum (UP) simuliert. Das Modul ist mit ATHLET-CD über GCSM (General Control Simulation Module) gekoppelt und ermöglicht dadurch sowohl integrale Simulationen (also Reaktorsimulationen) als auch die Durchführung von Stand-Alone Rechnungen, z. B. zur Simulation von Experimenten oder etwa zur Verifizierung und Validierung von Modellen (z. B. /PAN 18a/).

In der bisherigen Version konnte mit AIDA bereits das Verhalten der Schmelze im unteren Plenum bis hin zu einem möglichen Versagen des Reaktorsicherheitsbehälters mit anschließendem Herausfließen der Schmelze ins Containment simuliert werden /PAN 16/. Dabei konnte auch die Stratifizierung des Schmelzepools mit einer metallischen und einer keramischen Schicht berücksichtigt werden. Um realistischere Rechnungen zu ermöglichen, wurde die bisherige vereinfachte Modellierung der Geometrie, der Stratifizierung, der Vorgänge in der metallischen Schicht und des Versagens des Reaktordruckbehälters verbessert und erweitert. Durch diese Verbesserungen konnten jetzt mit der neuen Version bei Anlagensimulationen deutlich bessere Ergebnisse erzielt werden (vgl. Abschnitt 3.1), auch bei Simulationen mit Maßnahmen wie Außenkühlung des Reaktordruckbehälters.

2.5.1.1 Erweiterung der Geometrie

AIDA simuliert das thermische Verhalten des Coriums im unteren Plenum mithilfe von nulldimensionalen Gleichungen, die Reaktordruckbehälterwand wird dagegen zweidimensional aufgelöst. Die Geometrie des unteren Plenums wurde dabei in bisherigen

Versionen stets so vereinfacht, dass das untere Plenum rotationssymmetrisch als Halbkugel angenähert wurde. Die Größe wurde dabei per Eingabe von Radius und Wandstärke definiert. In Fällen, in denen das Volumen der verlagerten Schmelze das Volumen der Halbkugel überstieg, musste daher der Radius vergrößert werden, was in der Folge zu einer unrealistischen Wärmeübertragung führte. In der neuen Version wurde die Geometrie erweitert, so dass nun auch ein zylindrischer Anteil oberhalb der Halbkugel simuliert werden kann (s. Abb. 2.77), was zu deutlich realistischeren Wärmeübergängen und Schmelzehöhen bei der Simulation solcher Fälle führt.

Die Länge des zylindrischen Teils kann per Eingabe vom Anwender definiert werden. Die Definition der Geometrie erfolgt somit noch immer einfach, d. h. mit lediglich drei Angaben (Radius, Zylinderhöhe, Wandstärke). Die Wandstärke wird dabei entlang der definierten U-Form konstant gehalten. Die Verifizierung der neuen geometrischen Modellierung erfolgte im Rahmen eines kleinen AP-1000 Benchmarks, der im EU-Projekt IVMR durchgeführt wurde (siehe Abschnitt 4.4).

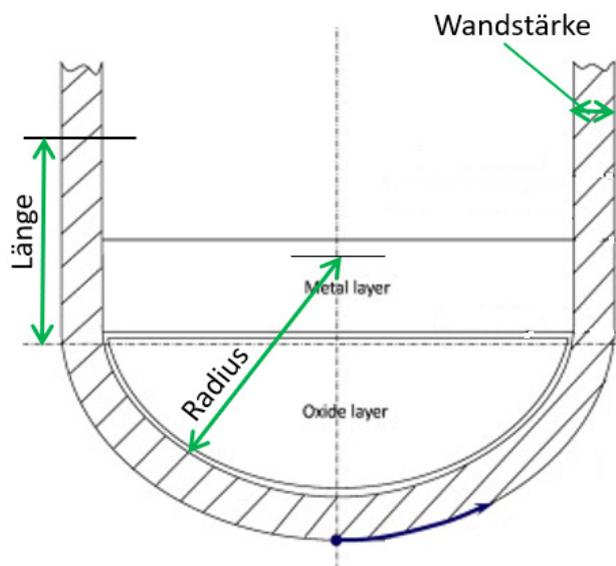


Abb. 2.77 Grundsätzliche Geometrie in AIDA

2.5.1.2 Erweiterungen in der Modellierung von stratifizierten Schmelzepools

Der Verlagerungsprozess ins untere Plenum wird in AIDA nicht im Detail nachgebildet, das geschmolzene Kernmaterial bildet stattdessen sofort einen einzigen Schmelzepool, der als Anfangsbedingung für die Berechnungen dient. Die RASPLAV-Versuche /BEC 01/ haben gezeigt, dass sich der oxidische und der metallische Teil des Schmel-

zepools aufgrund des Dichteunterschieds separieren. Der leichtere metallische Anteil bildet oberhalb des oxidischen Anteils eine metallische Schicht, welche u. a. wegen der besseren Wärmeleitfähigkeit einen wesentlichen Teil der Nachzerfallswärme direkt an die von dieser Schicht benetzten Wandfläche außen fokussieren kann (Fokussing-Effekt /TEO 96/). In Abhängigkeit der benetzten Fläche (also Dicke der Schicht) kann dieser Effekt das Versagen des Reaktordruckbehälters stark beschleunigen.

In AIDA ist ein entsprechendes Zwei-Schicht-Modell implementiert, welches eine schwere oxidische und eine leichtere metallische Schicht berücksichtigt. Dieses Modell wurde weiterentwickelt, um den Anteil der Nachzerfallsleistung in der metallischen Schicht sowie das während des Unfallablaufs möglicherweise abgeschmolzene Wandmaterial berücksichtigen zu können.

Bereits für frühere Versionen wurde das Modell von *Globe und Dropkin* /GLO 59/ für den Wärmeübergang durch die Schicht in einem von unten beheizten und von oben gekühlten Pool implementiert. Das ergänzt die Berechnung des Wärmetransports in die Wand mit der Korrelation von *Churchill und Chu* /TEO 96/. Diese Korrelationen sind jedoch nicht geeignet, um das Verhalten der volumetrischen Wärme in der Schicht zu berücksichtigen. Deshalb wurde jetzt die Energiebilanz für die metallische Schicht aufgestellt und iterativ gelöst, ähnlich wie es für die Berechnung des oxidischen Pools implementiert wurde.

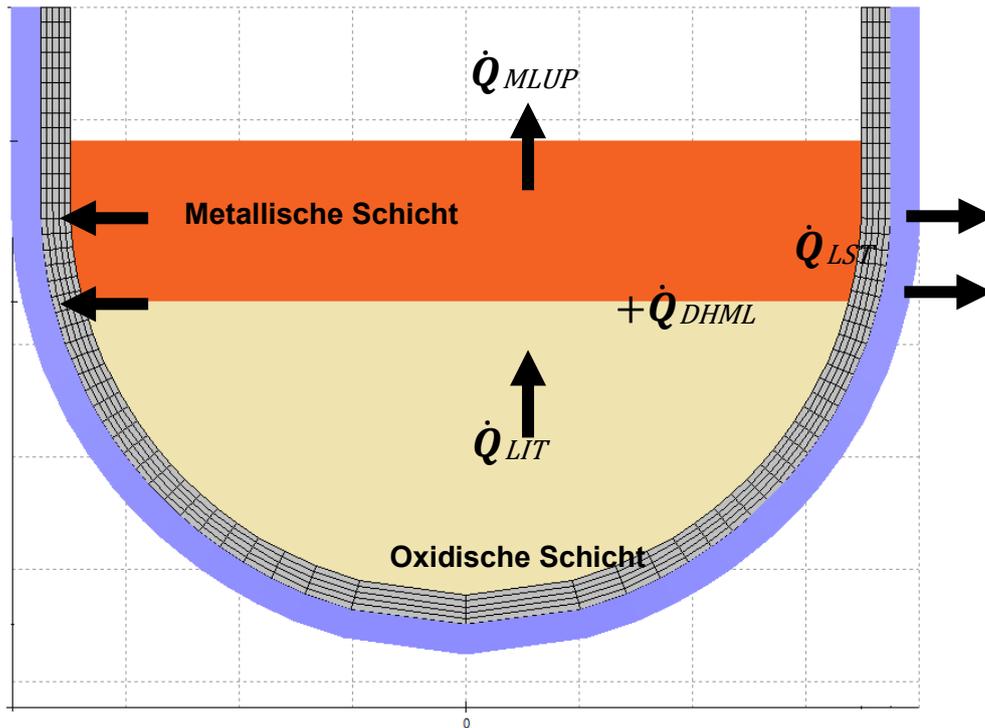


Abb. 2.78 Energiebilanz in der metallischen Schicht

In Abb. 2.78 ist die Energiebilanz der metallischen Schicht grafisch dargestellt. Die zeitliche Enthalpiedifferenz der metallischen Schicht (\dot{H}_{ML}) ergibt sich aus dem Wärmetransport von der oxidischen Schicht (\dot{Q}_{LIT}), der Nachzerfallsleistung in der metallischen Schicht (\dot{Q}_{DHML}), der nach oben abtransportierten Wärme (\dot{Q}_{MLUP}) und des Wärmetransportes in Richtung Wand (\dot{Q}_{LST}):

$$\dot{H}_{ML} = \dot{Q}_{LIT} + \dot{Q}_{DHML} - \dot{Q}_{MLUP} - \dot{Q}_{LST} \quad (2.14)$$

Zwischen der oxidischen und der metallischen Schicht kann die Bildung einer Kruste angenommen werden, wenn die Temperatur der metallischen Schicht unterhalb der Solidus-Temperatur des oxidischen Anteils liegt. In diesem Fall bildet die Kruste einen thermischen Widerstand, welcher den Wärmetransport beeinflusst. Die Möglichkeit diese Kruste zu berücksichtigen wurde entsprechend in AIDA implementiert. Allerdings haben vorläufige Ergebnisse von Experimenten gezeigt, dass sich die Kruste nicht immer bzw. nicht vollständig an dieser Stelle ausbildet. Aufgrund dieser Erkenntnisse und eigener Analysen wird in der aktuellen Version die Krustenbildung am oberen Rand des oxidischen Schmelzepools nicht berücksichtigt.

Zur Berechnung der Wärmeübertragung \dot{Q}_{LIT} wird zuerst die modifizierte Rayleigh-Zahl für die oxidische Schmelze berechnet:

$$Ra = \frac{g Q_{oxid} \beta h^5 \rho c_p}{V \lambda_{ox}^2 \nu_{kin}} \quad (2.15)$$

In Gleichung (2.15) beschreibt g die Gravitationskonstante, Q_{oxid} die Nachzerfallsleistung im oxidischen Anteil, β den Expansionskoeffizienten, h die Höhe des Pools, ρ die Dichte, c_p die Wärmekapazität, V das Volumen der oxidischen Schmelze, λ_{ox} die Wärmeleitfähigkeit des Coriums und ν_{kin} die kinetische Viskosität. Zur Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten stehen für den User fünf unterschiedliche, anhand von Experimenten bzw. von numerischen Simulationen abgeleitete Korrelationen zur Verfügung. Diese sind in Tab. 2.1 dargestellt.

Tab. 2.8 Nusselt-Zahl Korrelationen zur Berechnung des Wärmeübergangs zwischen oxidischer und metallischer Schicht (R ist der Radius des unteren Plenums)

Korrelation	
Kulacki-Emara (Exp.)	$Nu = 0.34 Ra^{0.226}$
Mayinger (Exp.)	$Nu = 0.345 Ra^{0.233}$
Mayinger (Num. Sim.)	$Nu = 0.4 Ra^{0.2}$
Kelkar (Num. Sim.)	$Nu = 0.18 Ra^{0.237}$
Reineke (Num. Sim.)	$Nu = 0.49 Ra^{0.18} \left(\frac{h}{R}\right)^{0.29}$

Der Wärmetransport wird dann mithilfe der Temperatur von oxidischer (T_{oxid}) sowie metallischer Schicht (T_{ml}) wie folgt berechnet:

$$\dot{Q}_{LIT} = \frac{1}{2} \frac{Nu \lambda_{ox}}{\sqrt{4 A_{cp} \pi}} (T_{oxid} - T_{ml}) A_{cp} \quad (2.16)$$

In Gleichung (2.16) beschreibt A_{cp} die Oberfläche des oxidischen Pools. Der Anteil der Nachzerfallsleistung, welche in der metallischen Schmelze freigesetzt wird (\dot{Q}_{DHML}), ist per User-Eingabe festgelegt. Im allgemeinen Expertenkonsens liegt dieser Wert etwa

bei 10 – 15 % der Gesamtnachzerfallsleistung. Der Term \dot{Q}_{LIT} ergibt zusammen mit \dot{Q}_{DHML} die zugeführte Energie in der metallischen Schicht.

Die Wärme in der metallischen Schicht wird durch die Oberfläche und in Richtung Wand abgeführt. Der Wärmetransport in die obere Richtung (\dot{Q}_{MLUP}) wird entweder mit einem konstanten Wärmübergangskoeffizienten (definiert vom Anwender) oder abhängig von den aktuell herrschenden Randbedingungen im unteren Plenum gemäß Gleichung (2.17) berechnet, wobei α_{MLUP} der Wärmeübergangskoeffizient, A_{ml} die obere Fläche der metallischen Schicht und T_{BND} die Temperatur oberhalb der Oberfläche ist.

$$\dot{Q}_{MLUP} = \alpha_{MLUP} (T_{ml} - T_{BND}) A_{ml} \quad (2.17)$$

Abhängig vom Dampfanteil (AV) im unteren Plenum unterscheiden wir zwischen:

- Nasses Szenario (AV < 0.95): Wasservorlage auf der metallischen Schicht
- Trockenes Szenario (AV > 0.95): Kein Wasser im Reaktordruckbehälter

Zur Berechnung der Wärmeübertragung in einem nassen Szenario wird abhängig von den Randbedingungen (Druck und Temperaturen) zwischen Blasensieden und Filmsieden unterschieden. Dafür wird zuerst anhand des Modells von *Kalinin* die Temperatur für den Beginn des Filmsiedens (T_{DNB}) wie folgt bestimmt:

$$T_{DNB} = T_{SAT} + (647 T_{SAT}) \left(0.165 + 2.5 \left(\frac{\rho c_p \lambda_l}{\rho_{ml} c_{pml} \lambda_{ml}} \right)^{0.25} + \frac{\rho c_p \lambda_l}{\rho_{ml} c_{pml} \lambda_{ml}} \right) \quad (2.18)$$

Die Stoffwerte des Wassers (ρ : Dichte, c_p : Wärmekapazität, λ_l : Wärmeleitfähigkeit, T_{SAT} : Siedetemperatur) werden abhängig von den Randbedingungen mit dem vom Code DRUFAN übernommenen Stoffwertpaket /BUR 83/ bestimmt. Die Materialeigenschaften der metallischen Schicht (Index $_{ml}$) sind entweder User-Eingabe (Stand-Alone Rechnung) oder werden vom Modul ECORE übernommen.

Wenn die Temperatur des darüber liegenden Wassers den Wert von T_{DNB} unterschreitet, wird unterkühltes bzw. Blasensieden angenommen. In diesem Fall wird der Wärmeübergangskoeffizient (α_{MLUP}) mithilfe der Kombination von zwei Korrelationen (Glei-

chung (2.21)), von *Fuji und Imura* (Gleichung (2.19)) für unterkühltes Sieden und von *Forster und Zuber* (Gleichung (2.20)) für Blasensieden, berechnet.

$$\alpha_{MLUP}^1 = \frac{\lambda_l}{l_c} (0.56 C + 0.13 ((Gr Pr)^{\frac{1}{3}} - C^{\frac{1}{3}})), \quad C = 6.8 \cdot 10^5 \quad (2.19)$$

$$\alpha_{MLUP}^2 = \frac{\lambda_l}{l_c} 0.15 (Gr Pr)^{1/3} \quad (2.20)$$

$$\alpha_{MLUP} = \alpha_{MLUP}^2 + \alpha_{MLUP}^1 \left(\frac{T_{ml} - T_{SAT}}{T_{ml} - T_{BND}} \right) \quad (2.21)$$

In den obigen Gleichungen ist Gr die Grashof-Zahl, Pr die Prandtl-Zahl und l_c die charakteristische Länge.

Im Falle von Filmsieden wird der Wärmeübergangskoeffizient mit der Korrelation von *Berenson* (α_{MLUP}^{Be}) sowie von *Bromley* (α_{MLUP}^{Br}) mithilfe der *Roetzel-Approximation* modelliert (Gleichung (2.22) bis (2.24)) /ROE 69/.

$$\alpha_{MLUP}^{Be} = 0.425 \left(\frac{\lambda_g^3 g \rho_g (\rho_l - \rho_g) D_{hl}}{h_v (T_{ml} - T_{SAT}) A_x} \right) \text{ mit } A_x = \sqrt{\frac{\sigma_l}{g (\rho_l - \rho_g)}} \quad (2.22)$$

$$\text{und } D_{hl} = (h_v - h_l) + 0.4 c_{pv} (T_{ml} - T_{SAT})$$

$$\alpha_{MLUP}^{Br} = \sigma_{SB} \varepsilon_{ml} (T_{ml}^2 - T_{SAT}^2) (T_{ml} + T_{SAT}) \quad (2.23)$$

$$\alpha_{MLUP} = \alpha_{MLUP}^{Be} + \alpha_{MLUP}^{Br} \left(0.8 + \frac{1}{5} \left(1 + \frac{3 \alpha_{MLUP}^{Be}}{\alpha_{MLUP}^{Br}} \right) \right) \quad (2.24)$$

In diesen Gleichungen beschreibt σ_l die Oberflächenspannung des Wassers, σ_{SB} die Stefan-Boltzmann-Konstante, h_v die spezifische Enthalpie des Wasserdampfes, h_l die spezifische Enthalpie des Wassers und ε_{ml} die Emissivität der metallischen Schicht.

In trockenen Situationen wird die Wärmestrahlung zwischen der metallischen Schicht und der Reaktordruckbehälter-Wand bzw. der Kerngitterplatte berechnet. Der Wärmeübergangskoeffizient wird mithilfe der Emissivität ε_{st} und der Temperatur der Kerneinheiten T_{st} , ermittelt:

$$\alpha_{MLUP} = \sigma_{SB} \left(\frac{1}{\varepsilon_{ml}} + \frac{1}{\varepsilon_{st}} \right)^{-1} (T_{ml}^2 + T_{st}^2)(T_{ml} + T_{st}) \quad (2.25)$$

Der Wärmetransport von der metallischen Schicht in die Wand (\dot{Q}_{LST}) ist ohne Berücksichtigung einer metallischen Kruste modelliert. Die Rayleigh-Zahl zur Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten ergibt sich aus Gleichung (2.15), mit den Materialeigenschaften der metallischen Schicht. Die Nusselt-Zahl ist mit der COPO/BALI-Korrelation /BON-99/ berechnet:

$$Nu = 0.131 Ra^{0.25} \left(\frac{H_{pool}}{R_{RDB}} \right)^{0.19} \quad (2.26)$$

Der Wärmetransport wird dann zwischen der metallischen Schicht und den inneren Nodes der Wand mit deren Temperatur (T_{wi}) und Fläche (A_i), sowie mit der Schichtdicke (H_{ml}), wie folgt ermittelt:

$$\dot{Q}_{LST} = Nu \frac{\lambda_{ml}}{H_{ml}} (T_{ml} - T_{wi}) A_i \quad (2.27)$$

Aus der Energiebilanz (Gleichung (2.14)) wird die Temperatur der metallischen Schicht in jedem Zeitschritt iterativ berechnet.

Des Weiteren wurden in AIDA neue Ausgabegrößen bereitgestellt, um die Entwicklung der Prozesse in der metallischen Schicht besser verfolgen zu können. Diese Variablen beschreiben

- den Wärmetransport zwischen oxidischer und metallischer Schicht,
- den Wärmetransport zwischen metallischer Schicht und der Reaktordruckbehälter-Wand,
- das Volumen und
- die Temperatur der metallischen Schicht.

2.5.1.3 Modellierung des sukzessiven Wandabschmelzens

AIDA wurde außerdem um ein Modell zum sukzessiven Abschmelzen der Wand erweitert. Die hierfür notwendigen Entwicklungsarbeiten umfassten

- die Umstellung der Nodalisierung der Reaktordruckbehälter-Wand,
- die Erweiterung der Wärmeleitung in der Wand in axiale Richtung,
- die Implementierung eines Modells für das Abschmelzen einzelner Wandelemente,
- die Bereitstellung neuer Ausgabegrößen sowie
- die Implementierung eines neuen Versagensmodells, welches die aktuelle Wandstärke berücksichtigt.

In der neuen Version von AIDA wird die Reaktordruckbehälter-Wand unter Verwendung des Anwender-Inputs (radiale (N_r) und axiale (N_t) Node-Anzahl) zur Berechnung der Wärmeleitung ähnlich zur früheren Version /BAL 12/ diskretisiert. Die wesentlichen Unterschiede sind, dass in der neuen Version die gesamte definierte Geometrie (unabhängig von der Höhe der Schmelze sowie der Kopplungsart) mit der vorgegebenen Node-Anzahl aufgeteilt wird, und diese Aufteilung während der gesamten Simulation konstant bleibt. Des Weiteren wurde die maximale Anzahl der Nodes erhöht.

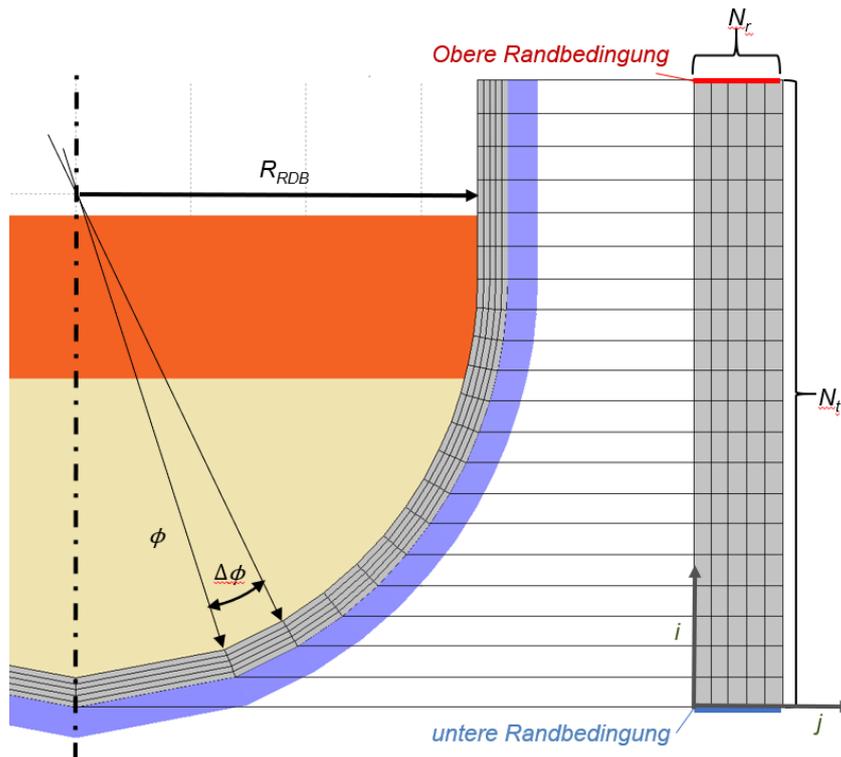


Abb. 2.79 Nodalisierung der Reaktordruckbehälterwand

Die halb-sphärische Behälterwand mit einem Radius R_{RDB} kann mithilfe eines Zylinders abgebildet werden. Dieser kann dann mit der zylindrischen Behälterwand oberhalb der Halbkugel erweitert werden (siehe Abb. 2.79). Die Manteloberfläche des entstandenen Zylinders wird dann entsprechend der axialen Node-Anzahl (N_t) gleichmäßig aufgeteilt. Die Aufteilung des halb-sphärischen Teils der Behälterwand erfolgt bei steigender Höhe mit immer kleineren Winkeln ($\Delta\phi$) sodass die Flächen weiterhin konstant bleiben. In radialer Richtung wird die Behälterwand wiederum gleichmäßig nodalisiert (N_r Nodes). Somit wird die Behälterwand auf $N_r \times N_t$ gleichmäßige Volumen, welche Kreisringen entsprechen, aufgeteilt und zwar jeweils mit einer Länge L_n und einer Höhe H_n . Die Nodes werden in axialer Richtung von unten ($i = 1$) nach oben ($i = N_t$), und in radialer Richtung von innen ($j = 1$) nach außen ($j = N_r$) nummeriert. Diese Nodalisierung wird während der gesamten Simulation beibehalten, um die Berechnung von wegschmelzenden Volumen berücksichtigen zu können sowie um mögliche zukünftige Kopplungen mit anderen Modellen (z. B. HECU von ATHLET) zu ermöglichen.

Die Wärmeleitungsgleichung in der Wand wurde in bisherigen Versionen numerisch, mit Hilfe eines expliziten Finite-Differenzen-Verfahrens, jedoch nur in radialer Richtung gelöst. Dieses Verfahren wurde so ergänzt, dass auch die axiale Wärmeleitung berücksichtigt wird. Die Enthalpieänderung in einem Volumen ($\dot{H}_{N(i,j)}$) wird durch Sum-

mierung des radialen Wärmetransports vom linken ($\dot{Q}_{(j-1,j)}$) und vom rechten ($\dot{Q}_{(j+1,j)}$) Nachbarerelement sowie des axialen Wärmetransports vom oberen ($\dot{Q}_{(i+1,i)}$) und vom unteren ($\dot{Q}_{(i-1,i)}$) Nachbarerelement ermittelt:

$$\dot{H}_{N(i,j)} = \dot{Q}_{(j-1,j)} + \dot{Q}_{(j+1,j)} + \dot{Q}_{(i-1,i)} + \dot{Q}_{(i+1,i)} \quad (2.28)$$

Damit ergibt sich für die Temperaturänderung in einem mittleren Volumenelement:

$$\begin{aligned} \frac{dT_{i,j}}{dt} = & \left(\frac{H_n}{2L_n} (\lambda_{i,j} + \lambda_{i,j-1}) (T_{i,j-1} - T_{i,j}) \right. \\ & + \frac{H_n}{2L_n} (\lambda_{i,j} + \lambda_{i,j+1}) (T_{i,j+1} - T_{i,j}) \\ & + \frac{L_n}{2H_n} (\lambda_{i,j} + \lambda_{i-1,j}) (T_{i-1,j} - T_{i,j}) \\ & \left. + \frac{L_n}{2H_n} (\lambda_{i,j} + \lambda_{i+1,j}) (T_{i+1,j} - T_{i,j}) \right) / (\rho L_n H_n c_p) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Die Berechnung erfolgt unter Ausnutzung der Symmetriebedingungen, d. h. nur die Hälfte des Querschnitts wird nodalisiert und berechnet. Der Wärmestrom in die untere und obere Randbedingung (Abb. 2.79) ist gleich 0 aus Gründen der Symmetrie (unten) bzw. wegen adiabatischer Annäherung (oben). Die Berechnung der eingeführten Wärme an der Innenseite der Wand (von der Kruste und der metallischen Schicht) sowie der weggeführten Wärme an der Außenseite der Wand bleibt unverändert.

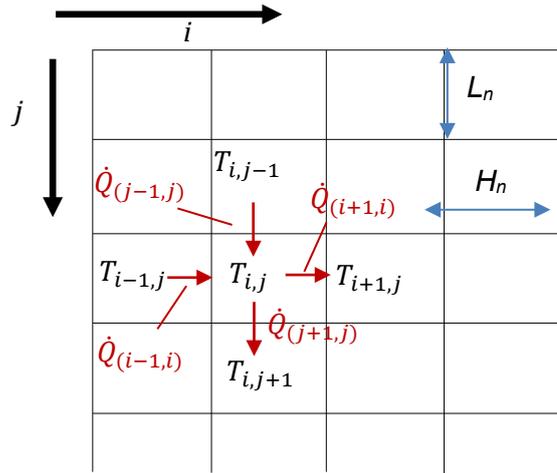


Abb. 2.80 Nodalisierung der Wand für das Finite-Differenzen-Schema

Wenn die Temperatur in einem Volumen die Schmelztemperatur der Reaktordruckbehälter-Wand (in der aktuellen Version auf 1.600 K festgelegt) übersteigt, werden in AIDA die Schmelzprozesse aktiviert. Die Temperatur des Nodes wird bei 1.600 K festgehalten und der Anteil der Wärme, welcher die Überhitzung verursachen würde, wird in einem Vektor gespeichert ($\dot{Q}_{inkr(i,j)}$):

$$\dot{Q}_{inkr(i,j)} = V_n \rho_{st(i,j)} c_{pst(i,j)} T_{inkr} \quad (2.30)$$

Hier bezeichnet V_n das Volumen, $\rho_{st(i,j)}$ die Dichte, $c_{pst(i,j)}$ die Wärmekapazität des Nodes in Position (i,j) und T_{inkr} den Temperaturunterschied zwischen der berechneten Temperatur und der Schmelztemperatur. Wenn $\dot{Q}_{inkr(i,j)}$ die Umwandlungsenthalpie ($Q_{lat(i,j)}$ in Gleichung (2.31) erreicht bzw. übersteigt, wird die Node als geschmolzen betrachtet.

$$Q_{lat(i,j)} = V_n \rho_{st(i,j)} L_{spec} \quad (2.31)$$

In dieser Gleichung beschreibt L_{spec} die spezifische latente Wärme, welche in AIDA mit einem Wert von 270 kJ/kg (aus /KIR 06/) als konstant gesetzt ist.

Nachdem ein Volumenelement der Wand geschmolzen ist, wird dieses Volumen zu dem metallischen Anteil hinzugefügt sowie zu dem freien Volumen des unteren Ple-

nums addiert, d. h. das Corium füllt den frei werdenden Raum aus. Dieser Schmelzprozess der Wand ist in Abb. 2.81 schematisch dargestellt.

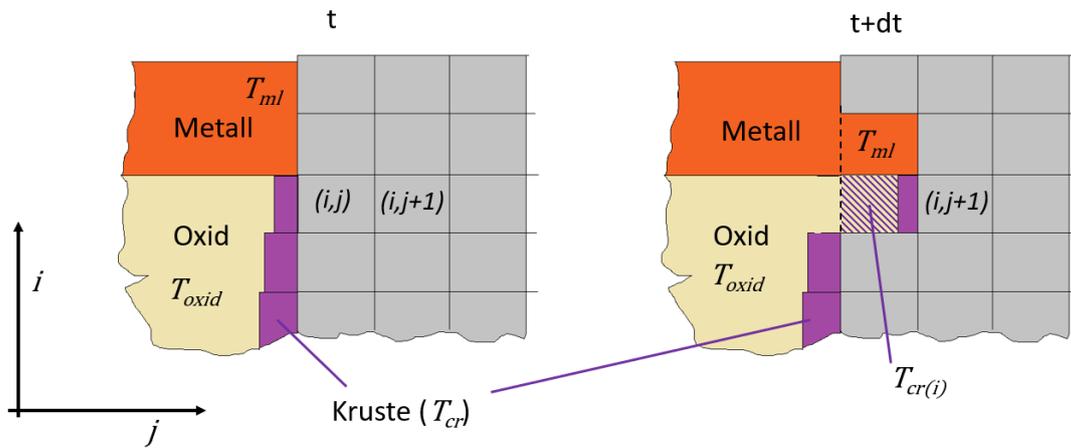


Abb. 2.81 Modellierung des Wandabschmelzens

Wenn das geschmolzene Wandelement (mit der Koordinaten (i,j) in Abb. 2.81) unterhalb der metallischen Schicht liegt, wird der frei werdende Raum mit oxidischer Schmelze ausgefüllt. In diesem Fall wird an der neuen radialen Kontakt-Fläche weiterhin eine Krustenbildung modelliert. Das bedeutet, dass die Krustenbildung zwischen der Fläche des neuen inneren Elements und der oxidischen Schmelze berechnet wird, wie im rechten Teil der Abbildung zu sehen ist. Die Krustenbildung in axialer Richtung (j) wird zwar nicht direkt berechnet, aber für die axiale Wärmeleitung wird die in dem geschmolzenen Element vorhandene Krustentemperatur verwendet ($T_{cr(i)}$). Wenn das geschmolzene Element hingegen in Höhe der metallischen Schicht liegt, wird das Volumen von der metallischen Schmelze ausgefüllt (weiterhin ohne Krustenbildung).

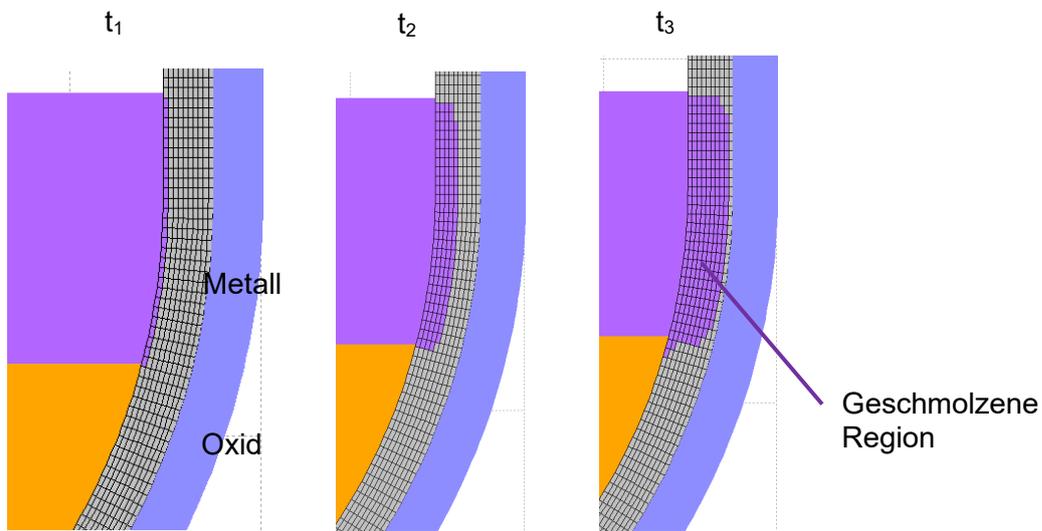


Abb. 2.82 Wandabschmelzen in einer Beispielrechnung zu drei Zeitpunkten ($t_1 < t_2 < t_3$)

Die Modellierung des Wandabschmelzens wurde in Simulationen getestet (sowohl das untere Plenum mit AIDA stand-alone als auch Reaktorfälle mit ATHLET-CD insgesamt). Abb. 2.82 zeigt ein Beispiel mit dem zeitlichen Ablauf des Wandabschmelzens, dargestellt mit CView (Arbeiten zur Erweiterung der Visualisierung sind in Abschnitt 3.3.1 beschrieben). In diesem Fall ist der Fokussing-Effekt gut sichtbar (beim Fokussing-Effekt geht ein wesentlicher Teil der Nachzerfallswärme durch die metallische Schicht an die Wand /TEO 96/). Abb. 2.83 zeigt zwei weitere Beispiele, bei denen das Verhalten des unteren Plenums eines AP1000 bzw. eines generischen Druckwasserreaktors untersucht wurde.

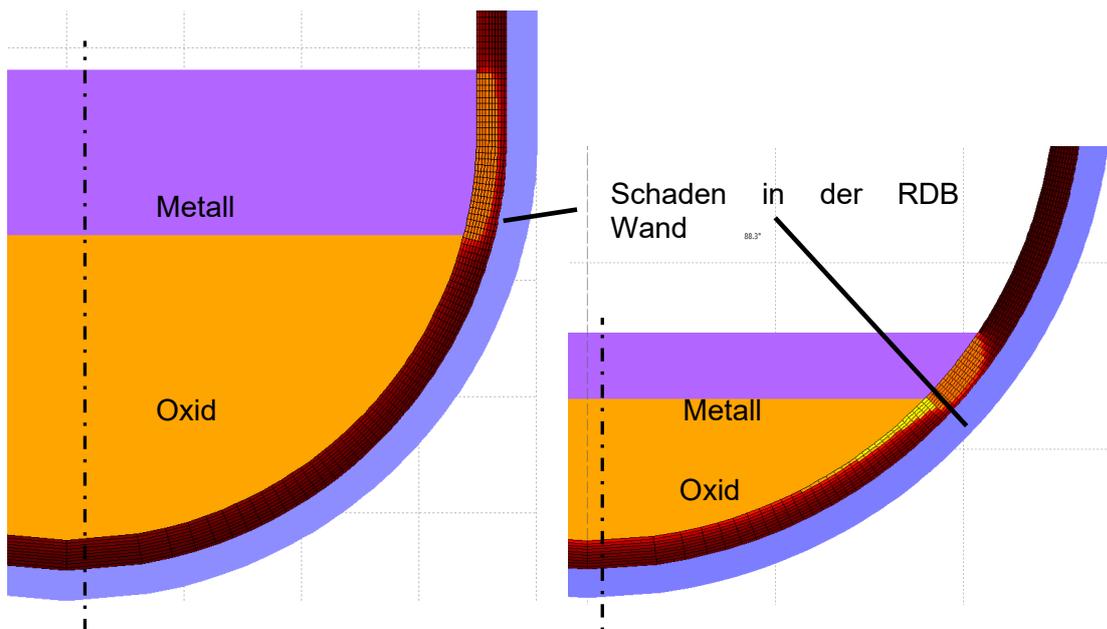


Abb. 2.83 Temperaturverteilung in der Reaktordruckbehälter-Wand (links: AP1000, rechts: generischer Druckwasserreaktor)

Die Temperaturverteilung in Abb. 2.83 zeigt in beiden Fällen gut den entstandenen Schaden in der Reaktordruckbehälter-Wand. Der Fokussing-Effekt ist in beiden Fällen dominant, dennoch zeigen diese zwei Ergebnisse deutlich wie stark das Wandabschmelzen bzw. das entstandene Schadensbild von der Corium-Konfiguration (Schichtdicke, Leistung usw.) abhängt. Weitere Ergebnisse von Simulationen mit dem neuen Modell befindet sich in /PAN 18/.

Weitere Arbeiten zur Verifikation des Modells erfolgten im Rahmen eines Benchmark-Tests im EU-Projekt IVMR (siehe auch Kapitel 4.4). Im Benchmark-Test wurden die Ergebnisse von sechs Codes (darunter ATHLET-CD mit der neuen Version von AIDA) miteinander verglichen, um Unterschiede bzw. Schwächen in der Modellierung zu identifizieren. Der Benchmark-Test konzentrierte sich dabei auf die Modellierung der Prozesse im unteren Plenum. Die transienten Rechnungen wurden mit stratifiziertem Schmelzpool und intakter Reaktordruckbehälter-Wand gestartet. Der Testfall wurde solange berechnet, bis durch die gebildete Kruste ein stabilisierter Zustand erreicht wurde, d. h. die Wandtemperaturen sich nicht mehr verändert haben. Eine der wichtigsten Vergleichsgrößen war die nach dem Erreichen des stabilisierten Zustands verbleibende Wandstärke. Abb. 2.84 zeigt die berechneten Wandprofile der sechs Codes. Der Vergleich zeigt deutlich, dass die neue AIDA-Version mit dem neu entwickelten Wandabschmelze-Modell und dem erweiterten Metallschicht-Modell plausible Ergebnisse liefert.

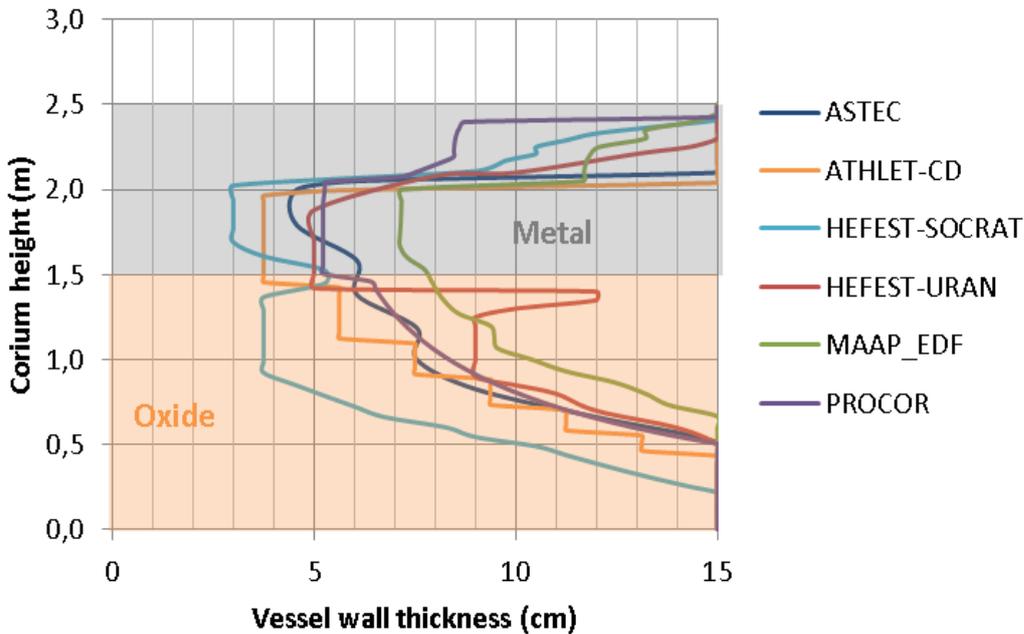


Abb. 2.84 Verbliebende Wandstärke, berechnet mit unterschiedlichen Codes im Rahmen von IVMR (/CAR 19/)

Um die Entwicklung des Wandabschmelzens darstellen zu können, mussten in AIDA auch neue Ausgabegrößen bereitgestellt werden. Die bisherige Ausgabe wurde deswegen mit folgenden Größen ergänzt:

- Temperatur von jeder Node,
- Ein Index für jede Node, welcher zeigt, ob er intakt oder weggeschmolzen ist,
- Die verbliebende Wandstärke in jedem axialen Abschnitt.

Des Weiteren wurde ein neues Versagensmodell entwickelt und implementiert, um den Schaden in der Behälterwand (bzw. die verbleibende Wandstärke) berücksichtigen zu können. Das neue Versagensmodell berücksichtigt den Druckunterschied zwischen Innenseite und Außenseite des Reaktordruckbehälters, das Gewicht des Coriums sowie der Bodenkalotte, die Temperatur und die Wandstärke. Anhand dieser Variablen wird die Tangentialspannung ($\sigma_t(t, i)$) in jedem axialen Abschnitt der Reaktordruckbehälterwand in jedem Zeitschritt wie folgt ermittelt:

$$\sigma_t(t, i) = \frac{F_g}{A_r(t)} + \frac{(p_{RDB} - p_a) * D_i}{4 * d(t, i)} = \frac{m_g * g}{d(t, i) * D_i} + \frac{(p_{RDB} - p_a) * D_i}{4 * d(t, i)} \quad (2.32)$$

Hier beschreibt A_r die Fläche des Restligaments, m_g die Masse der Kalotte unterhalb des Restligaments und der Schmelze, F_g die Gewichtskraft der Kalotte unterhalb des Restligaments und der Schmelze, p_{RDB} den Innendruck, p_a den Außendruck, d die Wandstärke, g die Gravitationskonstante und D_i den Durchmesser des unteren Plenums. Als Versagenskriterium wurde die Zugfestigkeit des Stahls des Reaktordruckbehälters herangezogen. Wenn in einem axialen Abschnitt die Tangentialspannung die Zugfestigkeit erreicht bzw. übersteigt, wird die Reaktordruckbehälter-Wand im Modell an dieser Stelle versagen. In der aktuellen Version ist die Zugfestigkeit der Reaktordruckbehälter-Wand mit einem Wert von 10^8 Pa festgelegt. Auch der Außendruck ist in der aktuellen Version noch mit einem konstanten Wert von $1,5 \times 10^5$ Pa berücksichtigt. Diese soll in Zukunft auf Anwender-Eingabe bzw. GCSM-Signal umgestellt werden.

Ergebnisse der verbesserten Modellierung wurden u. a. 2018 auf dem Projekttreffen des EU-Vorhabens IVMR in Prag vorgestellt /PAN 18b/.

2.5.1.4 Erweiterung der Kopplung

AIDA ist über GCSM mit den anderen Code-Teilen von ATHLET-CD gekoppelt. Materialdaten von Corium (Dichte, Emissivität, Wärmeleitfähigkeit, Viskosität, usw.) werden direkt von dem Modul ECORE nach AIDA übernommen. Die Anfangs- und Randbedingungen sind in Input festgelegt oder über GCSM-Signale gesteuert. In vielen Fällen ist eine Berücksichtigung der Wechselwirkung der Prozesse im unteren Plenum (AIDA-Parameter) mit der Thermohydraulik im Primärkreis bzw. der Reaktorgrube und mit dem Containment erforderlich, um ein realistisches Unfallverhalten simulieren zu können. Insbesondere Maßnahmen zur Unfallbeherrschung wie z. B. In-Vessel Retention (IVR) via Ex-Vessel Cooling (siehe /TEO 96/) erfordern eine gemeinsame Verwendung der einzelnen Module. Hierbei können wichtige Parameter von IVR wie die Effektivität der Wärmeabfuhr durch Flutung der Reaktorgrube, nur realistisch bewertet werden, wenn die Wasserzufuhr, die Wasser/Wasserdampf-Abfuhr und die Wärmeübergabe durch die Reaktordruckbehälter-Wand gekoppelt gerechnet werden.

Abb. 2.85 zeigt eine Übersicht über die Kopplungsstellen von AIDA. AIDA hat direkte Wechselwirkung mit dem Inneren des Reaktordruckbehälters (zerstörter Kern, Kernigiterplatte, usw.) und mit der Reaktorgrube.

Der Reaktordruckbehälter stellt das Folgende für die AIDA-Simulationen bereit:

- Primärdruck
- Nachfließen von weiterem Material
- Abhängig vom Dampfanteil im unteren Plenum:
 - Temperatur der Strukturen in trockenen Szenarien
 - Unterkühlungstemperatur des Fluids in nassen Szenarien

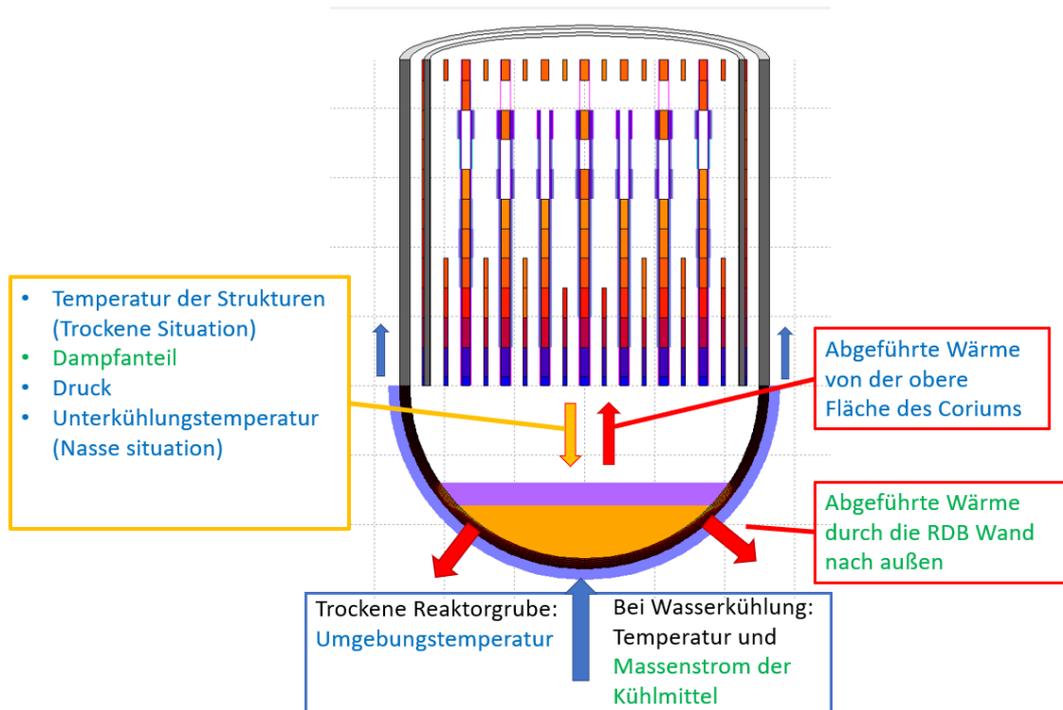


Abb. 2.85 Variablen bei Wechselwirkungen zwischen AIDA und den anderen Modulen (blau: als GCSM vorhanden, grün: als GCSM neu bereitgestellt, schwarz: feste Eingabegröße)

Der Dampfanteil im unteren Plenum bestimmt die Wärmeübergabe an die obere Fläche des Coriums. Während eines Unfalls kann das untere Plenum mehrmals ausgetrocknet bzw. wiedergeflutet werden, deshalb wurde der Dampfanteil über ein Prozesssignal als Randbedingung für die neue AIDA bereitgestellt. Alternativ (z. B. für Stand-Alone Simulationen) kann der Dampfanteil auch tabellarisch definiert werden. Wenn der Dampfanteil 0,95 % übersteigt (ausgetrocknet), wechselt AIDA von einem nassen in ein trockenes Szenario und berechnet \dot{Q}_{MLUP} entsprechend (siehe Gleichung (2.17)). \dot{Q}_{MLUP} ist eine Ausgabegröße von AIDA, über die das Fluid im unteren Plenum erwärmt bzw. verdampft wird (nasses Szenario) oder Strukturen erwärmt werden (trockenes Szenario).

Die Wechselwirkung kann anhand eines Wiederflutung-Szenarios in einem Druckwasserreaktor gut dargestellt werden. Abb. 2.86 zeigt den Dampfanteil im unteren Plenum und die (in Abhängigkeit vom Dampfanteil) von AIDA an ATHLET abgegebene Wärme \dot{Q}_{MLUP} . In dieser Simulation wurde das geschmolzene Kernmaterial bei 3.900 s ins untere Plenum verlagert. Zu diesem Zeitpunkt ist dabei noch Wasser im unteren Plenum vorhanden. Das Wasser beginnt durch die Wärme des Coriums zu verdampfen und der Dampfanteil im unteren Plenum steigt. Bei 6.000 s ist der größte Teil des Wassers verdampft, d. h. der Wärmeübergang vom Corium zu Oberfläche erfolgt statt mit Film- bzw. Blasensieden durch Wärmestrahlung. In Abb. 2.86 ist der dadurch verringerte Wärmetransport gut erkennbar. Durch eine postulierte Operator-Maßnahme wird der Reaktordruckbehälter bei 7.000 s dann wieder geflutet, was wieder zu besseren Kühlungsbedingungen an der Corium-Oberfläche führt. Entsprechend steigt der Wärmetransport bei 7.000 s wieder schnell an.

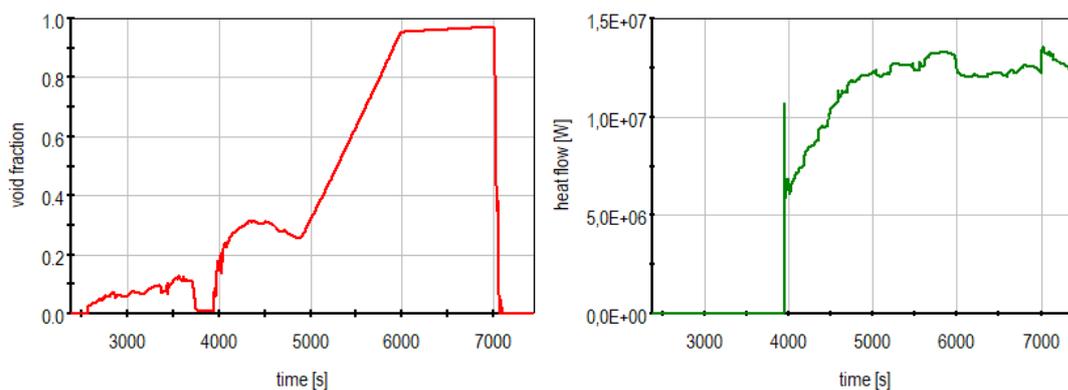


Abb. 2.86 Dampfanteil (links) und der Oberfläche des Schmelzesees an ATHLET abgeführte Wärme (rechts)

Um den Wärmetransport von der Wand des unteren Plenums in einem trockenen Szenario berechnen zu können, ist eine Vorgabe der Umgebungstemperatur erforderlich. Bei IVR wird die Reaktorgrube geflutet (möglichst vor der Verlagerung), um die Nachzerfallswärme des Coriums nach außen abführen zu können. Diese Flutung kann sowohl passiv als auch aktiv erfolgen. Bei einer passiven Flutung wird dabei nur so viel Wasser in die Reaktorgrube nachfließen, wie verdampft wurde, bei Wiederflutung mit aktiven Systemen kann dagegen ein konstanter Kühlmassenstrom erreicht werden. In der aktuellen AIDA-Version kann Wasserkühlung berücksichtigt werden. In dem Modell fließt das Kühlwasser von unten nach oben, das Wasser erwärmt sich entlang der Wand und abhängig vom ausgewählten Modell findet Verdampfung statt. Als Randbe-

dingungen werden dafür die Temperatur des einfließenden Wassers und der Massenstrom verwendet. In der neuen Version kann man einen transienten Massenstrom als GCSM-Signal (oder tabellarisch beim Stand-Alone Modus) definieren und es somit mit weiteren Systemen oder Modellen koppeln. Die Simulation des gesamten IVR-Prozesses erfordert dabei die Simulation der Reaktorgrube (als ATHLET-Modell oder im Rahmen eines Containmentmodells). Um die Kopplung zu einem Modell der Reaktorgrube z. B. mit COCOSYS zu ermöglichen, wurde die von der Wand des unteren Plenums abgeführte Wärme (also von AIDA heraus) als GCSM-Signal bereitgestellt.

Dank der mit GCSM gesteuerten Außenkühlung bzw. Kühlung von oben ist damit jetzt auch die Simulation eines transienten Verhaltens möglich und die Eingabe der Startzeit ist nicht mehr notwendig.

Für spezielle Untersuchungen wurde auf Anwenderwunsch hin außerdem eine Möglichkeit geschaffen, das Versagen des Reaktordruckbehälters über ein GCSM-Signal (also „von Hand“) auszulösen.

2.5.1.5 Zusammenfassung

Die Geometrie des unteren Plenums wurde in AIDA bisher als Halbkugel modelliert, was solange ausreichend war, solange das Volumen der verlagerten Schmelze das Halbkugel-Volumen nicht übersteigt. Um weitere Fälle bzw. Reaktortypen (z. B. AP-1000) realistischer modellieren zu können, wurde die Geometrie so erweitert, dass nun auch ein zylindrischer Teil des unteren Plenums oberhalb der Halbkugel berücksichtigt werden kann.

Des Weiteren wurde die Modellierung des stratifizierten Corium-Pools verbessert. In dem neuen Modell kann die Nachzerfallsleistung auch in der metallischen Schicht berücksichtigt werden (durch Eingabe des Anwenders) und es wurden neue Korrelationen zur Berechnung des Wärmeübergangs implementiert.

Während der Spätphase kann die hohe Temperatur des Coriums zu einer Beschädigung bzw. sogar zu einem Versagen der Reaktordruckbehälter-Wand führen und somit den weiteren Unfallverlauf maßgeblich beeinflussen. AIDA wurde erweitert, um das sukzessive Abschmelzen der Wand zu modellieren. Um realistische Wandprofile berechnen zu können, wurde die bisherige Berechnung der Wärmeleitung in der Wand auch in axiale Richtung erweitert, d. h. die Wärmeleitung wird praktisch zweidimensio-

nal gerechnet. Des Weiteren wurde in Zusammenarbeit mit den GRS-Kollegen aus der Strukturmechanik ein neues Versagensmodell entwickelt, denn die bisherigen Versagensmodelle in AIDA berücksichtigten die verbleibende Wandstärke nicht.

Analysen von SAM-Strategien (wie z. B. In-Vessel Retention (IVR) via Ex-Vessel Cooling, oder Core Catcher Konzepte) erfordern wegen ihrer Komplexität meistens Integralsimulationen, wobei die Modellierung der Wechselwirkung zwischen dem Corium im unteren Plenum und dem Thermofluidynamik-Modell (sowohl im Primärkreis als auch im Containment) essentiell ist. Daher stellt die Verbesserung der Kopplung von AIDA mit ATHLET sowie COCOSYS einen wesentlichen Punkt der Weiterentwicklungen dar. AIDA wurde mit weiteren Prozesssignalen ausgestattet und es wurden außerdem die bisher in der Eingabe festgeschriebenen Randbedingungen durch Werte ersetzt, die von GCSM geliefert werden. Außerdem wurde die Art der Nodalisierung geändert, um eine spätere direktere Kopplung vorzubereiten. Das Augenmerk wurde hier insbesondere auf die Simulation von IVR-Strategien gerichtet.

Die neu entwickelten Modelle wurden anhand generischer Reaktorsimulationen sowie anhand von Simulationen von Versuchen getestet. Des Weiteren wurde AIDA durch Teilnahme an einem Benchmark im Rahmen des IVMR-Projektes /CAR 19/ mit anderen anerkannten Codes verglichen (siehe auch Abschnitt 4.4).

2.5.2 Erweiterungen in LHEAD

Die Zielsetzung, im Programmsystem AC² eine vollständige Unfallsequenz von ersten Kernschädigungen bis hin zu gravierenden Vorgängen im Containment simulieren zu können, erfordert es den Austritt von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter in die Reaktorgrube (also noch Versagen der Reaktordruckbehälterwand) mit ATHLET-CD abbilden zu können. Im Vorhaben RS1505 wurde eine entsprechende Modellierung bereits in AIDA implementiert /WEB 16/. Um auch mit LHEAD eine solche Unfallsequenz mit Schmelzeaustritt rechnen zu können, wurden die entsprechenden Modelle dazu nach LHEAD übertragen. Damit COCOSYS die nachfolgenden Prozesse im Containment bis hin zur Beton-Schmelze-Wechselwirkung, was meistens auch mit einer starken Freisetzung von Wasserstoff verbunden ist, simulieren kann, war es wichtig alle wesentlichen Daten bzgl. der Schmelze bereitzustellen.

LHEAD wurde so erweitert, dass, falls das Kriterium für das Versagen des unteren Plenums erreicht wird, das Ausströmen von Schmelze mit Hilfe einer vereinfachten Durchflussgleichung simuliert wird:

$$G_M = \rho_M A_H C_d \sqrt{\frac{2(P_{LP} - P_{CAV})}{\rho_M}} \quad (2.33)$$

wobei

- G_M : Menge der ausströmenden Schmelze (kg/s),
- ρ_M : Dichte der Schmelze (kg/m³),
- A_H : Leckquerschnitt (m²),
- C_d : Ausströmkoefizient (-),
- P_{LP} : Druck im unteren Plenum (Pa),
- P_{CAV} : Druck in der Reaktorgrube (Pa).

Wie in AIDA sind auch in LHEAD zwei Optionen zur Bestimmung der Ausströmfläche A_H vorgesehen:

- Konstanter Leckquerschnitt als Eingabeparameter. In diesem Fall wird angenommen, dass sich das Leck an zentraler Stelle im unteren Bereich der Kalotte befindet. Diese Annahme ist konservativ in Bezug auf den Schmelzeaustrag.
- Die Ausströmfläche sowie die azimutale Stelle des Lecks werden in LHEAD in Abhängigkeit von den versagenden Nodes berechnet. Der Schmelzeaustrag findet statt, solange sich die Höhe des Schmelzepools oberhalb der Leckstelle befindet. Sinkt die Schmelzehöhe unterhalb des Lecks, wird der Schmelzeaustrag linear auf Null geführt.

Dabei wird in dieser ersten Version ein homogener Schmelzepool angenommen, also ohne Berücksichtigung einer Schichtung mit metallischer und keramischer Schicht. Der Kopplungsstelle zu COCOSYS stehen folgende Größen zur Verfügung: Temperatur, integrierte Masse und Zusammensetzung der ausströmenden Schmelze, Ausströmgeschwindigkeit sowie die ausgetragene Nachzerfallsleistung. Der Druck in der Reaktorgrube wird von COCOSYS als Randbedingung berechnet. Solange die Kopplung noch nicht realisiert ist, beträgt der Druck 0,1 MPa.

3 Anlagensimulation und Schnittstellen

3.1 Erstellung von generischen Anlagendatensätzen

Um die bestehenden, erweiterten und neu erstellten Modelle in ATHLET-CD möglichst schnell in typischen Anwendungsfällen testen zu können, wurden generische Anlagendatensätze für je einen Druckwasserreaktor, einen Siedewasserreaktor und einen Reaktor des russischen Typs WWER erstellt. Als Basis dienten dabei bereits vorhandene (Sample-)Datensätze bzw. Datensatzteile, die speziell auf das Simulieren von Unfällen ausgelegt wurden und soweit vereinfacht wurden, dass damit die Modelle in ATHLET-CD möglichst schnell getestet werden können und die Datensätze nicht zu umfangreich sind.

3.1.1 Datensatz eines Druckwasserreaktors

3.1.1.1 Beschreibung des Datensatzes

Das Ziel war einen generischen Datensatz für einen deutschen Druckwasserreaktor (DWR) für die aktuelle Version von ATHLET-CD zu entwickeln. Der Datensatz sollte in der Lage sein, den gesamten Ablauf eines Unfalls möglichst realitätsnah und effektiv nachrechnen können. Der Datensatz soll künftig auch als Basis zur Datensatzentwicklung für interne und externe Anwender sowie zur Unterstützung der internen Entwicklungsarbeiten dienen, und zwar als ein möglichst schnelllaufendes, übersichtliches Modell, welches auch für Integralsimulationen (d. h. inkl. Kopplung mit dem AC²-Containment-Modul COCOSYS) verwendet werden kann.

Als Grundlage für das thermohydraulische Modell (ATHLET) wurde der bereits bestehende Standard-DWR-Datensatz, welcher auf einer Konvoi-Anlage basiert, erweitert. Der Kernbereich wurde dabei detaillierter modelliert und der Datensatz dann um die anderen Module von ATHLET-CD ergänzt.

Der Datensatz umfasst die Primärkreiscomponenten (Reaktordruckbehälter, Druckhalter, Flutbecken) und die Dampferzeuger einschließlich der Frischdampfleitung. Der modellierte Reaktor hat dabei folgende Eckdaten:

- Thermische Leistung: 3.778 MW,
- Anzahl der Brennelemente (BE): 193 (16 x 16, 20 Steuerstäbe/BE),

- Umlaufmassenstrom (Primärkreis): 18.930 kg/s,
- Frischdampfumsatz: 2.051 kg/s.

Der Reaktorkern ist mit vier Kernkanälen und mit einem Bypasskanal abgebildet. Die Verteilung der 193 BE in den vier Kernkanälen ist unter dem Keyword PARAMETERS einstellbar. In der Standard-Version sind 21 BE im äußeren Ring (PV-COR1), 88 im zweiten (PV-COR2), 40 im dritten (PV-COR3) und 44 im vierten (PV-COR4) Kernkanal modelliert. In der aktuellen Version wird die Anfangsleistung in ECORE vorgegeben und die Nachzerfallsleistung per Tabelle berechnet. Eine symmetrische, axiale Leistungsverteilung wird ebenfalls tabellarisch vorgegeben. Alternativ ist die Berechnung der Reaktorleistung und des Spaltproduktinventars auch mit den Modulen OREST und FIPISO /HES 02/ im Datensatz vorbereitet, um auch den Abbrand berücksichtigen zu können.

Der Reaktordruckbehälter ist wie folgt abgebildet (vom kalten zum heißen Strang):

- Ringraum Mitte (PV-DC-M)
- Ringraum unten (PV-DC-B)
- Unteres Plenum (PV-LP)
- Unteres Plenum, oberer Teil (PV-LP-UP)
- Gitterplatte (PV-LG)
- Vier Kernkanäle und Bypass (PV-COR1-4, PV-REF)
- Oberer Kernbereich (PV-COR-UP)
- Oberer Kernbereich, Teil 2, mit zwei Teilen für die Loops (PV-COR-UP1, PV-COR-UP2)
- Obere Kernbereich, Mitte (PV-UP-M1, PV-UP-M2)

Die vier Loops (kalter Strang, Hauptkühlmittelpumpe, Dampferzeuger, heißer Strang und Druckspeicher) sind im Datensatz zweigeteilt modelliert, d. h. ein einzelner Loop (LOOP2, welcher den Druckhalter beinhaltet und auch für einen Bruch vorbereitet ist) sowie drei weitere, zusammengefasste Loops (LOOP1, mit FPARO-Multiplikator für parallele Geometrien). Insgesamt besteht das thermohydraulische Modell aus 80 Thermo-Fluid Objekten (TFO) und 40 Wärmeleit-Objekten. Die Nodalisierung des thermohydraulischen Modells des Primärkreises ist in Abb. 3.1 dargestellt.

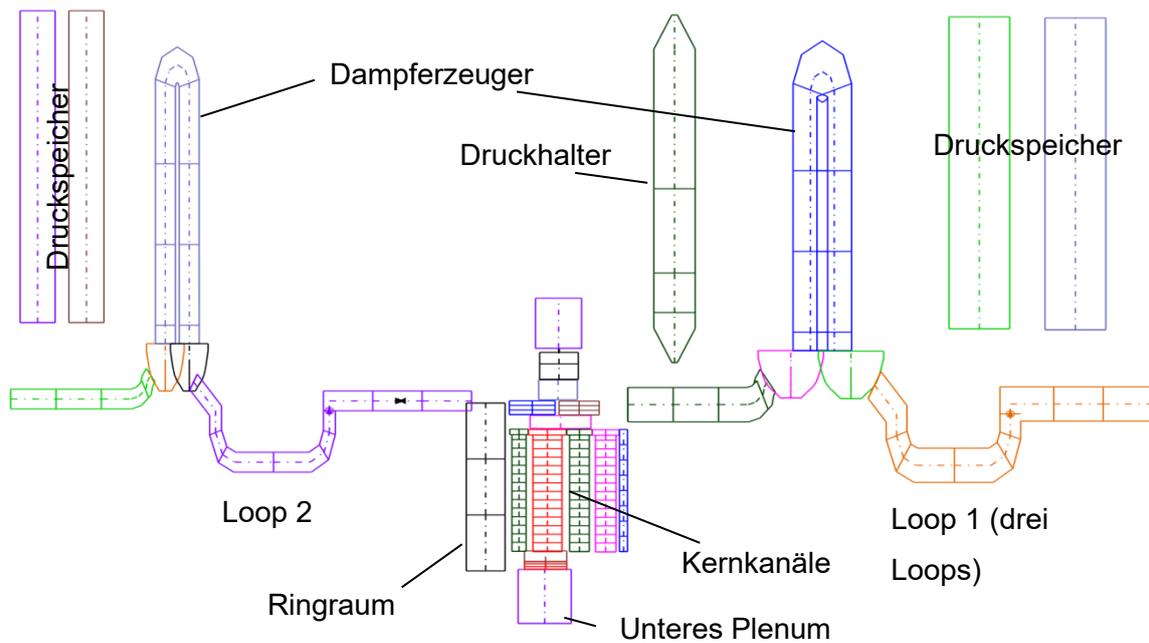


Abb. 3.1 Nodalisierung der Thermohydraulik im Primärkreis (Standard-DWR-Datensatz)

Die Hochdruck- und Niederdruck-Einspeisungen der Not- und Nachkühlsysteme in die jeweiligen Stränge sind mit FILL-Objekten realisiert. Des Weiteren sind auch Dampf- und Speisewassermassenströme der Sekundärseite mit FILL-Objekten abgebildet. Die Eingabedaten für das Regelungsmodul GCSM wurden außerdem deutlich vereinfacht. Beibehalten wurden u. a. die Auslösungssignale der Reaktorschnellabschaltung (RESA) sowie Notkühlvorbereitungssignale, Signale für die Druckspeicher und einige Signale für die Sekundärseite.

Im Allgemeinen wird das 6-Gleichungs-Modell mit getrennten Bilanzgleichungen für die Dampf- und die Wasserphase verwendet. Das 5-Gleichungs-Modell wird nur in den Zonen angewendet, in denen ein Gemischspiegel simuliert wird (Druckhalter und Druckspeicher), sowie in Sekundärseite (Dampfzeuger-Sekundärseite und Frischdampf-Leitung).

Die Oxidationsprozesse und die Kernzerstörung wird mit dem Modul ECORE simuliert. Die wesentlichen Eingabeparameter und Modelloptionen für das Modul (Tab. 3.1) entsprechen den im Anwenderhandbuch empfohlenen Werten sowie Erfahrungen anhand eigener Analysen /ATH 16/.

Tab. 3.1 Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE

Bezeichnung	Name	Dim.	Wert
Beginn Beta-Zr-Schmelzen	TAM	K	2.250
Hüllrohrversagen, metallisch	TALLOW	K	2.450
Hüllrohrversagen, keramisch	TALHIG	K	2.650
Oxidschichtdicke für TALHIG	DDTAL	mm	0,300
Metal. Schmelzeverlagerung	WSLMAX	m/s	0,025
Keram. Schmelzeverlagerung	WSLUO	m/s	0,025
UO ₂ -Solidustemperatur	TCOMPM	K	2.600
UO ₂ -Liquidustemperatur	TCOMPL	K	2.800
Blockadmodell	ITFBK	-	3
Oxidationsmodell	IOXM	-	2

Die Spaltproduktfreisetzung wird mit dem Modul FIPREM berechnet. Die Freisetzung ist mit der empfohlenen Modelloption NMOD1 = 3 (ORNL-Daten + Freisetzung ausgewählter Elemente als Funktion des Partialdrucks) modelliert. Der Datensatz ist auch für die Berechnung des Spaltprodukttransports mit dem Modul SAFT vorbereitet, was im nachfolgenden Anwendungsbeispiel jedoch nicht zur Anwendung kam.

Im Verlauf eines Unfalls fließt das geschmolzene Kern-Material mit hoher Wahrscheinlichkeit auf die Gitterplatte. Infolge der thermischen und mechanischen Belastung kann die Gitterplatte dann zusammenbrechen und das geschmolzene Material verlagert sich weiter ins untere Plenum.

Das Versagen der Gitterplatte ist über ein Prozess-Signal realisiert, welches von der Masse des darauf angesammelten geschmolzenen Materials (MMELT > 35 t) initiiert wird. In dem Datensatz ist eine kontinuierliche bzw. sukzessive Verlagerung der Schmelze ins untere Plenum angenommen (IDMTLP = 1), d. h. nach der ersten Verlagerung gelangt weiteres geschmolzenes Material direkt ins untere Plenum.

Um das Verhalten der Schmelze im unteren Plenum (Spätphase) zu simulieren, ist im Datensatz das Modul AIDA implementiert. Die zweidimensional modellierte Kalottenwand ist in axialer Richtung mit 80 und in radialer Richtung mit 8 Nodes aufgelöst. Außerdem wurde eine Stratifizierung des Schmelzepools (CONFIG: C) angenommen. Die per GCSM angegebenen Randbedingungen sind wie folgt gewählt:

- Druck oberhalb des Schmelzepools (SIG2): Druck in PV-LP
- Unterkühlungstemperatur (SIG3): Sättigungstemperatur - Fluidtemperatur in PV-LP
- Innere Strukturtemperatur (SIG4): Temperatur des Wärmeleitelements des Reflektors (HPV-REF1)
- Dampfanteil oberhalb des Schmelzepools (SIG8): Dampfanteil in PV-LP

Die weitere Eingabe-Signale (SIG6, SIG7, SIG9) sind auf DEFAULT gesetzt. Die durch die Oberfläche des Schmelzepools ins untere Plenum transportierte Wärme wird abhängig vom Dampfanteil im unteren Plenum

- im TFO PV-LP bei einem Dampfanteil kleiner als 0,05 per HEATADD oder
- im HCO HPV-REF1 bei einem Dampfanteil größer als 0,05 als HEATSOURCE zurückgeführt.

In der Simulation ist auch das Abschmelzen der RDB-Wand berücksichtigt. Zur Ermittlung eines möglichen RDB-Versagens wird das Versagenskriterium IDAM = 1 angewendet /BAL 12/.

3.1.1.2 Anwendungsbeispiel

Zur Überprüfung der Lauffähigkeit des DWR-Datensatzes wurde als Unfallszenario ein vollständiger Ausfall der Stromversorgung („Station Blackout“ - SBO) zusammen mit einem gleichzeitigen 250 cm² Bruch im kalten Strang simuliert. Die Bruchöffnung führt zu einer Reaktorschnellabschaltung und die Speisewasserpumpen werden abgeschaltet. Infolge des Stromausfalls laufen auch die Hauptkühlmittelpumpen aus. Der Druck sinkt dann schnell und aufgrund des SBO wird nur von den Druckspeichern und vom Druckhalter Kühlmittel in den Primärkreis eingespeist. Nach ca. 650 s sind die Druckspeicher leer und ohne weitere Einspeisung heizt sich Kern auf und wird freigelegt.

Vier Rechenläufe wurden mit dem Datensatz durchgeführt, in drei davon wurde angenommen, dass nach unterschiedlichen Zeiten die Notstromdiesel und dadurch eine Niederdruckeinspeisung mit 150 kg/s wieder zur Verfügung stehen. Die Rechenfälle sind damit:

- Fall 1: Ohne ND-Einspeisung,
- Fall 2: ND-Einspeisung nach 3.000 s,

- Fall 2: ND-Einspeisung nach 5.000 s,
- Fall 2: ND-Einspeisung nach 6.000 s.

Der Unfallablauf bis zur Freilegung des Kerns ist in allen Fällen gleich und ist in Tab. 3.2 zusammengefasst.

Tab. 3.2 SBO + LOCA (DWR): Unfallablauf bis zur Kernfreilegung

Zeit [s]	Ereignis
10	SBO + LOCA, RESA, Abschaltung der Speisewasserpumpen
65	Stopp der Druckhalter-Einspeisung (leer)
650	Stopp der Druckspeicher-Einspeisung (leer)
800	Beginn der Aufheizung des Kerns
950	Partielle Freilegung des Kerns
3.000	Nahezu komplette Freilegung des Kerns

In Abb. 3.2 sind die Druckverläufe zusammen mit dem Füllstand im Reaktorkern für die vier Fälle dargestellt. Nach der Lecköffnung sinkt der Druck stark und kurz danach bildet sich im oberen Kernbereich ein zweiphasen-Gemisch aus bzw. kurzzeitig wird sogar der obere Kernbereich freigelegt. Die Druckspeicher füllen den Kern dann wieder auf bzw. verlangsamen den Druckabfall, sind aber nach ca. 650 s leer. Nach etwa 800 s fängt der Kern an sich aufzuheizen, das Kühlmittel verdampft und der Kühlmittelstand sinkt im Reaktorkern. Bis zum Beginn der ND-Einspeisung in Fall 2, sind die Verläufe in allen vier Fällen identisch. Der Start der ND-Einspeisung führt zu einem kurzfristigen Druckanstieg, wodurch der Beginn der Einspeisung auch im Druckverlauf gut sichtbar wird. In Fall 2 wird der Kern noch vor Erreichung der Starttemperatur der Hüllrohroxidation wieder vollständig gekühlt, deshalb treten in diesem Fall keine Kernschäden.

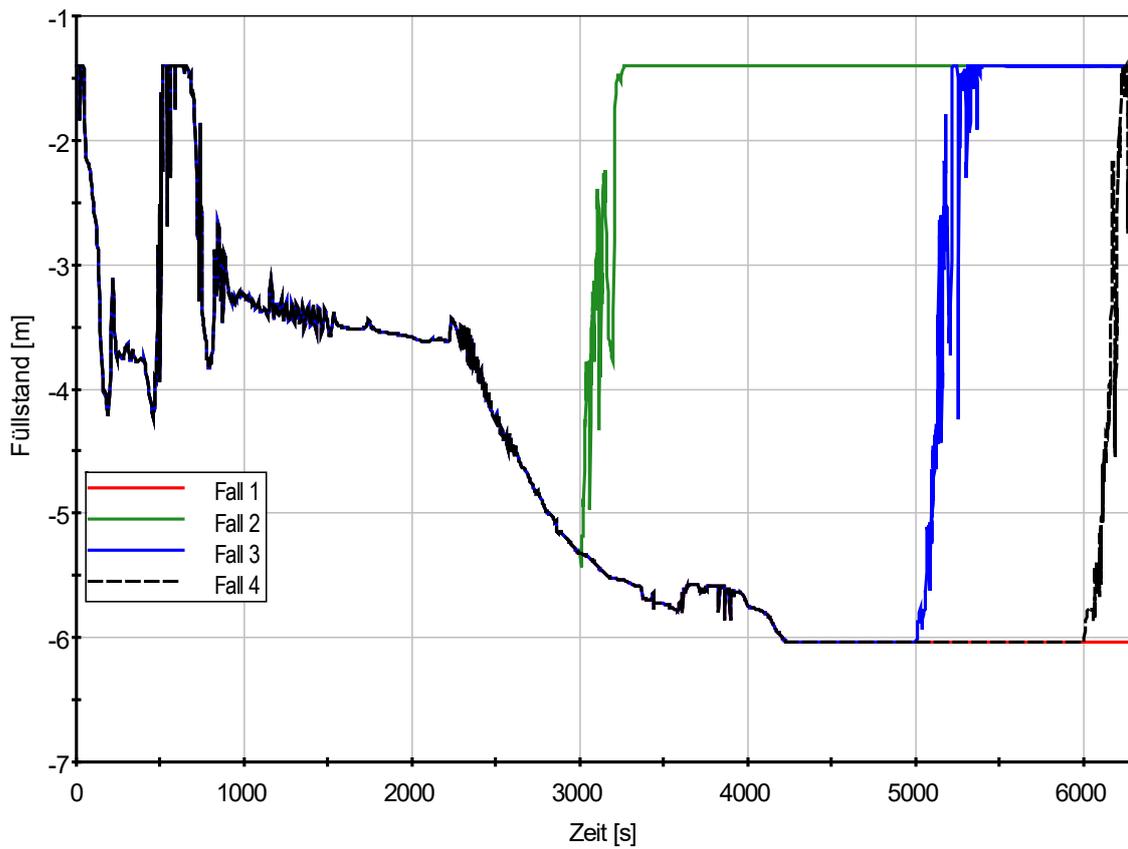
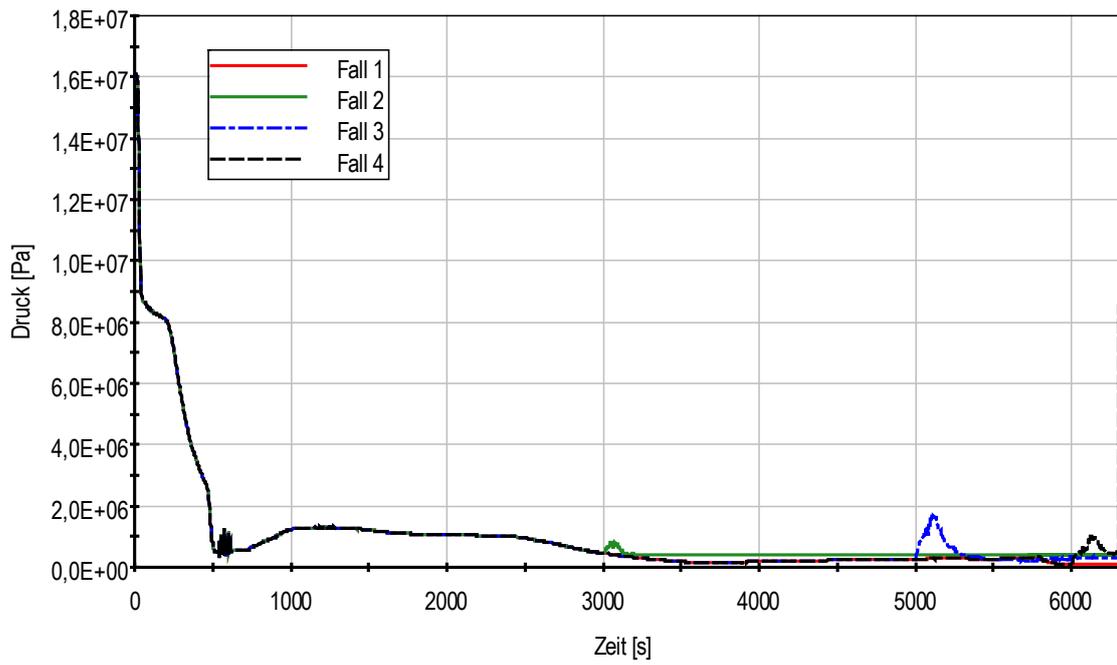


Abb. 3.2 SBO+LOCA (DWR): Druckverlauf (oben) und Kühlmittelstand im Kern (unten) in den vier untersuchten Fällen

In den Fällen 1, 3 und 4 beginnt dagegen nach ca. 3.250 s die Hüllrohroxidation gefolgt von einer entsprechenden Wasserstoffproduktion und einem starken Anstieg der Temperaturen (Wasserstoffproduktion s. Abb. 3.3).

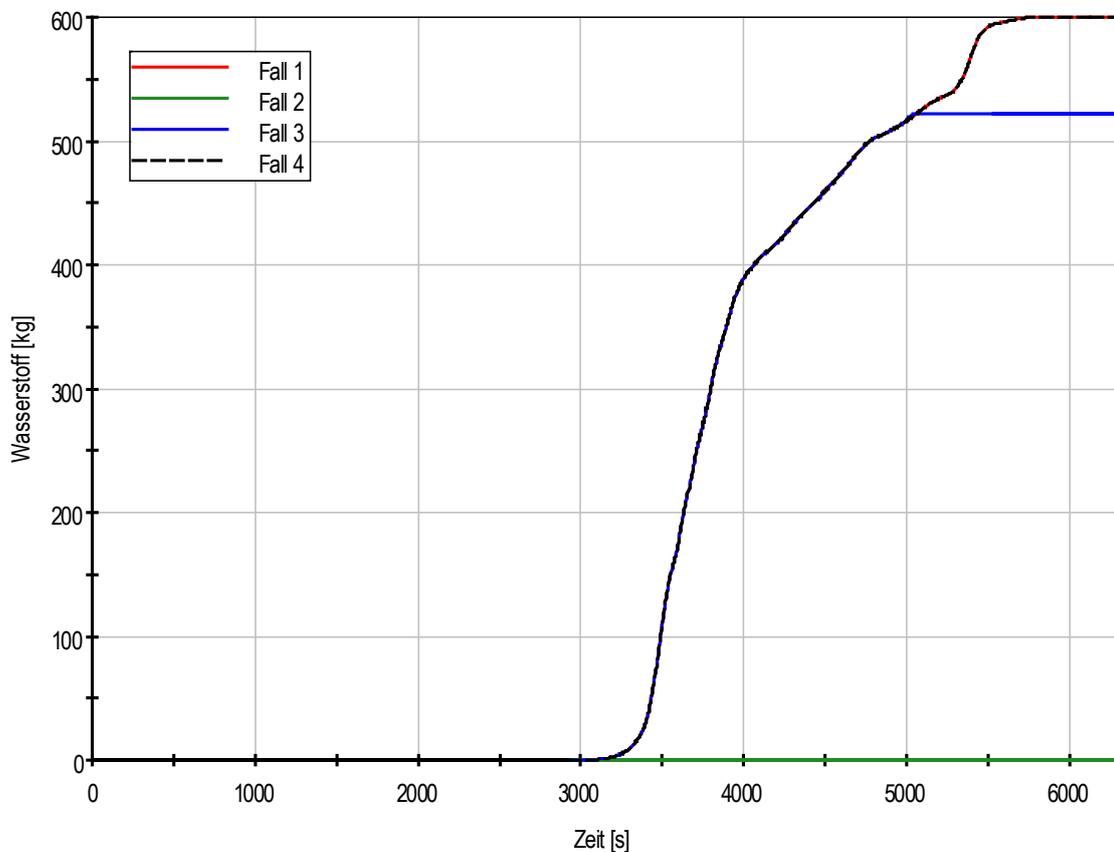


Abb. 3.3 SBO+LOCA (DWR): Freigesetzter Wasserstoff in den vier untersuchten Fällen

Infolge des starken Temperaturanstiegs fangen nach ca. 3.300 s die Steuerstäbe an zu schmelzen und es treten erste Hüllrohrschäden auf. Nach ca. 3.520 s wird auch die Schmelztemperatur der Brennstäbe erreicht. Die Gitterplatte versagt dann nach ca. 3.600 s und die darauf angesammelte Schmelzemenge von 20 t verlagert sich ins untere Plenum. Die Kernzerstörung sowie eine weitere Verlagerung der geschmolzenen Materialien gehen kontinuierlich bis zum Beginn der ND-Einspeisung (Fall 3 und 4) weiter. Zu diesem Zeitpunkt sind ca. 75 % des Kerns geschmolzen. Der Verlauf des Schmelzevolumens im unteren Plenum ist in Abb. 3.4 dargestellt.

Im Fall 1, d. h. ohne ND-Einspeisung, versagt die RDB-Wand bei etwa 6.400 s. Die ND-Einspeisung nach 5.000 s (Fall 3) verzögert den Zeitpunkt des RDB-Wandversagens um ca. 1.000 s. Im Fall 4 (ND-Einspeisung nach 6.000 s) wird die

RDB-Wand von der Schmelze stark beschädigt und in Höhe der metallischen Schicht beträgt die verbliebende Wandstärke nach 8.000 s nur noch ca. 20 mm. Dennoch kommt es in diesem Fall nicht zu einem Wandversagen während des simulierten Zeitraums.

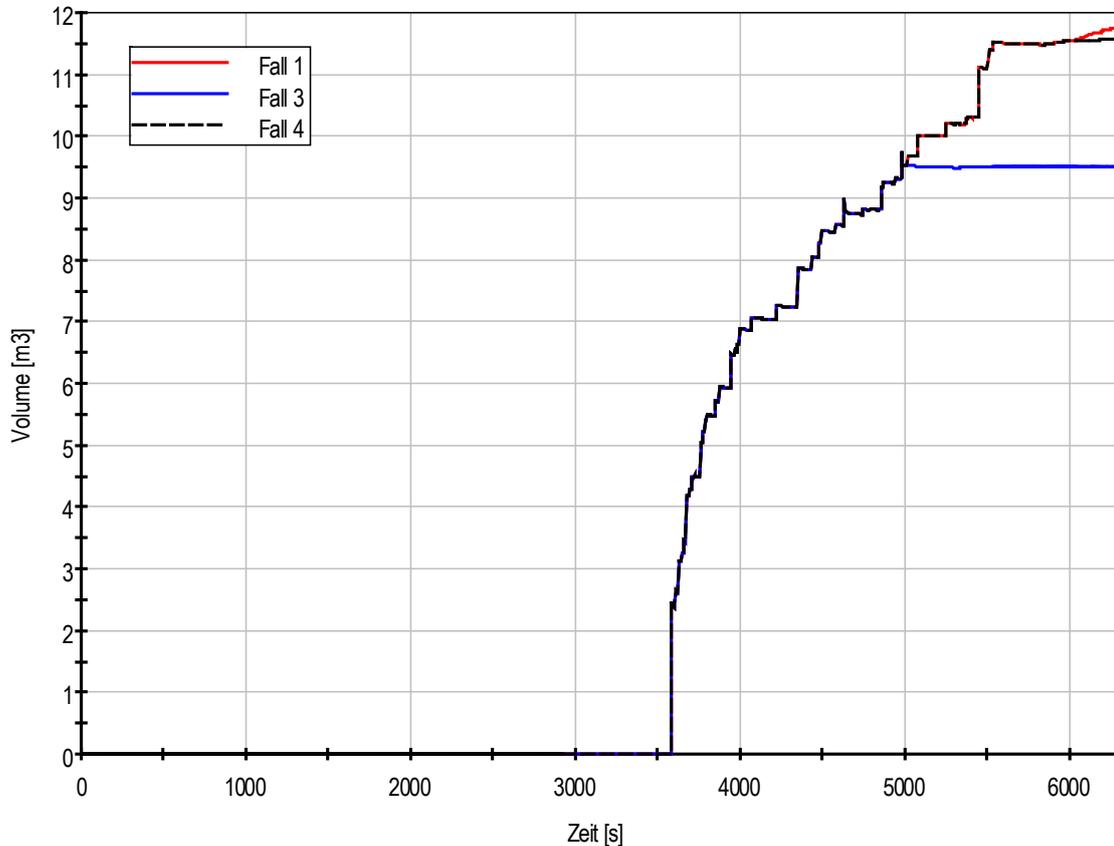


Abb. 3.4 SBO+LOCA (DWR): Schmelzevolumen im unteren Plenum

Im Vergleich zu Fall 3 wird im Fall 4 wegen der kontinuierlich nachfließenden Schmelze die Höhe der metallischen Schicht ständig nach oben geschoben. Damit wird die Stelle, welche von dem hohen Wärmestrom belastet ist, auch in der Zeit verschoben, was zu einer Verhinderung bzw. Verzögerung des RDB-Wandversagens führt. Wegen der späten Einspeisung im Fall 4 befindet sich eine ähnliche Menge Schmelze im unteren Plenum wie im Fall 1 (mit ähnlichem zeitlichen Verlauf der Ansammlung), allerdings verzögert der Abtransport der Wärme durch die obere Kühlung das Wandversagen bzw. verhindert sie ganz.

Connection-Objekte“ definiert sind. Mit dem Versagen der BE-Kästen nimmt auch die Querströmung zwischen den Kernbypass-Objekten zu, sodass diese ebenfalls durch Querströmungsobjekte verbunden werden müssen. Die Strömungswege zwischen der Kernströmung und dem Kernbypass werden in der Startrechnung automatisch deaktiviert und erst geöffnet, wenn in der entsprechenden Zone der BE-Kasten versagt.

Des Weiteren werden Dampf- und Speisewassermassenströme mit FILL-Objekten simuliert. Die Druckentlastungsventile werden mit der Single-Junction-Pipe SEVENTJ dargestellt (Abb. 3.5). Mit Hilfe des FILL-Objekts AMFILL ist es möglich, eine Notkühleinspeisung (e. g. über mobile Pumpen) durch die Steuerstabführungsrohre (CRGTIN, CRGT1, ..., CRGT6) als Notfallschutzmaßnahme zu simulieren.

Im Bereich des Reaktorkerns sowie im unteren und im oberen Plenum wird das 6-Gl.-Modell mit getrennten Bilanzgleichungen für die Dampf- und die Wasserphase verwendet. Das 5-Gl.-Modell wird in den Zonen angewendet, in denen ein Gemischspiegel simuliert wird (Ringraum, Dampfseparator), sowie im Dampfbereich (RDB-Dampfraum und FD-Leitung).

Der Reaktorkern enthält 592 Atrium-Brennelemente mit je 91 Brennstäben. Die Nennleistung beträgt 2574 MW, der Frischdampfdurchsatz 1.377 kg/s, der Umlaufmassenstrom 10.359 kg/s und der Druck im Dampfdom 7,0 MPa. Die Reaktorleistung und das Spaltproduktinventar werden mit Hilfe der Module OREST/FIPISO berechnet /HES 02/, wobei sechs verschiedenen Abbrand-Raten angenommen wurden. Alternativ stehen Eingabedaten für das Punkt-Kinetik-Modell und eine Tabelle für die Nachzerfallsleistung zur Verfügung. Das gewünschte radiale Leistungsprofil wird während einer 100 Sek. Einschwingrechnung eingestellt.

Die wesentlichen Eingabeparameter und Modelloptionen für das Modul ECORE (Tab. 3.1) entsprechen weitgehend den im Anwenderhandbuch empfohlenen Werten /ATH 16/. Die spezifischen Eingaben für die sechs Brennelementgruppen sind in Tab. 3.4 zusammengefasst.

Zur Simulation des Verhaltens der Kernschmelze im unteren Plenum wurden Eingabedaten sowohl für das Modul AIDA als auch für das Modul LHEAD bereitgestellt. Die Berechnung der Schmelzeverlagerung ins untere Plenum beginnt, wenn eins von den folgenden Kriterien erfüllt ist:

- Versagen der unteren Gitterplatte (Versagenstemperatur 1.600 K)

- Schmelzetemperatur oberhalb Gitterplatte erreicht 2.300 K
- Gesamte Schmelzemasse erreicht 40 t.

Zur Ermittlung eines möglichen RDB-Versagens wird für beide Module die ASTOR-Methode angewendet /SCH 99/.

Die Spaltproduktfreisetzung wird mit der empfohlenen Modelloption NMODI = 3 (ORNL-Daten + Freisetzung ausgewählter Elemente als Funktion des partiellen Druckes) im Modul FIPREM berechnet.

Der Spaltprodukttransport vom Kernaustritt bis zu den Entlastungsventilen bzw. zum Turbinenventil an der FD-Leitung wird im Modul SOPHAEROS berechnet. Entsprechende Eingabedaten für das Modul SAFT in der neuen Codeversion ATHLET-CD 3.2 wurden auch bereitgestellt.

Die Eingabedaten für das Regelungsmodul GCSM wurden deutlich vereinfacht. Die wesentlichen Randbedingungen (Speisewassermassenstrom, Dampfstrom, Pumpendrehzahl und Auslösung der Reaktorschnellabschaltung) werden über Zeitfunktionen dargestellt. Modelliert werden auch das Öffnen und Schließen der Entlastungsventile sowie die Notkühlein speisung durch die Steuerstabführungsrohre als eine mögliche Notfallschutzmaßnahme.

Tab. 3.3 Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE

Komponente	Bezeichnung	Name	Dim.	Wert
Brennstab	beheizte Länge	-	m	3,66
	Stopfenlänge, unten	STU	m	0,064
	Stopfenlänge, oben	STO	m	0,148
	Brennstabradius	RROD0	mm	5,025
	Hüllrohr-Innenradius	RCLI0	mm	4,420
	Brennstoffradius	RPEL	mm	4,335
	Kanalabstand	PITCH	mm	14,30
	Brennstab-Innendruck	PROD0	MPa	0,65
	Brennstabplenum-Volumen	VPLENUM	cm ³	23,2
	Beginn Beta-Zr-Schmelzen	TAM	K	2030
	Hüllrohrversagen, metallisch	TALLOW	K	2300
	Hüllrohrversagen, keramisch	TALHIG	K	2450
	Oxidschichtdicke für TALHIG	DDTAL	mm	0,300
	Schmelzeverlagerung, met.	WSLMAX	m/s	0,015
	Schmelzeverlagerung, ker.	WSLUO	m/s	0,015
	UO ₂ - Solidustemperatur	TCOMPM	K	2600
	UO ₂ - Liquidustemperatur	TCOMPL	K	2800
	Oxidationsmodell	IOXM	-	2
BE-Kasten	Brennstäbe per BE	STCAN	-	91
	Kantenlänge, außen	CANBRE	mm	138,6
	Wanddicke	CANTHI	mm	3,05
	Beginn der Schmelzebildung	BCTVS	K	2300
Absorber	Flügelänge	ABSBRE	mm	124,0
	Flügeldicke	ABSTHI	mm	7,65
	Stahlmasse/Flügelänge	ABMFE	kg/m	4,56
	Borkarbidmasse/Flügelänge	ABMB4C	kg/m	0.580
	Beginn der Schmelzebildung	ABTAM	K	1550

Tab. 3.4 Zuordnung der Brennelemente und Steuerelement-Arme (ST-Arme)

Eingabeparameter	ROD1	ROD2	ROD3	ROD4	ROD5	ROD6
Anzahl der BE	64	80	108	124	140	76
Anzahl der ST-Arme pro Kernzone (FAABI)	48	40	56	72	56	28
Anzahl der ST-Arme zwischen zwei Kernzonen (FAABK)	32	48	64	64	72	0

3.1.2.2 Anwendungsbeispiel

Zur Überprüfung der Lauffähigkeit des SWR-Datensatzes wird als Störfallsequenz ein vollständiger Ausfall der Stromversorgung („Station Blackout“ - SBO) angenommen. Gleichzeitig erfolgt die Reaktorschnellabschaltung, der Ausfall der Speisewasserversorgung und Schließen der Frischdampfleitung. Um die Rechenzeit bis zum Beginn der Kernaufheizung zu verkürzen, wird zusätzlich der Ausfall der Sicherheits- und Entlastungsventile unterstellt. Die Druckentlastung erfolgt über die sechs diversitären Druckentlastungsventile, die eine maximale Kapazität von etwa 36 kg/s bei 7,0 MPA haben. Diese Ventile werden mit Erreichen von 2,0 MPa geschlossen.

Drei Rechenläufe wurden mit dem Datensatz durchgeführt:

- Referenzfall: SBO ohne zusätzliche Notfallschutzmaßnahmen
- Noteinspeisung durch die Steuerstabführungsrohre mit insgesamt 1 kg/s zwei Stunden nach Störfallbeginn
- Noteinspeisung durch die Steuerstabführungsrohre mit insgesamt 5 kg/s zwei Stunden nach Störfallbeginn

Die wesentlichen Ergebnisse sind in Abb. 3.6 bis Abb. 3.9 zusammengefasst. Die berechnete Reihenfolge der wichtigen Ereignisse ist in Tab. 3.5 zu finden.

Der Störfallablauf ist durch eine relativ rasche Druckentlastung mit großem Kühlmittelverlust gekennzeichnet (Abb. 3.6). Etwa 50 Minuten nach dem Ausfall der Stromversorgung beginnt die Kernaufheizung, gefolgt von einem raschen Anstieg der Oxidationsraten (Abb. 3.7) und, kurz danach, vom Beginn der Schmelze der Absorberblätter.

Etwa 100 Minuten nach Störfallbeginn wird das Kriterium zum Start der Verlagerung der flüssigen Schmelze ins untere Plenum erreicht. Der Kontakt der heißen Schmelze mit dem Restwasser im unteren Plenum führt zu einer starken Verdampfung und somit zu einem deutlichen Anstieg des Systemdruckes (Abb. 3.6). Mit der Erhöhung der Dampfverfügbarkeit erhöht sich die Zr-Oxidationsrate, und etwa 300 kg Wasserstoff werden innerhalb weniger Minuten zusätzlich erzeugt (Abb. 3.7).

Im Referenzfall, ohne Notfallschutzmaßnahmen, steigt die Schmelztemperatur im unteren Plenum unvermindert weiter (Abb. 3.8), und das Versagen des RDB findet bei etwa 210 Minuten nach Störfallbeginn statt, wenn der Wert des Versagensfaktors im VESSEL-Modell auf 1 ansteigt (Abb. 3.9).

Eine Notkühlein speisung mit Hilfe von mobilen Pumpen durch die Steuerstabsführungsrohre kann helfen, um die im unteren Plenum erzeugte Nachzerfallsleistung abzuführen. Schon eine Einspeiserate von 1 kg/s reicht aus, um den berechneten Zeitpunkt zum RDB-Versagen deutlich zu verschieben (Abb. 3.9), während die erhöhte Einspeiserate von 5 kg/s in der Lage ist, die Schmelze im unteren Plenum langfristig zu kühlen (Abb. 3.8 und Abb. 3.9).

Tab. 3.5 SWR-SBO: Ereignisablauf

Ereignisablauf (s)	Referenzfall (ohne AM)	CRGT SI 1kg/s	CRGT SI 5kg/s
Ausfall der Stromversorgung (Station Black-out)	0		
Beginn der Kernaufheizung	~3000		
Erstes Bersten der Hüllrohre	4650		
Erstes Versagen der Steuerelemente	4667		
Erstes Versagen der BE-Kasten	4743		
Beginn der keramischen Schmelze	5819		
Beginn der Verlagerung ins untere Plenum	6220		
Beginn der SI-Einspeisung (AM-Maßnahme)	-	7200	7200
RDB Versagen	12750	~21000	-

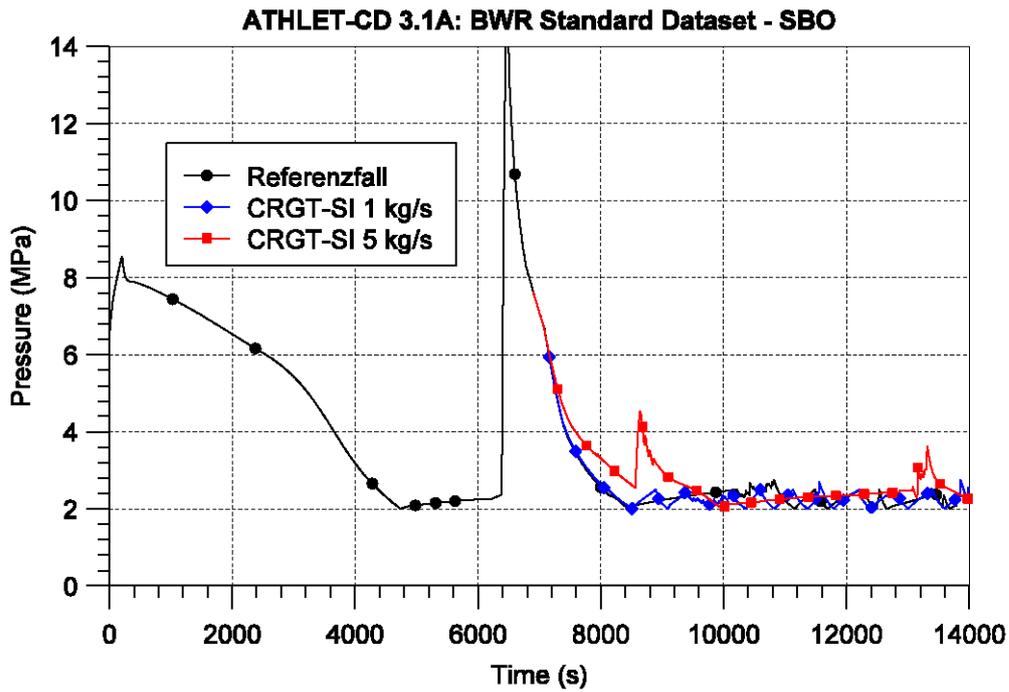


Abb. 3.6 SWR-SBO: Systemdruck

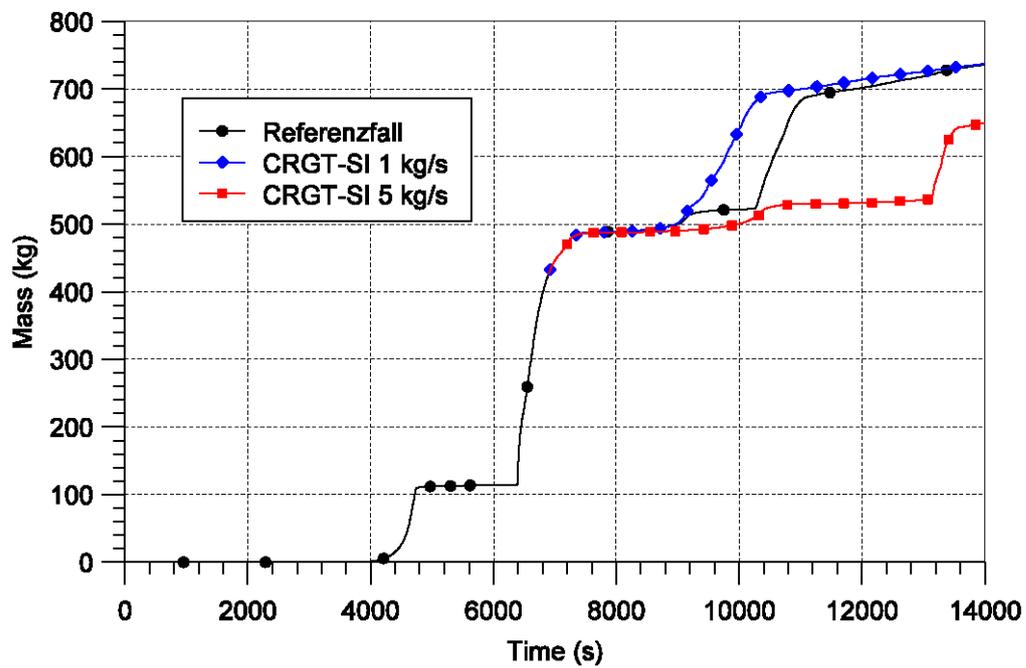


Abb. 3.7 SWR-SBO: Gesamte Wasserstoffmasse

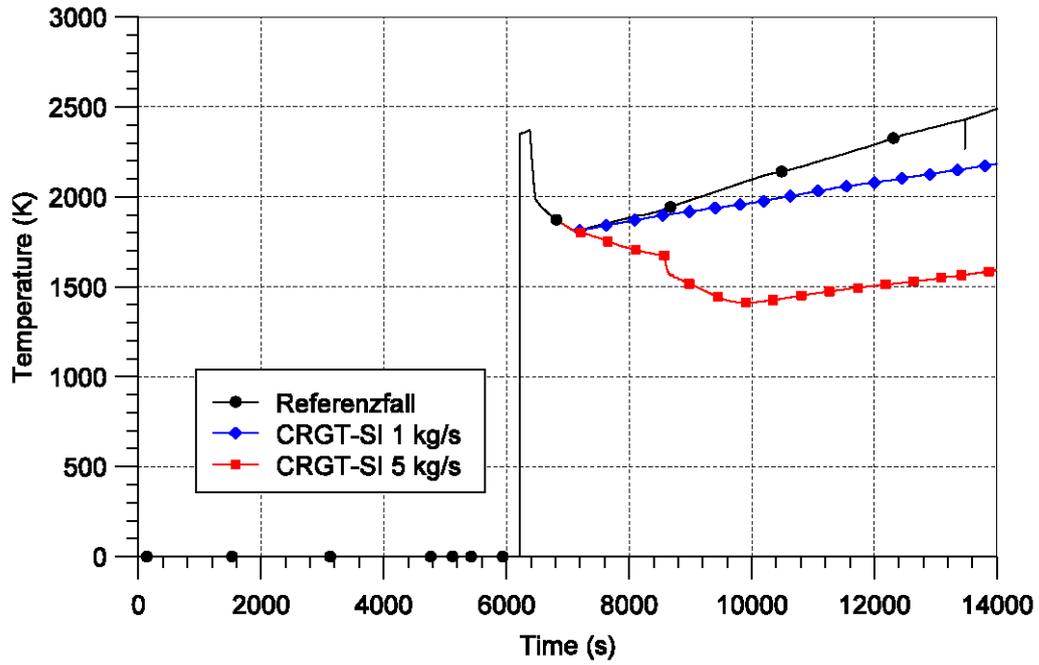


Abb. 3.8 SWR-SBO: Temperatur der Schmelze am RDB-Boden

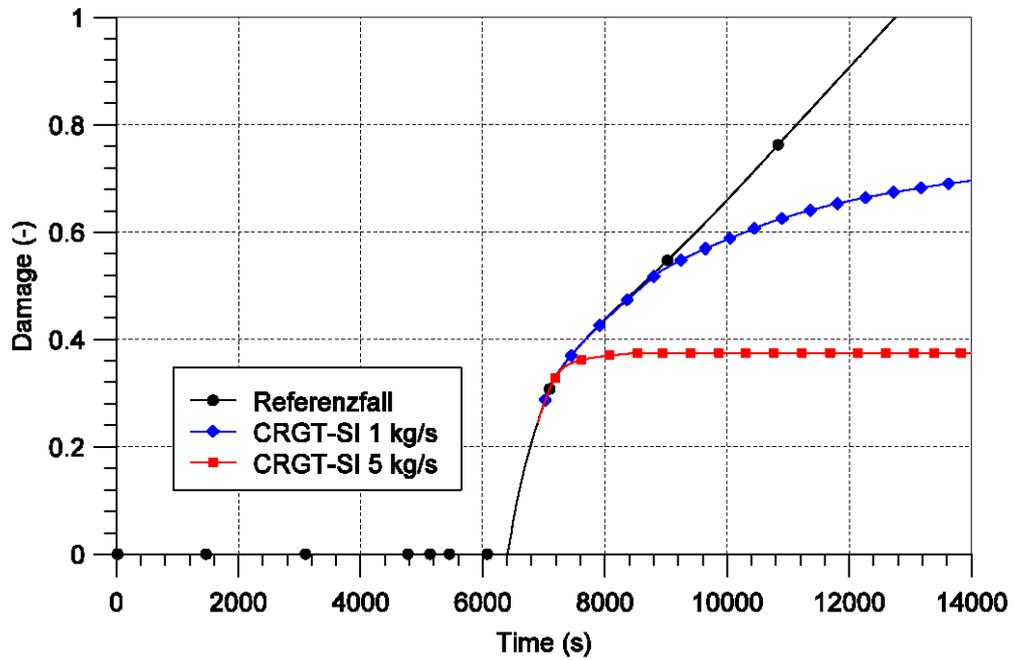


Abb. 3.9 SWR-SBO: Versagensfaktor (VESSEL-Modell)

3.1.3 Datensatz eines WWER-Reaktors

3.1.3.1 Beschreibung des Datensatzes

Ein generischer Datensatz für einen Druckwasserreaktor des russischen Typs WWER-1000 wurde entwickelt, um damit komplexe Unfallabläufe effektiv simulieren zu können. Der Datensatz soll hauptsächlich für interne Entwicklungsarbeiten zum Einsatz kommen, d. h. zum Testen neu entwickelter bzw. modifizierter Modelle in ATHLET-CD.

Als Grundlage wurde ein thermohydraulischer Datensatz von ATHLET verwendet. Der thermohydraulische Datensatz wurde um die ATHLET-CD Modulen ECORE, FIPREM und AIDA erweitert, um damit Kernzerstörungsprozesse, Spaltproduktfreisetzung sowie Phänomene im unteren Plenum simulieren zu können. Der Einsatz des Spaltprodukttransportmoduls SAFT wurde außerdem vorbereitet.

Der Datensatz bildet die Primärkreis Komponenten und die Dampferzeuger einschließlich der Frischdampfleitung ab. Der modellierte Reaktor hat dabei folgende Parameter:

- Thermische Leistung: 3.000 MW,
- Anzahl der Brennelemente (BE): 163,
- Umlaufmassenstrom (Primärkreis): 18.000 kg/s,
- Primärdruck: 161 bar,
- Frischdampfdruck: 63 bar,
- Frischdampfumsatz: 1,652 kg/s.

Den thermohydraulischen Datensatz kann man in drei wesentliche Teile unterteilen: den Reaktordruckbehälter (RDB), die Kühlkreisläufe und die Sekundärseite. Der Ringraum des RDB ist mit vier vertikalen Kanälen modelliert, welche jeweils mit einem der kalten Stränge verbunden sind. Die Brennelemente (BE) sind mit fünf konzentrischen Kernkanälen abgebildet, welche zusammen mit einem Bypass-Kanal (PV-REF) den Reaktorkern darstellen:

- PV-PIPE1, mit 35 BE,
- PV-PIPE2, mit 26 BE,
- PV-PIPE3, mit 30 BE,
- PV-PIPE4, mit 36 BE,
- PV-PIPE5, mit 36 BE.

In der aktuellen Version wird die Anfangsleistung in ECORE vorgegeben und die Nachzerfallsleistung anhand einer tabellarischen Vorgabe berechnet. Eine symmetrische, axiale Leistungsverteilung wird ebenfalls über eine Tabelle vorgegeben.

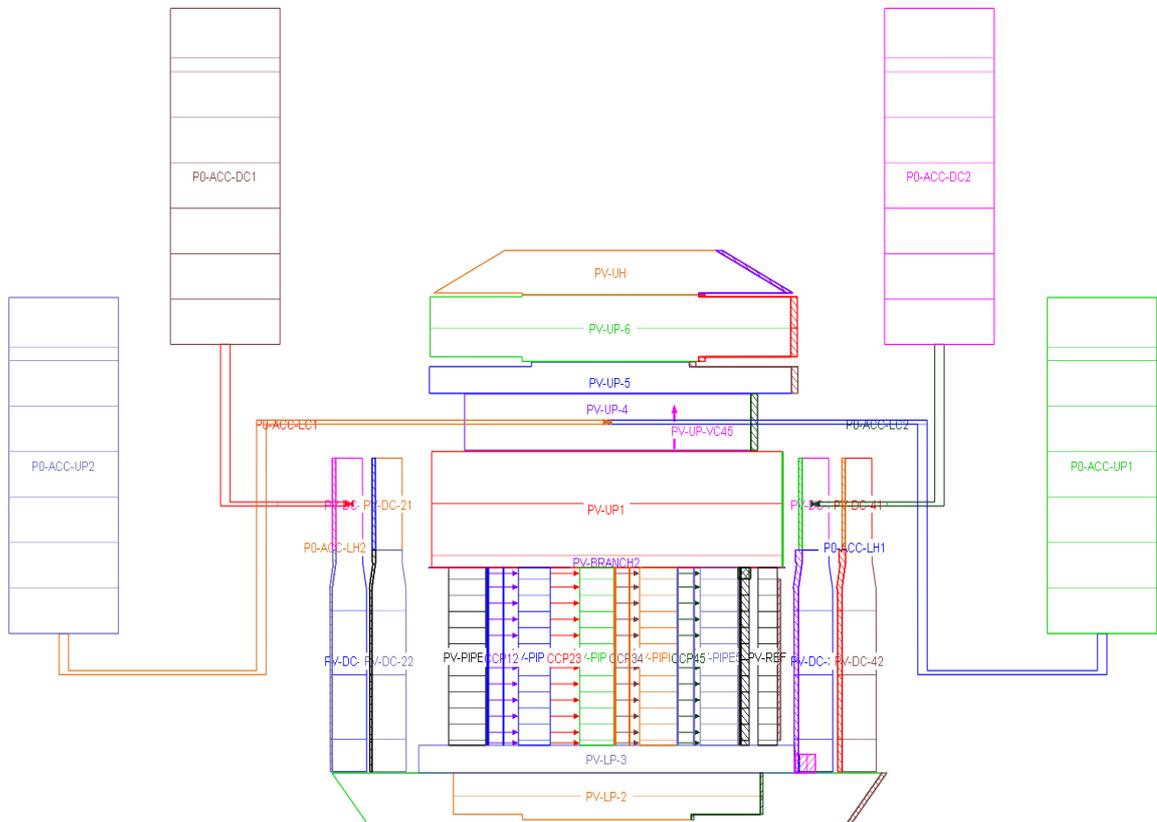


Abb. 3.10 Thermohydraulische Nodalisierung des Reaktordruckbehälters im WWER-1000 Datensatz

Das untere Plenum ist mit drei thermohydraulischen Objekten (TFO) modelliert: das äußere Volumen (PV-LP-1) mit dem hemisphärischen Teil, das untere innere Volumen (PV-LP-2) und das obere innere Volumen (PV-LP-3) mit dem Bereich der Gitterplatte.

Das obere Plenum ist vertikal in drei Ebenen aufgeteilt: ein unteres Volumen (PV-UP1) direkt oberhalb des Kernes, zwei mittlere Volumes (PV-UP2-IN/PV-UP-4) mit dem Eintrittsbereich und ein oberes Volumen (PV-UP-5). Des Weiteren ist die RDB-Decke vertikal mit zwei weiteren TFO (PV-UP-6/UH) abgebildet. Abb. 3.10 zeigt die thermohydraulische Nodalisierung des Reaktordruckbehälters.

Die vier Kühlkreisläufe sind separat, aber in ähnlicher Weise modelliert. Die heißen Stränge schließen sich dabei an PV-UP-4 an. Die kalten Stränge enden jeweils in einem der vier Ringraum-Kanäle. Die Hauptkühlmittelpumpen (HKMP) werden mit dem

Pumpenmodell von ATHLET unter Verwendung der Kennlinien einer WWER-1000 Hauptkühlmittelpumpe simuliert. Der Druckhalter (P0-PRESS) ist an den vierten Kühlkreislauf angebunden.

Die vier Druckspeicher beinhalten 50 m³ boriertes Wasser und 10 m³ darüber liegenden Stickstoff. Die Auflösung von Stickstoff im Wasser wird dabei modelliert. Zwei der Druckspeicher sind mit dem oberen Plenum (PV-UP-4) und zwei mit dem oberen Bereich des Ringraums (PV-DC-11/31) verbunden.

Das Modell der Sekundärseite beinhaltet die Dampferzeuger sowie die Frischdampfleitungen mit den Sicherheitsventilen und führt bis zum Turbinen-Anschluss. Der Speisewassereintritt ist mit einem Single Junction Pipe modelliert wobei der Massenstrom tabellarisch definiert ist.

Insgesamt besteht das thermohydraulische Modell aus 190 Thermo-Fluid Objekten (TFO) und 65 Wärmeleit-Objekten. Des Weiteren beinhaltet das Modell folgende Reaktorschutz-Signale bzw. Eingriffe:

- Reaktorleistungssteuerung,
- Druckhalter-Steuerung inkl. Vorbereitungssystem,
- Turbinenleistungssteuerung,
- Dampferzeuger-Füllstandsteuerung,
- Dampfkollektor-Regulation, Abblasen in den Kondensator bzw. die Atmosphäre und
- Druckregulierung für den Primärkreis, inkl. Druckhalter-Sprühsystem und Heizung.

Im Allgemeinen wird das 6-Gleichungs-Modell mit getrennten Bilanzgleichungen für die Dampf- und die Wasserphase verwendet. Das 5-Gleichungs-Modell wird in den Zonen angewendet, in denen ein Gemischspiegel simuliert wird (Druckhalter und Druckspeicher) sowie in der Sekundärseite (Dampferzeuger-Sekundärseite und Frischdampfleitungen) /ATH 16/.

Die Oxidationsprozesse sowie die Kernzerstörung wird mit dem Modul E CORE simuliert /BAL 12/. Die wesentlichen Eingabeparameter und Modelloptionen für das Modul (Tab. 3.6) entsprechen den im Anwenderhandbuch empfohlenen Werten sowie Erfah-

rungen aus eigenen Analysen unter Berücksichtigung der Spezifikationen des Reaktortyps WWER-1000.

Tab. 3.6 Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE

Bezeichnung	Name	Dim.	Wert
Beginn Beta-Zr-Schmelzen	TAM	K	2250
Hüllrohrversagen, metallisch	TALLOW	K	2300
Hüllrohrversagen, keramisch	TALHIG	K	2500
Oxidschichtdicke für TALHIG	DDTAL	mm	0,300
Metal. Schmelzeverlagerung	WSLMAX	m/s	0,006
Keram. Schmelzeverlagerung	WSLUO	m/s	0,003
UO ₂ - Solidustemperatur	TCOMPM	K	2600
UO ₂ - Liquidustemperatur	TCOMPL	K	2800
Blockademodell	ITFBK	-	3
Oxidationsmodell	IOXM	-	2

Die Spaltproduktfreisetzung wird mit dem Modul FIPREM berechnet. Die Freisetzung ist dabei mit der Modelloption NMODI = 1 (ORNL-Daten + Freisetzungsraten aus CORSOR) modelliert. Die Berechnung des Spaltprodukttransports ist mithilfe des Moduls SAFT vorbereitet, allerdings wurde es in dem nachfolgenden Anwendungsbeispiel nicht verwendet. Die gewählten Modelloptionen entsprechen den empfohlenen Werten.

Im Verlauf eines Unfalls verlagert sich das geschmolzene Kernmaterial mit hoher Wahrscheinlichkeit auf der Gitterplatte. Infolge der thermischen und mechanischen Belastung kann die Gitterplatte dann zusammenbrechen und das geschmolzene Material verlagert sich ins untere Plenum. Das Versagen der Gitterplatte wird hierbei nach mehr als 50 t an geschmolzenem Kernmaterial angenommen. Dadurch wird das Versagen über ein Prozesssignal (MMELT > 50 t) gestartet. Im Datensatz ist das Nachfließen von weiterem geschmolzenem Material durch die Option für kontinuierliche bzw. sukzessive Verlagerung (IDMTLP = 1) berücksichtigt.

Im Datensatz ist das Modul AIDA implementiert, welches das Verhalten der Schmelze im unteren Plenum in der Spätphase simuliert. Die zweidimensional modellierte Kalottenwand ist in axialer Richtung mit 100 und in radialer Richtung mit 10 Nodes aufgelöst. AIDA modelliert das elliptische untere Plenum des WWER-1000 vereinfacht mit

einer Halbkugel, wobei bei der Bestimmung des Radius die korrekte Darstellung der benetzten Fläche ausschlaggebend war.

In der Modellierung wurde ein stratifizierter Schmelzepool (CONFIG: C) angenommen. Die per GCSM angegebene Randbedingungen sind wie folgt gewählt:

- Druck oberhalb des Schmelzepools (SIG2): Druck in PV-LP-1
- Unterkühlungstemperatur (SIG3): Sättigungstemperatur - Fluidtemperatur in PV-LP-1
- Innere Strukturtemperatur (SIG4): Temperatur der Gitterplatte (GRIDPLATE)
- Dampfanteil oberhalb des Schmelzepools (SIG8): Dampfanteil in PV-LP-1

Die weiteren Eingabe-Signale (SIG6, SIG7, SIG9) sind auf DEFAULT gesetzt. Die durch die Oberfläche des Schmelzepools ins untere Plenum transportierte Wärme wird abhängig vom Dampfanteil im unteren Plenum

- in der TFO PV-LP-1 bei einem Dampfanteil kleiner als 0,05 per HEATADD,
- in der HCO HPV-COREFD bei einem Dampfanteil größer als 0,05 als HEATSOURCE zurückgeführt.

In der Simulation ist das Abschmelzen der RDB-Wand berücksichtigt. Zur Ermittlung eines möglichen RDB-Versagens wird das Versagenskriterium $IDAM = 1$ angewendet /PAN 18/.

3.1.3.2 Anwendungsbeispiel

Zur Überprüfung der Lauffähigkeit des VVER-1000 Datensatzes wird als Unfallszenario ein vollständiger Ausfall der Stromversorgung („Station Blackout“ - SBO) zusammen mit einem gleichzeitigen 10%-Bruch in kalten Strang 4 simuliert. Der Bruch wird nach 500 s geöffnet. Infolge des Kühlmittelverlustes sinkt der Druck schnell und der Öffnungsdruck (ca. 60 bar) der Druckspeicher wird nach ca. 110 s erreicht, wodurch die erste Phase der Einspeisung stattfindet. Nach ca. 220 s sinkt der Druck unter 25 bar und initiiert die zweite Phase der Einspeisung aus den Druckspeichern. Die dritte und letzte Phase der Druckspeichereinspeisung findet statt, nachdem der Druck unter 10 bar gesunken ist, d. h. nach ca. 700 s. Infolge des SBO wird dann bis zum Ende der Simulation kein weiteres Kühlmittel eingespeist. In Abb. 3.11 ist der Druckverlauf im Primärkreis dargestellt.

Der Füllstand im RDB sinkt und der teilweise freigelegte Kern fängt nach ca. 1.600 s an sich aufzuheizen. Der Kern liegt in der Folge nach etwa 2.000 s vollständig trocken. Die Hüllrohroxidation beginnt nach ca. 2.300 s und Wasserstoff wird freigesetzt (Abb. 3.12).

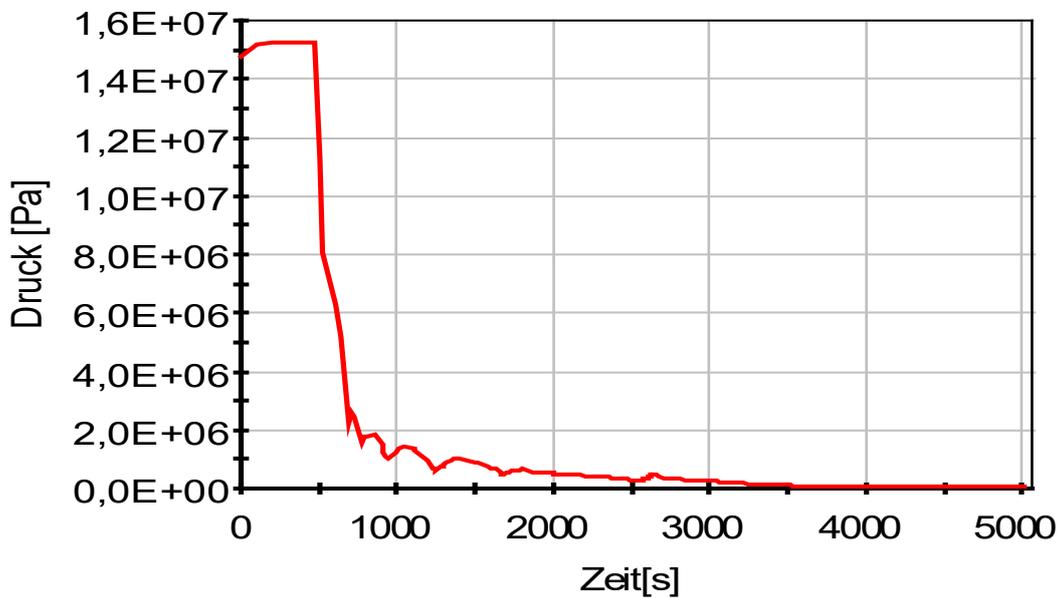


Abb. 3.11 SBO + LOCA (WWER-1000): Druckverlauf im Primärkreis

Tab. 3.7 SBO + LOCA (WWER-1000): Unfallablauf

Zeit [s]	Ereignis
500	SBO + LOCA, RESA, Abschaltung der Speisewasserpumpen
2000	Beginn der Kernaufheizung
2500	Austrocknung des Reaktorkerns
2800	Beginn der Wasserstoff-Freisetzung
3150	Schmelzen der Steuerstäbe
3710	Schmelzen die Brennstäbe
4460	Verlagerung ins untere Plenum
4760	Versagen des RDB

Die wichtigsten Ereignisse während des Unfalls bis zum Versagen der RDB-Wand sind in Tab. 3.7 dargestellt.

Nach ca. 2.650 s erreichen die Steuerstäbe eine Temperatur von 1.700 °C und fangen an zu schmelzen. Infolge des weiteren Temperaturanstiegs beginnt ca. 560 s später das Schmelzen der Brennelemente. Innerhalb von ca. 1.300 s sammelt sich etwa 50 t Schmelze auf der Gitterplatte, was zum Versagen der Gitterplatte führt. Die Menge an geschmolzenem Kernmaterial ist in Abb. 3.13 dargestellt. Ins untere Plenum verlagern sich dann ca. 22 t keramische und 17 t metallische Schmelze mit einer mittleren Temperatur von 2.650 °C.

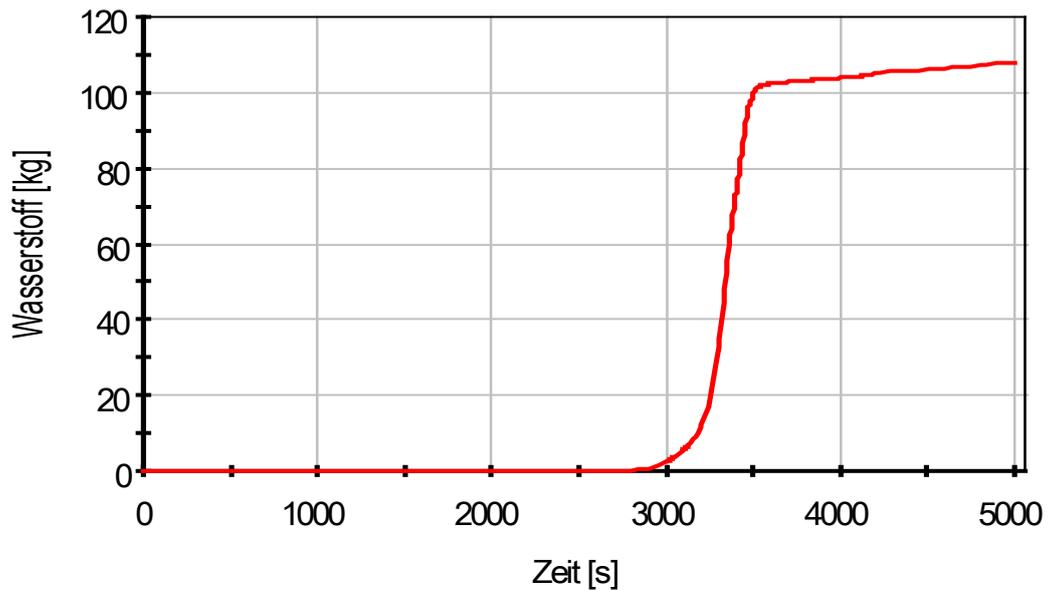


Abb. 3.12 SBO + LOCA (WWER-1000): Freigesetzter Wasserstoff

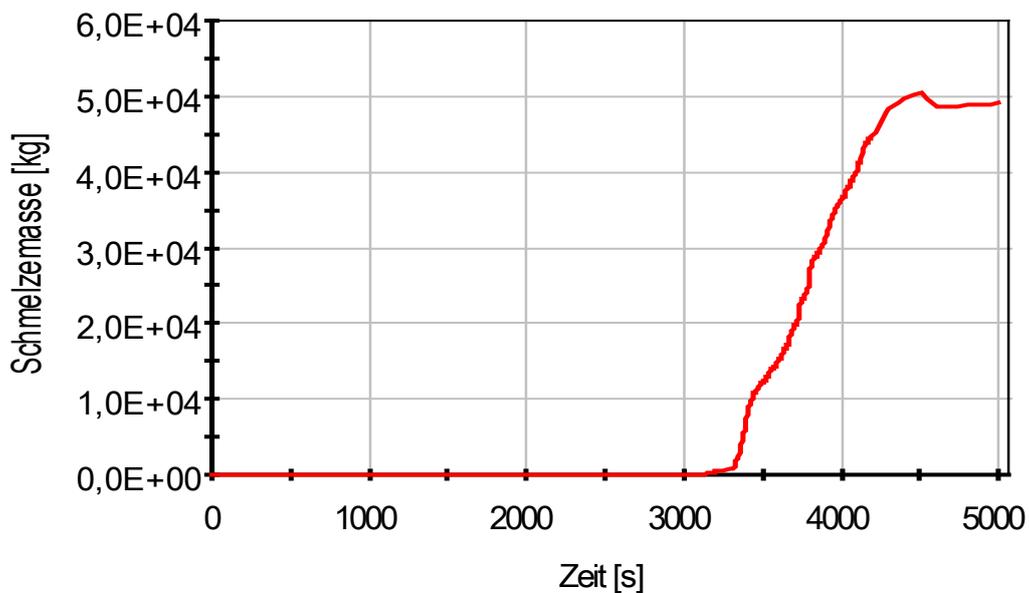


Abb. 3.13 SBO + LOCA (WWER-1000): Masse an geschmolzenem Kernmaterial

Infolge der relativen schnellen Kernzerstörung hat das verlagerte Kernmaterial (Corium) immer noch ca. 25 MW Nachzerfallsleistung. Durch den Fokussing-Effekt beginnt das Schmelzen der RDB-Wand auf Höhe der metallischen Schicht. Die Wand schmilzt dabei schnell ab. Abb. 3.14 zeigt die abgeschmolzenen Stellen der RDB-Wand nach ca. 300 s. Kurz danach versagt die RDB-Wand schließlich.

Die dargestellten Ergebnisse sind im Vergleich mit anderen DWR-Simulationen plausibel, dennoch ist die Entwicklung des Datensatzes noch nicht vollständig abgeschlossen und sollte in Zukunft mit weiteren Modulen von ATHLET-CD ergänzt werden.

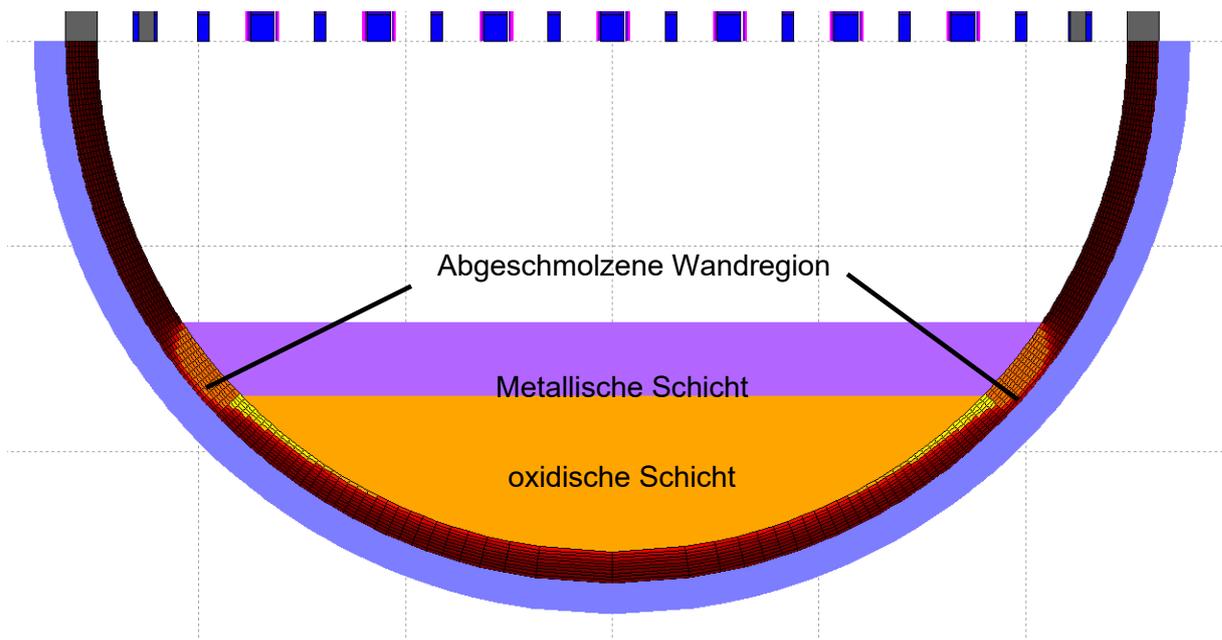


Abb. 3.14 SBO + LOCA (WWER-1000): Schaden in der RDB-Wand kurz vor Versagen (4.700 s)

3.2 Schnittstelle zu Python

Im Rahmen von verschiedenen BMWi-geförderten Projekten RS1198 /KLO 15/ und RS1507 /SCH 15/ sowie zweier Studentenprojekten /KOM 14a/, /KOM 14b/, /NIE 14/ wurde die Möglichkeit geschaffen, ATHLET als eine dynamische Bibliothek (Windows: DLL, Linux: shared library .so) zu verwenden.

Diese dynamische Bibliothek stellt die Funktionalität von ATHLET einem aufrufenden Programm, einem so genannten Controller, zur Verfügung. Der Controller kann in jeder Programmiersprache verfasst sein, die die Verwendung von dynamischen Bibliotheken erlaubt, z. B. C/C++ oder Python. ATHLET in der dynamischen Bibliothek stellt ver-

schiedene Einsprungstellen zur Verfügung, mit der eine Simulation ganz oder teilweise, z. B. bis zu einem bestimmten Zeitpunkt, durchgeführt werden kann. Außerdem können verschiedene interne Routinen von ATHLET vom Controller verwendet werden, um z. B. Stoffwerte zu berechnen. Über so genannte Hooks können Routinen innerhalb des Controllers für ATHLET bekannt gemacht werden, die von ATHLET an definierten Stellen (den Hooks) während der Programmausführung aufgerufen werden. Dies kann z. B. bei Verwendungen eines bestimmten Modells oder GCSM Signals erfolgen, oder wenn ein Zeitschritt fertig berechnet wurde.

Der Datenaustausch zwischen ATHLET und dem Controller erfolgt über eine so genannte Hash-Map (siehe /KLO 15/). Über diese kann der Controller sowohl Werte von internen ATHLET-Größen auslesen wie diese auch verändern.

Auf Basis der oben aufgeführten Vorarbeiten basiert eine Python Controller Bibliothek mit dem Namen pyAFFE (ATHLET Framework for Embedding and Extending), mit deren Hilfe ATHLET Simulationen gesteuert und Daten ausgetauscht werden können. Diese wird z. B. für die Kopplung zwischen ATHLET und OpenFOAM eingesetzt /SEU 16/.

In Abb. 3.15 ist der Ablauf einer Simulation dargestellt, die durch einen pyAFFE Controller gesteuert wird. Der Nutzer startet ein Python Skript, das die pyAFFE Bibliothek verwendet. Dieses Skript lädt und initialisiert zunächst die ATHLET Bibliothek. Beim Einlesen der ATHLET Simulationseingabedate wird dabei auch das ATHLET-CD Plugin initialisiert. Anschließend wird beispielhaft eine Python Methode für einen Hook innerhalb von ATHLET registriert, hier für den Hook, der am Ende jedes Zeitschritts aufgerufen wird. Danach wird die Steady State Simulation vom Pythonskript gestartet.

Die transiente Simulation findet dann in einzelnen Zeitschritten statt, deren Schrittweite vom Pythonskript vorgegeben werden und innerhalb einer Schleife ausgeführt werden, bis die vorgegebenen Gesamtdauer der Simulation erreicht ist. Am Ende jedes (ATHLET-internen) Zeitschritts wird dabei die für den entsprechenden Hook registrierte Callback-Methode im pyAFFE Controller aufgerufen.

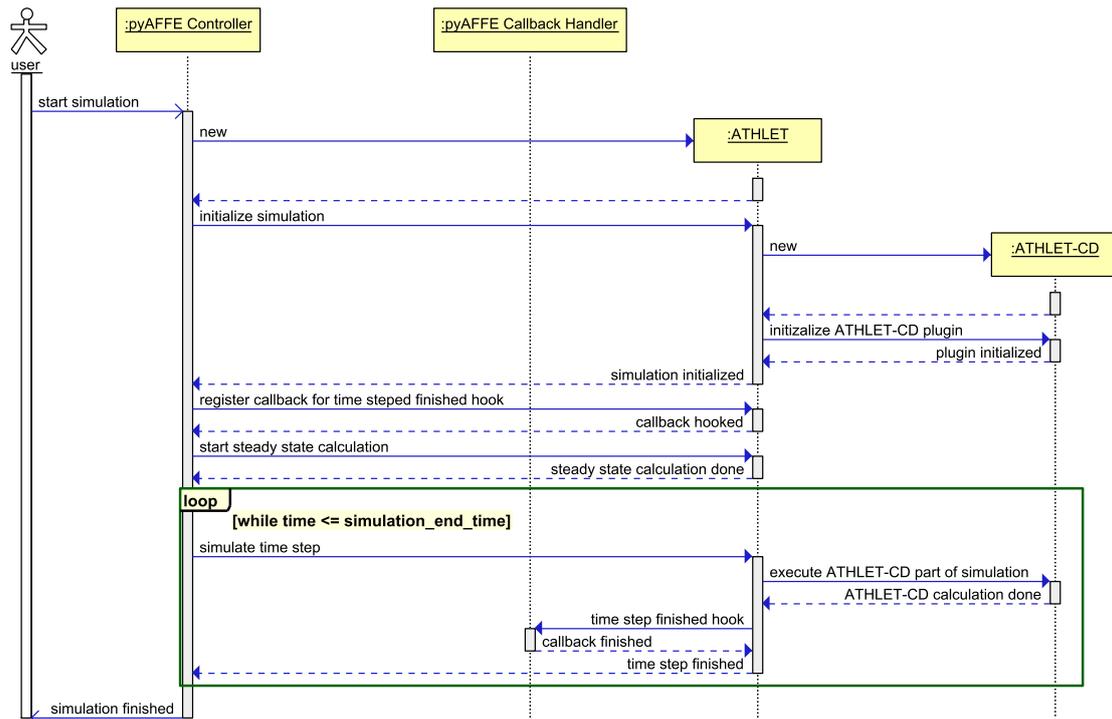


Abb. 3.15 Ablauf einer Simulation, die durch einem AFFE Controller gesteuert wird

Im Rahmen dieses Projekts wurde nun sowohl die Bibliothek pyAFFE wie auch ATHLET-CD entsprechend erweitert, um diese Funktionalität auch für Hooks innerhalb von ATHLET-CD zu ermöglichen. In Abb. 3.16 ist der Programmablauf exemplarisch dargestellt.

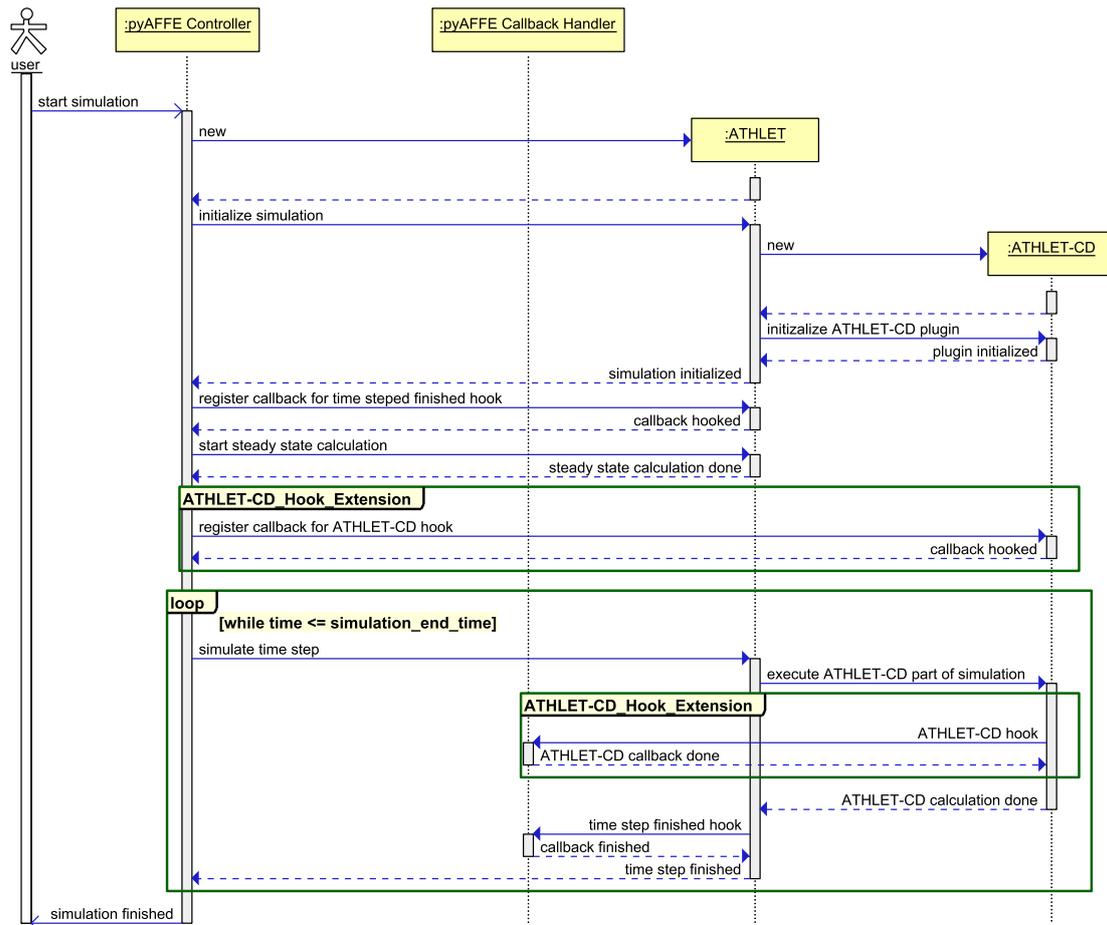


Abb. 3.16 Ablauf einer Simulation, die durch einem AFFE Controller gesteuert wird

3.2.1 Erweiterungen des ATHLET Pythonwrappers pyAFFE

Verschiedene Bereiche der Hashmap, die für den Datenaustausch zwischen einem Controller und der ATHLET(-CD) Bibliothek eingesetzt werden, werden als Scopes bezeichnet. Um auch auf ATHLET-CD-interne Variablen zugreifen zu können, wurde die pyAFFE-Bibliothek entsprechend erweitert. Bei den Zugriffen auf Variablen und Pointer/Referenzen in der Hashmap sowie bei der Registrierung von Callback-Funktionen für Hooks kann jetzt der Scope explizit angegeben werden. Der Standardwert ist ‚athlet‘, um auf Variablen von ATHLET-CD zugreifen zu können, lautet der Scope ‚core_degradation‘.

Das folgende Codebeispiel zeigt die Registrierung einer Callback-Methode für einen Hook innerhalb von ATHLET-CD sowie den Zugriff auf eine ATHLET-CD Modulvariable.

```

athlet_solver = pyAFFE.ATHLETSolver(ArgStrng, coupled=False,
                                   filePath=args.lib)
athlet_solver.steady_state()
athlet_solver.setup_transient_run(t_start)

athlet_solver.cdll.register_plugin('core_degradation')
# need to start solver first, so plugins are known
eocda_callback = EocdaCallback(athlet_solver.cdll)

athlet_solver.cdll.add_callback("EOCDA_Callback",
                               eocda_callback.callback,
                               hook_scope='core_degradation')

ipos = athlete_cdll.get_ref('emodocda', 'm_ipos',
                           ref_scope='core_degradation')

```

3.2.2 Anpassungen in ATHLET-CD

ATHLET-CD wurde um den Zugriff auf die Hashmap erweitert. Damit ist es dort nun möglich, Modulvariablen in dieser einzutragen. Beispielhaft wurde diese für die Module EMODAXR, EMODRAAXI, EMODAR_A, EMODRAI, EMODTESPA, EMODRAAXR, EMODOCDA und EMODINCL implementiert, die nun verschiedene Größen für das Brennstaboxidationsmodell in der Hashmap registrieren:

```

_REALLOCATE_visible(scope, DZCORE, (NAXS:NAXM))

```

```

_REALLOCATE_visible(scope, TC_A, (M:L))
_REALLOCATE_visible(scope, TA_A, (M:L))
_REALLOCATE_visible(scope, FS_A, (L))

```

```

_REALLOCATE_visible(scope, ICELL, (NRZM2:NRZ*2))

```

```

_REALLOCATE_visible(scope, IVROD, (NECOR))
_REALLOCATE_visible(scope, JDAM, (NECOR, 2))

```

```

_REALLOCATE_visible(scope, FGASGAP, (NGASGAP))

```

```

        _REALLOCATE_visible(scope, TC, (NRZ))
...
        _REALLOCATE_visible(scope, RCLAD, (NRZ))
        _REALLOCATE_visible(scope, RFUEL, (NRZ))
        _REALLOCATE_visible(scope, PRODI, (NRZ))
        _REALLOCATE_visible(scope, TCIS, (NRZ))
...
        _REALLOCATE_visible(scope, FSPALT, (NRZ))

```

```

        _linkSymbol( scope, M_ODSTAB )
        _linkSymbol( scope, M_AMZRGF )
        _linkSymbol( scope, M_RHOCS )
        _linkSymbol( scope, M_IPOS )
        _linkSymbol( scope, M_ADHU )
        _linkSymbol( scope, M_RZRP )

```

```

        _linkSymbol( scope, IMAX )
        _linkSymbol( scope, JMAX )
        _linkSymbol( scope, VPLENU )
        _linkSymbol( scope, DELT )
        _linkSymbol( scope, TEE )

```

Das oben erwähnte Modul (EMODOCDA) wurde neu eingeführt, um auf bisher temporär vorliegende Variablen im Brennstaboxidationsmodell zugreifen zu können.

In die Routinen EOCDA1 und EOCDA wurden dann zwei Hooks eingefügt, um an diesen Stellen auf die Ergebnisse des Brennstaboxidationsmodells zugreifen und gegebenenfalls diese modifizieren zu können.

```

!$omp critical
  _callHook("EOCDA1_Callback")
!$omp end critical

```

```

!$omp critical
  _callHook("EOCDA_Callback")
!$omp end critical

```

Diese Hooks werden jeweils für die verschiedenen Höhenpositionen der Brennstäbe aufgerufen. Es muss beim Aufruf der Hooks sichergestellt werden, dass auch für den Fall, dass ATHLET als Multi-Threading Anwendung läuft, die Callback-Methoden sequenziell aufgerufen werden.

3.2.3 Beispielimplementierung für Verwendung von Hooks und Callbacks in ATHLET-CD

Um die neu entwickelte Funktionalität zu testen, wurde ein Pythonskript entwickelt, das sowohl auf ATHLET-CD interne Modulvariablen zugreift wie auch für die neuen Hooks Callback-Methoden registriert.

Das Skript wird regelmäßig im Rahmen der Testbuilds auf der Continuous Integration Plattform von AC² ausgeführt, um sicherzustellen, dass durch zukünftige Änderungen an den Codes von ATHLET und ATHLET-CD keine Fehler in diesem Teil des Codes auftreten.

3.2.4 Zusammenfassung

ATHLET-CD wurde um die Möglichkeit erweitert, dass externe Controller, die ATHLET/ATHLET-CD als dynamische Bibliothek verwenden, auf interne Modulvariablen über eine Hashmap zugreifen können. Außerdem ist es nun möglich, Callback-Methoden des Controllers für Hooks innerhalb von ATHLET-CD zu registrieren. Beispielhaft wurde diese für das Brennstaboxidationsmodell implementiert. Für dieses ist es nun möglich, während der Simulation auf die Modellergebnisse zuzugreifen und gegebenenfalls durch eigene Modelle zu ergänzen.

3.3 Spezifische Visualisierungen

Zur Darstellung der komplexen Abläufe bei starken Kernzerstörungen sollte im Rahmen dieses Vorhabens ein Visualisierungsprogramm entwickelt werden, mit dem spezifisch die Vorgänge während eines Unfalls mit Kernschmelze dargestellt werden können. Als Basis für ein solches Programm diene hierbei das bereits bestehende Python-Programm CView (Core View), das im Rahmen des Vorgängervorhabens RS1505 ([/WEB 13/](#), [/WEB 16/](#)) speziell für die Entwicklungsarbeit erstellt worden war. Im Weiteren sollte auch eine Möglichkeit geschaffen werden, das Transportverhalten von Spaltprodukten im Kühlkreislauf zu visualisieren. Dazu wurde unter Verwendung einiger grundsätzlicher Routinen von CView das Python-Programm SView (SOPHAEROS View bzw. SAFT View) entwickelt. Außerdem wurde noch ein kleineres Programm erstellt (QPLOT), mit dem Ausgabedaten von ATHLET-CD als Diagramme dargestellt werden können, auch unter Verwendung von Scripten. Alle diese Tools sind

aufgrund ihrer Programmierung in der Scriptsprache Python problemlos auf verschiedenen Betriebssystemen lauffähig.

Die Entwicklung der Tools wurde außerdem von vornherein so konzipiert, dass bei Bedarf Erweiterungen bzw. Anpassungen an bestimmte Problemstellungen mit möglichst geringem Aufwand durchzuführen sind. Dazu trägt auch die Verwendung der Scriptsprache Python bei. Somit ist ein variabler und vielseitiger Einsatz der Programme gewährleistet.

3.3.1 CView

Während das ursprüngliche CView nur als Hilfestellung für Entwickler konzipiert war und die Darstellung von Ergebnissen damit deswegen noch sehr schematisch war, wurde im Rahmen dieses Vorhabens das Programm so erweitert und verbessert, dass es auch für reine Anwender von ATHLET-CD die Möglichkeit bietet, Ergebnisse unkompliziert und anschaulich darzustellen. Eine wichtige Erweiterung war außerdem auch die Darstellung der Vorgänge im unteren Plenum während der möglichen Spätphase eines Unfalls (sowohl für Simulationen von ATHLET-CD insgesamt als auch für Stand-alone Simulationen mit dem Spätphasenmodul AIDA).

Abb. 3.17 zeigt beispielhaft einen Screenshot von CView. Mithilfe des Programms können beliebige Variablen aus den in der ATHLET-CD Simulation erzeugten Daten eingelesen und je nach Wert farblich unterschiedlich angezeigt werden. In der Abbildung ist auf der linken Seite ein Schnitt für den Reaktordruckbehälter dargestellt. Dabei sind im oberen Teil der Kern mit den (teilweise geschmolzenen) Brenn- und Steuerstäben (hier die Hüllrohrtemperaturen TC) sowie im Hintergrund die entsprechenden ATHLET-Werte für jede Node (hier die Dampfgehalt des Fluids, Variable AV) abgebildet. Im unteren Teil der Abbildung werden die Daten für das untere Plenum, d. h. in diesem Fall die Ergebnisse des Moduls AIDA, mit der Schmelze (Temperaturen für keramische und metallische Schicht) und der Wand des Reaktordruckbehälters (Temperaturen der einzelnen Wandsegmente, TWL) gezeigt. An der Außenseite der Wand besteht zudem die Möglichkeit den Wasserkanal einer eventuellen Außenkühlung darzustellen. Alternativ können je nach Simulation auch Ergebnisse aus Simulationen mit dem ATHLET-CD Model LHEAD anstatt AIDA angezeigt werden. Außerdem ist es möglich den zeitlichen Verlauf einer Variablen für eine bestimmte Zelle in einem Diagramm darzustellen (s. Abb. 3.18).

Die Erweiterung der Kernmodelle in dreidimensionaler Richtung (s. Abschnitt 2.1) erforderte außerdem neue Möglichkeiten der Darstellung. Mit allen bisher zur Verfügung stehenden Visualisierungsmöglichkeiten konnten lediglich Schnitte in einer vertikalen Ebene durch den Reaktorkern dargestellt werden, was bei radialsymmetrischer Modellierung vollkommen ausreichend war. Durch die Erweiterung der Nodalisierungsmöglichkeiten in azimuthaler Richtung wurde es jedoch notwendig auch Schnittbilder in horizontaler Richtung anzeigen zu können. Außerdem musste CView auch so erweitert werden, dass vertikale Schnitte in verschiedener Richtung, d. h. mit verschiedenen Azimut-Winkeln, möglich sind. Abb. 3.19 zeigt ein Beispiel für entsprechende Schnitte in vertikaler (linke Seite) und horizontaler (rechte Seite) Richtung durch den Kern.

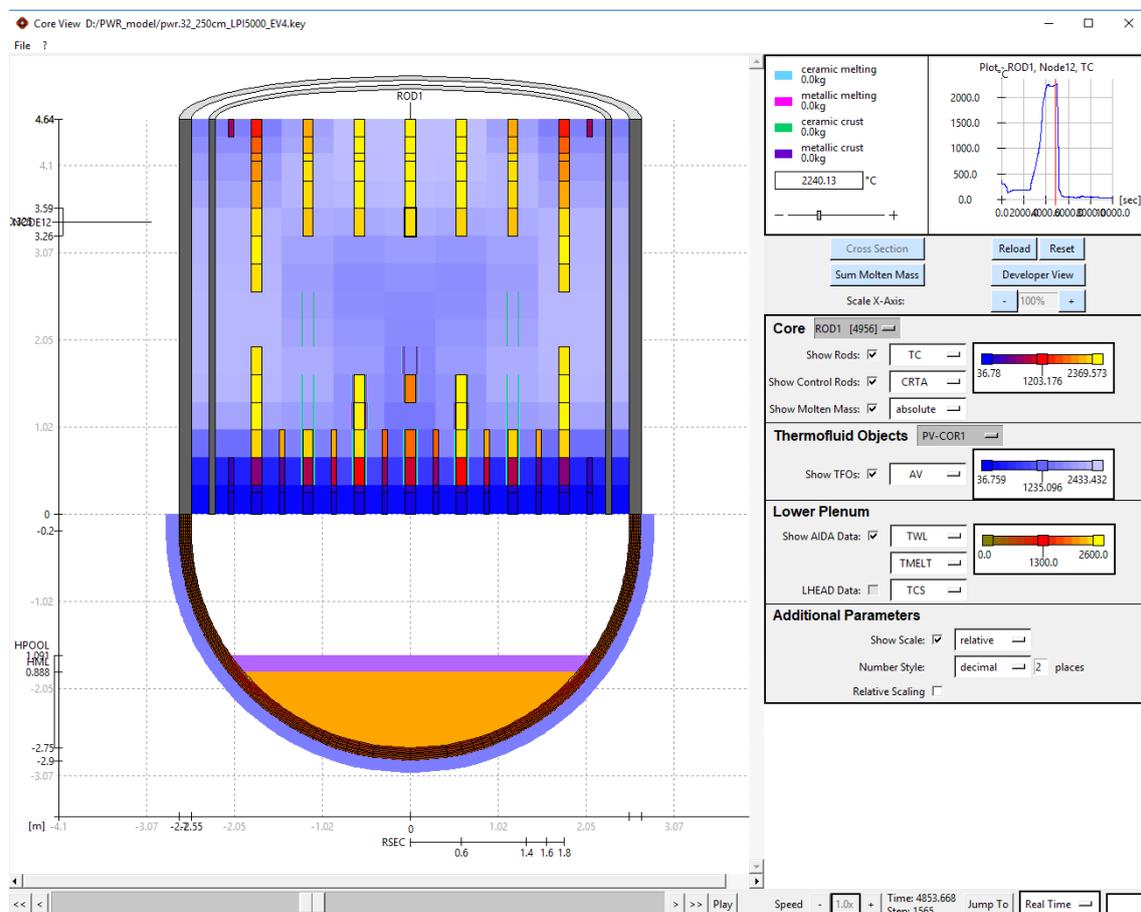


Abb. 3.17 Screenshot von CView

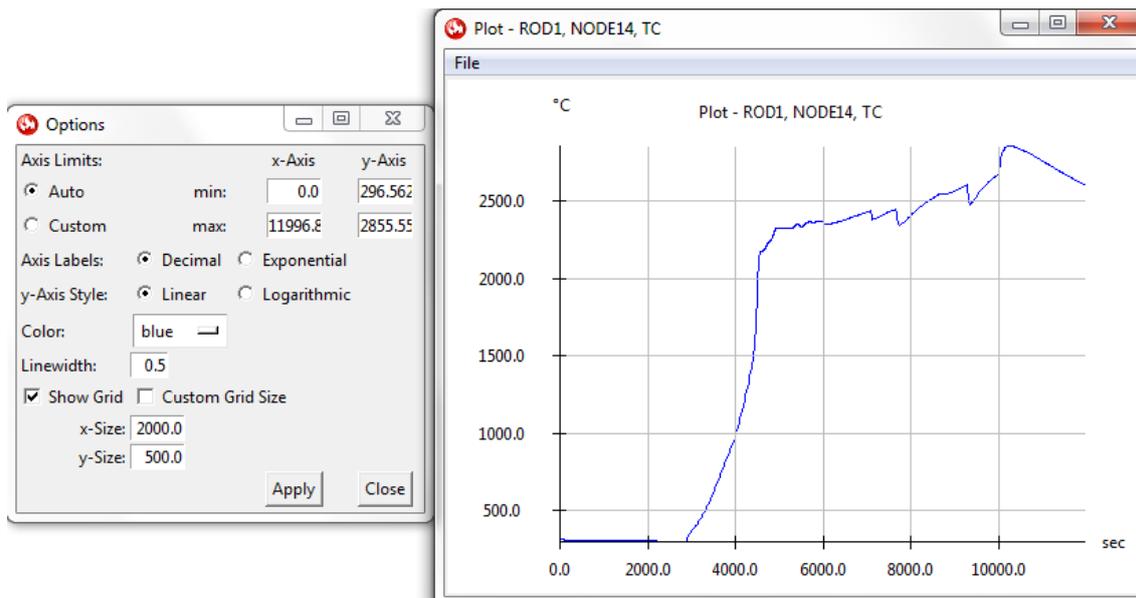


Abb. 3.18 Diagramm in CView

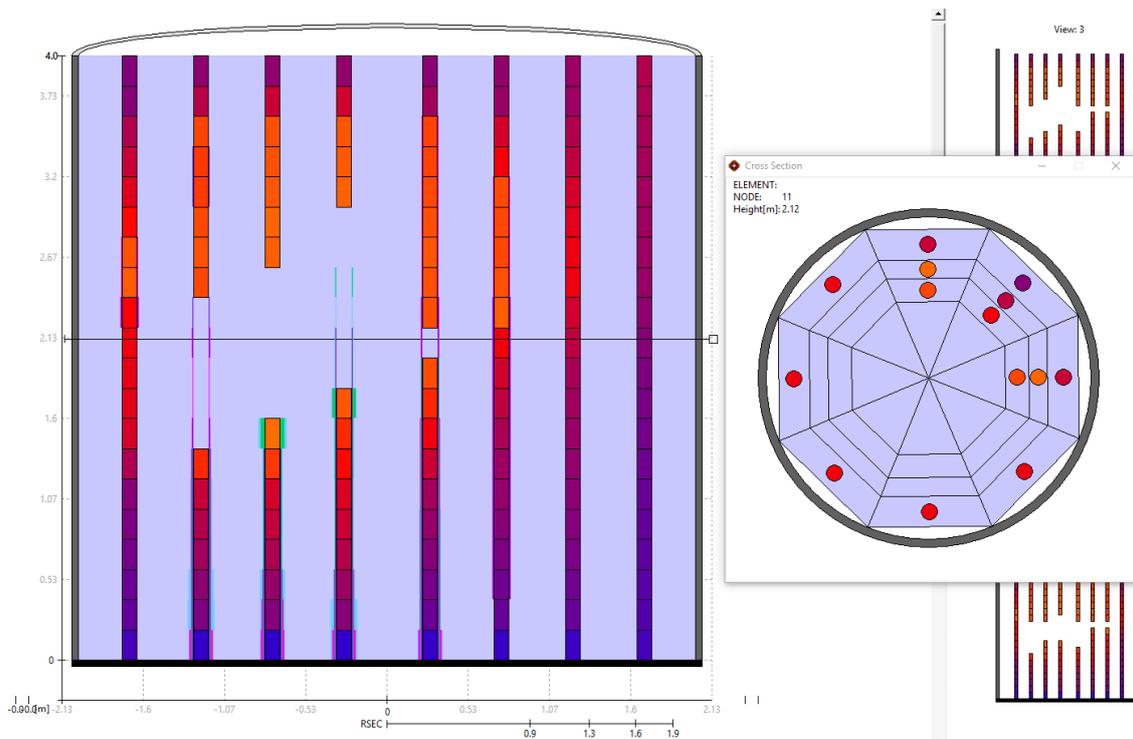


Abb. 3.19 Vertikaler und horizontaler Schnitt durch den Kern in CView

Zusätzlich können in Form einer Tabelle auch Schmelze- und Krustmassen angezeigt werden, wie in Abb. 3.20 zu sehen ist. Hier sind für die einzelnen vertikalen Rods die entsprechenden Daten zu keramischer und metallischer Schmelze (obere Zeilen) bzw. Kruste (untere Zeilen) zusammengefasst. Diese Tabelle wurde besonders bei der Weiterentwicklung der Modelle für die Kernzerstörung bereits häufig eingesetzt und erleichterte hierbei die Entwicklungsarbeiten.

Sum Molten Mass [kg]						
Mass pro single Rod		Mass pro representative ROD				
		ROD1	ROD2	ROD3	ROD4	ROD5
Sum SL	metallic	414.21	400.47	415.43	286.65	326.03
	ceramic	594.16	181.86	593.57	980.98	796.22
Sum KR	metallic	102.17	69.94	100.89	87.33	117.26
	ceramic	0.38	2.13	0.41	201.38	0.31
Total Sum		1110.92	654.39	1110.29	1556.33	1239.82

Abb. 3.20 Tabelle mit Schmelze- und Krustemassen in CView

In CView wurde außerdem auch die Darstellung der Spätphase deutlich verbessert. Besonders die Visualisierung des Abschmelzens einzelner Schichten in der Reaktor-druckbehälterwand im Modul AIDA (s. Abschnitt 2.5.1.3, hier besonders Abb. 2.83) wurde durch diese Arbeiten überhaupt erst möglich.

Die Anwendung von CView wurde in einer Anleitung beschrieben (/CVI 17/). Um die Erweiterung des Programms zu erleichtern, wurde außerdem ein Dokument verfasst, in dem die grundsätzliche Struktur der Programmierung dargestellt ist. CView ist GRS-intern bereits unter Verwendung und wurde schon erfolgreich zur Veranschaulichung und Präsentation von Simulationsergebnissen eingesetzt. Ein weiteres Einsatzgebiet war sehr häufig auch die Analyse von Programmfehlern bzw. Programmabbrüchen sowie die schnelle und unkomplizierte Überprüfung von Ergebnissen neuer Modelle im Rahmen der Weiterentwicklung von ATHLET-CD.

3.3.2 SView

Um die Ergebnisse von Simulationen mit dem Modul SAFT (bzw. der neueren Version von SOPHAEROS) zum Transport von Spaltprodukten im Kühlkreislauf zu visualisieren, wurde das Python-Programm SView entwickelt. Als Basis werden dabei die gleichen Einleseroutinen wie in CView verwendet, so dass beide Tools einige Dateien gemeinsam nutzen können. Die Darstellung der Ergebnisse wurde jedoch den Anforderungen entsprechend realisiert. Abb. 3.21 zeigt als Beispiel die SView-Darstellung der Ablagerung von Iod über den Kühlkreislauf. Die Ergebnisse können zur

weiteren Auswertung zusätzlich auch in Form von Histogrammen wiedergegeben werden (s. Abb. 3.22).

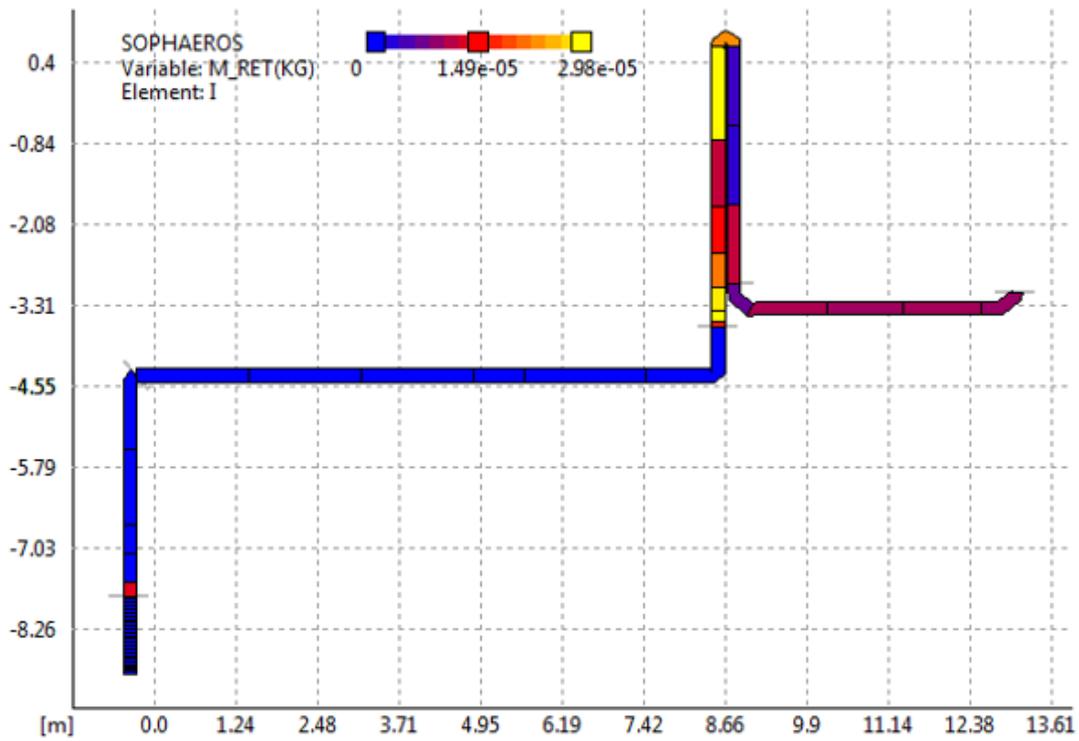


Abb. 3.21 Darstellung der Ablagerung in SView

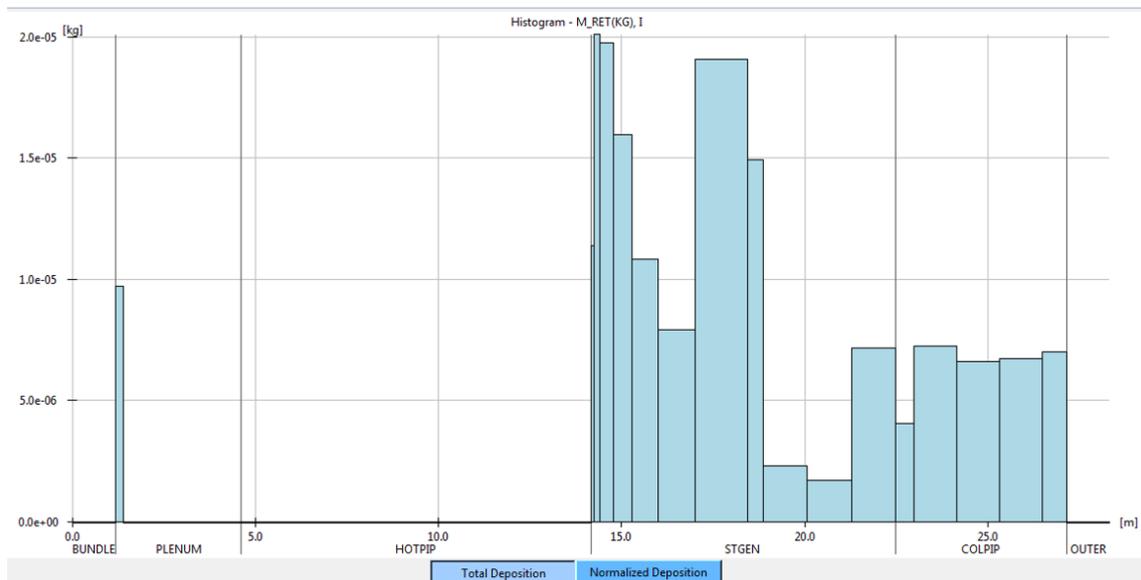


Abb. 3.22 Histogramm in SView

3.4 Kopplung mit COCOSYS und Code_Aster

Arbeiten hinsichtlich der Kopplung zu COCOSYS wurden fortlaufend durchgeführt. Dazu fand eine kontinuierliche Abstimmung mit den Entwicklern von ATHLET und COCOSYS statt. Entsprechende Weiterentwicklungsarbeiten in ATHLET-CD wurden bereits in den jeweiligen Kapiteln zu den Modellierungsarbeiten innerhalb von Kapitel 2 beschrieben. Ein Beispiel hierzu ist das Bereitstellen von Übergabegrößen von AIDA an COCOSYS, die bereits in Abschnitt 2.5.1.4 erwähnt werden.

Weiterhin wurden während des Testens von gekoppelten Programmversionen ATHLET-CD / COCOSYS immer wieder Programmfehler gefunden, die sich oft erst in gekoppelten Rechnungen ausgewirkt haben. So konnte beispielsweise eine fehlerhafte Berechnung der Leistungen von Spaltprodukten im Kühlkreislauf und deren Übergabe an COCOSYS identifiziert und behoben werden, was sich jedoch nur in sehr langen Simulationen merklich ausgewirkt hat, wodurch die Fehlerbehebung mit erheblichem Aufwand verbunden war.

Außerdem wurde im Rahmen von AC² die Kopplung von ATHLET und ATHLET-CD für die Version 3.2 grundlegend überarbeitet. In vorhergehenden Versionen war ATHLET als Modul in ATHLET-CD enthalten, in der neuen Version wird ATHLET-CD als Plugin bei ATHLET zur Verfügung gestellt.

Mit der Version ATHLET 3.1A wurden zwei neue Kopplungsmethoden zur Verfügung gestellt:

- Plug-ins werden zur Laufzeit dynamisch als „Shared-Library“ geladen und können durch eine Argumentliste Daten mit ATHLET austauschen.
- Hooks sind spezielle Anker-Stellen in ATHLET, über die man externe Code-Teile (Python, FORTRAN usw.) ausführen kann, bevor der normale Ablauf von ATHLET weitergeht (vgl. Abschnitt 3.2).

Das Ganze erfolgt durch eine sogenannte Hashmap, die von der Open Source Library libfde (<https://github.com/Zorkator/libfde>) verwaltet wird.

Auf Basis der Plug-in-Methode wurde das ATHLET-CD Paket aufgeteilt (s. Abb. 3.23). Dadurch kann man die Standard-Version von ATHLET verwenden und das hiermit separierte Plug-in „core_degradation“ (ATHLET-CD) dynamisch laden, um Kernzerstö-

rungsrechnungen durchzuführen. Auf der schematischen Darstellung der Änderung zwischen früheren ATHLET/ATHLET-CD-Versionen und der neuen ATHLET_32 wird erläutert, wie der Zusammenhang zwischen beiden Codes bearbeitet wurde.

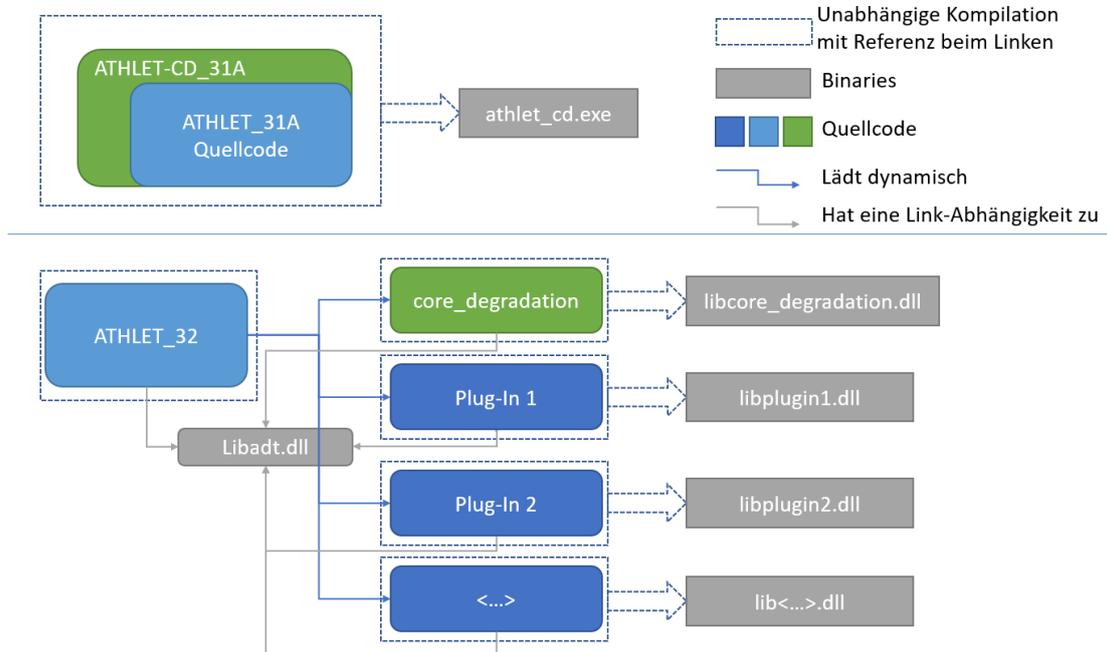


Abb. 3.23 Schematische Darstellung der Kopplung von ATHLET und ATHLET-CD

Der Befehl zum Nutzen des Plug-Ins von ATHLET-CD erfolgt über ein neues Control Word „PLUGIN“ im Eingabedatensatz von ATHLET. Darüber hinaus wird beim Initialisieren von ATHLET nachgeprüft, ob alle Austauschroutinen der neuen Schnittstelle ansprechbar sind. Damit wird ein brutaler Abbruch in einer späteren Phase der Rechnung ausgeschlossen.

Ein Vorteil liegt darin, dass das separate Plug-In die Zeit zum Kompilieren von ATHLET-CD reduziert, da der ATHLET-Kern nicht mehr mitkompiliert werden muss. Bezüglich der Rechengeschwindigkeit wurde kein signifikanter Verlust durch die neue Schnittstelle beobachtet. Darüber hinaus wurde zum ersten Mal eine klare Schnittstelle mit kompletter Definition der benötigten globalen, über Zeiger verknüpften Variablen aus der ATHLET-Hashmap implementiert. Dies ermöglicht einen klaren Überblick und ein vereinfachtes Nutzen der ATHLET-Ressourcen innerhalb des Plug-Ins, in dem ein verwendbares Modul definiert wurde, welches alle Zeiger auf ATHLET-Variablen enthält.

Zur erweiterten Beurteilung der Integrität druckführender Komponenten bei Kernschmelzunfällen, beispielsweise im Postprocessing von Thermohydraulikcodes, wird

von der GRS im Fachgebiet Strukturmechanik das Programm ASTOR /BLA 17/ entwickelt. ASTOR bündelt verschiedene aus der Literatur bekannte und von der GRS entwickelte analytische Bewertungsmethoden, wie beispielsweise das Schadensakkumulationsmodell nach Larson und Miller /LAR 52/ oder die schnelllaufende Methode FAST mit verbesserter Berücksichtigung der Nichtlinearitäten des Versagensprozesses, unter einer gemeinsamen Plattform. Als Expertensystem enthält ASTOR weiterhin eine Bibliothek von Lastverläufen, Geometrien und Materialdaten, sodass eine Verwendung durch Nutzer ohne strukturmechanische Detailkenntnisse möglich ist. Daneben verfügt das Programm auch über eine automatisierte Ansteuerung des Finite-Elemente-Strukturcodes Code_Aster /EDF 17/ als besonders universal einsetzbare Bewertungsmethode. Abb. 3.24 zeigt schematisch den Ablauf einer solchen Ankopplung.

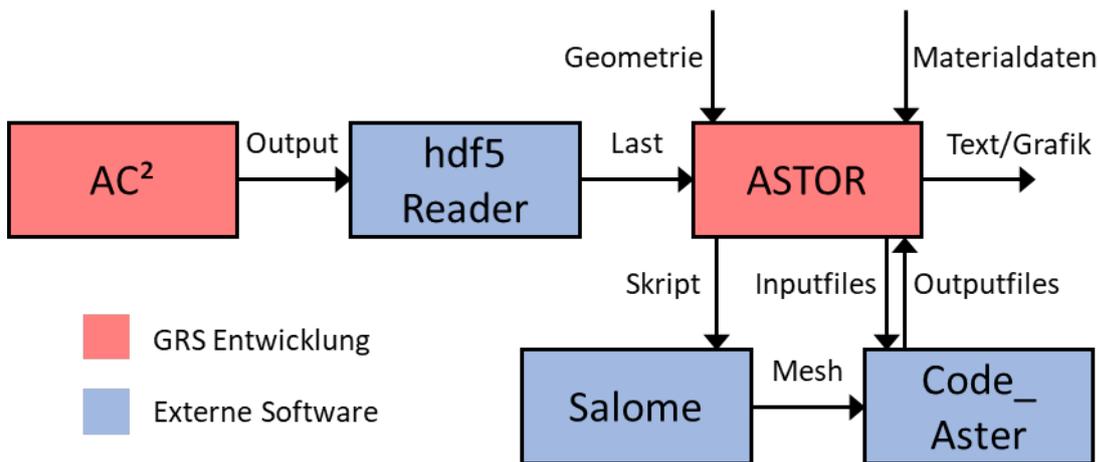


Abb. 3.24 Schematische Darstellung des Vorgehens zur Bewertung der Integrität druckführender Komponenten bei Kernschmelzunfällen

Die aus einem Thermohydraulikcode wie AC² stammenden Lastverläufe (u. a. Temperatur, Druck und Wärmeübergangskoeffizienten) werden entweder über eine Datei eingelesen oder über die grafische Oberfläche per Copy-and-Paste übertragen. Geometrie- und Materialdaten werden separat eingegeben oder aus der Datenbibliothek ausgewählt. ASTOR steuert die beiden Programme Salome /SAL 17/ zur Netzerzeugung (Abb. 3.25) und Code_Aster zur Berechnung an, wobei Skripte und vorbereitete parametrisierte Modelle zur Laufzeit mit entsprechenden Daten gefüllt und ausgeführt werden. Die Ergebnisse werden als Textfile oder grafisch ausgegeben und können

durch den Benutzer interpretiert und ggf. zur Modifikation der AC²-Rechnung verwendet werden.

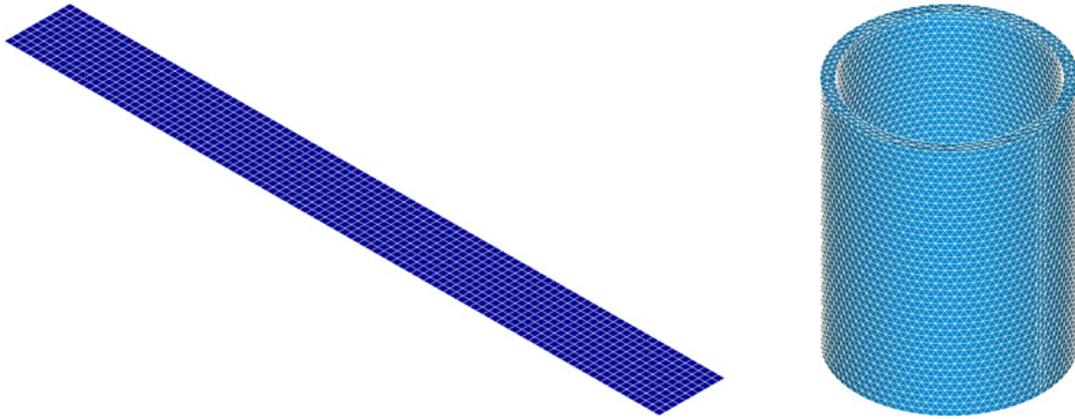


Abb. 3.25 Beispiele für automatisch erzeugte Netze für Rohrleitungen in 2D (links) und 3D (rechts)

4 Querschnittsaufgaben

4.1 Dokumentation und Qualitätssicherung

Die Dokumentation von ATHLET-CD wurde seit Beginn des Vorhabens fortlaufend ergänzt. Außerdem wurde Schulungsmaterial zu ATHLET-CD Schulungen aktualisiert. Im Rahmen der Qualitätssicherung wurden weiterhin die Datensätze für die Continuous Integration Plattform Jenkins gepflegt und jeweils an neue ATHLET-CD Versionen angepasst. Für die Verwaltung der Programmversionen während der Entwicklungsarbeiten wurde kontinuierlich der SVN-Server von TeamForge verwendet. Zusätzlich wurde auch die Versionierung wichtiger Datensätze über diesen SVN-Server fortgesetzt. Dadurch wird gewährleistet, dass jedes zugelassene Mitglied des Entwicklerteams Zugriff auf die wesentlichen Datensätze für verschiedene ATHLET-CD-Versionen hat, die dadurch zudem noch gegen Datenverlust gesichert sind.

Nach Weiterentwicklungen bzw. generell nach Veränderungen im Quelltext wurden außerdem fortlaufend Testrechnungen durchgeführt, um die Qualität des Simulationsprogramms für jede Zwischenversion zu gewährleisten. Neben der grundsätzlichen Funktionalität muss hierbei auch immer wieder die Restartfähigkeit einer Prüfung unterzogen werden.

4.1.1 Freigabe von ATHLET-CD Mod 3.1 Cycle A

Bereits im Vorhaben RS1505 wurde die Freigabe der Version ATHLET-CD Mod. 3.1 Cycle A vorbereitet /WEB 16/. Nach letzten erfolgreichen Tests erfolgte die Freigabe dieser Version schließlich am 19.07.2016. Damit standen folgende wesentliche Neuerungen zur Verfügung:

- Neues Modell für die Modellierung der Spätphase im unteren Plenum: LHEAD
- Implementierung von ATHLET 3.1A
- Erweiterung von AIDA: Berechnung des Austritts von Schmelze aus dem Reaktordruckbehälter nach dessen Versagen
- Erweiterung der Kopplung mit COCOSYS: Übergabe der Schmelze an COCOSYS nach dem Versagen des Reaktordruckbehälters

- Erweiterte Modellierung der Spaltproduktfreisetzung: Berücksichtigung von chemischen Bedingungen bei der Freisetzung der Elemente Barium, Molybdän und Ruthenium
- Allgemeine Verbesserung der Stabilität

Des Weiteren wurden am 27.07.2017 und am 04.05.2018 zwei wichtige Patches für ATHLET-CD 3.1A veröffentlicht. Diese umfassten zahlreiche Verbesserungen. Wichtige Punkte waren hierbei:

- Implementierung der entsprechenden Patches von ATHLET 3.1A
- Verbesserung der Stabilität während der Blockadebildung
- Fehlerbeseitigungen in AIDA (u. a. Korrektur der volumetrischen Zerfallswärme, Verbesserung der Wärmeübergänge, Korrekturen beim Restart)
- Neue Prozessvariablen für GCSM-Signale
- Beseitigung eines Fehlers, der zu einer ansteigenden Masse an Spaltprodukten bei Verwendung von FIPIISO in Verbindung mit kontinuierlicher Verlagerung ins untere Plenum führen konnte
- Allgemeine Korrekturen beim Restart

Diese und weitere kleinere Verbesserungen führten zu einer deutlichen Steigerung der Leistungsfähigkeit und Stabilität von ATHLET-CD 3.1A.

4.1.2 Freigabe von ATHLET-CD 3.2

Die Version ATHLET-CD 3.2 wurde eingefroren sowie getestet und für die Freigabe im Rahmen von AC² 2019 vorbereitet.

Mit ATHLET-CD 3.2 stehen dem Anwender die folgenden wesentlichen Neuerungen und Verbesserungen zur Verfügung:

- Implementierung von ATHLET 3.2 (ATHLET-CD ist damit Plugin von ATHLET)
- Möglichkeit der Simulation von B₄C-Oxidation für Steuerstäbe in Siedewasserreaktoren
- Erweiterung des Porositätsmodells (Luftoxidation) auf Nutzung beim Shroud

- Neues Modell für radiale Verlagerung von Schmelze
- Neues Modell SAFT (Simulation of Aerosol and Fission Product Transport) zur Simulation des Transports von Spaltprodukten und Aerosolen im Kühlkreislauf
- Verbesserungen im Modul AIDA:
 - Erweiterte Modellierung der Geometrie
 - Berücksichtigung von Nachzerfallsleistung in der metallischen Schicht des Schmelzesees im unteren Plenum
 - Modellierung des sukzessiven Abschmelzens der Reaktordruckbehälterwand mit neuem Kriterium für das Versagen der Wand
 - Modellierung der axialen Wärmeleitung in der Reaktordruckbehälterwand
 - Verbesserte Modellierung der Außenkühlung

4.2 Unterstützung bei der Programmanwendung

GRS-interne sowie externe Benutzer von ATHLET-CD (aus Deutschland und anderen Ländern) wurden fortlaufend bei der Anwendung unterstützt. Die zunehmende nationale und internationale Nutzung des Programms sowie die Implementierung neuer Modelle führt dabei zu einem immer stärker werdenden zeitlichen Aufwand bei der Anwenderunterstützung, vor allem im Zusammenhang mit Simulationen komplexer Anlagensimulationen. Zu diesem Zweck wurden auch Schulungen bzw. Workshops durchgeführt, und zwar sowohl für Anwender, die neu in der Benutzung von ATHLET-CD sind, als auch für Anwender, die bereits Erfahrungen gesammelt haben. So wurde beispielsweise im Rahmen der Konferenz ENYGF (European Nuclear Young Generation Forum) 2017, die vom 11. bis zum 16. Juni 2017 in Manchester stattfand, bei einem Workshop ATHLET-CD und seine Anwendungsmöglichkeiten vorgestellt. Für die Schulungen wurde bereits vorhandenes Schulungsmaterial aktualisiert und erweitert.

Die Hilfestellung bei der Programmanwendung umfasste Unterstützung sowohl bei Stand-alone-Rechnungen als auch bei Simulationen mit der gekoppelten Version ATHLET-CD/COCOSYS im Rahmen von AC². Der Support bei gekoppelten Rechnungen beinhaltete dabei auch Hilfe an den Schnittstellen, d. h. sowohl beim Übertrag von

Spaltprodukten ins Containment als auch bei Kopplungsfragen bzgl. der Spätphasensimulation.

Vom 19. bis zum 21. November 2018 fand zudem ein Treffen mit zahlreichen Anwendern von AC² in Garching statt. Dabei wurde von externen Anwendern auch Vorträge über Anlagensimulationen und Spätphasensimulationen mit ATHLET-CD gehalten. Rund um das Seminar gab es außerdem zahlreiche Gespräche über die Anwendung von ATHLET-CD. Entwickler und Anwender nutzten dabei die Gelegenheit Erfahrungen aus der Programmanwendung auszutauschen.

Die Rückflüsse und die Anregungen von Anwendern finden laufend Eingang in die Weiterentwicklung von ATHLET-CD und sind daher ein wichtiger Beitrag zur Verbesserung des Programms. Wichtig sind in diesem Zusammenhang vor allem Anregungen zu Programmweiterungen und zu Verbesserungsmöglichkeiten beim Umgang mit dem Simulationsprogramm.

4.3 Programmpflege und Wissenstransfer

Es wurden zahlreiche Arbeiten bzgl. der allgemeinen Programmpflege und -optimierung durchgeführt. Neben der Behebung von Programmfehlern umfassten diese Arbeiten auch kleinere Erweiterungen des Programms, die oftmals auch von Anwendern angeregt wurden. Im Rahmen der Programmpflege konnte auch die Datenausgabe weiter verbessert werden. Ein wichtiger Punkt in diesem Zusammenhang waren außerdem kleinere Maßnahmen zur Vereinheitlichung der Codes im Rahmen von AC².

Einige Arbeiten zur Codepflege betrafen speziell das Transportmodul SAFT. Da früher keine Überprüfung der eingegebenen Daten durchgeführt wurde, konnte es geschehen, dass der Anwender erst während der Simulation feststellte, dass einige Parameter nicht konsistent mit dem verlangten Daten waren und in der Folge zu einem Abbruch des Programms führten. Um dies zu vermeiden, wurde eine ausführliche Überprüfung eingebaut, die dem Anwender auf Inkonsistenz der Eingabeparameter (Real, Integer, etc.) hinweist. Zudem wurde die Subroutine *zathgr.f90* ergänzt, um zu allen von SAFT berechneten Parametern eine passende Einheit zuordnen zu können. Dies erleichtert den Umgang mit dem AC² Visualisierungsprogramm ATLAS.

Eine weitere Aufgabe war der Übertrag von Wissen von den langjährigen, erfahrenen Entwicklern auf die jüngeren Entwickler. Dieser Prozess wurde durchgehend vorange-

trieben und war von großem Nutzen für die Weiterentwicklung von ATHLET-CD. Gerade auch in Hinblick auf die künftigen Arbeiten ist der Wissenstransfer von großer Bedeutung.

4.4 Versuchsbetreuung und nationale sowie internationale Zusammenarbeit

Um Kenntnisse über aktuelle nationale sowie internationale Forschungstätigkeiten zu bekommen und sich daraus ergebende notwendige Modellverbesserungen zu identifizieren, erfolgten eine Mitarbeit in versuchsbetreuenden Arbeitsgruppen und Teilnahmen an internationalen Expertentreffen. Eine enge Zusammenarbeit fand dabei besonders mit dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT) statt und umfasste dabei im Speziellen die Arbeitsgruppen zu den QUENCH- und LIVE-Versuchen, z. B. /PAN 18a/. Die Ergebnisse aus der Programmentwicklung wurden außerdem auf zahlreichen internationalen Konferenzen vorgestellt und konnten intensiv mit Experten diskutiert werden. Daraus konnten viele Anregungen für Programmverbesserungen erzielt werden. Bei der Konferenz NUTHOS-12, die vom 14. bis zum 18. Oktober 2018 in Qingdao (China) stattfand, wurde der Beitrag „New approach for severe accident simulations in spent fuel pools using the code system AC²“ zu den neuen Nodalisierungsmöglichkeiten für Lagerbecken in ATHLET-CD (s. Abschnitt 2.1) mit dem Best Paper Award ausgezeichnet. Wichtiger Erfahrungsaustausch hinsichtlich des Transports von Spaltprodukten fand mit dem VTT in Finnland statt. Besonders die Versuche an der EXSI-Anlage waren hierbei von Interesse. Weiterhin konnten auch im Rahmen der Mitarbeit beim EU-Vorhaben IVMR wichtige Erkenntnisse für die Modellierung der Spätphase gewonnen werden.

Teilnahme am EU-Projekt IVMR

Bei einer zunehmenden Zahl von Reaktoren wird bereits im Design oder im Rahmen einer Nachrüstung das Konzept der Außenkühlung verfolgt, bei der im Falle eines Unfalls mit Verlagerung von Schmelze ins untere Plenum die Reaktorgrube mit Wasser geflutet wird, um den Reaktordruckbehälter von außen zu kühlen und somit die Schmelze innerhalb des Reaktordruckbehälters zu halten. Um möglichst realistische Simulationen einer solchen Maßnahme mit ATHLET-CD zu ermöglichen, wurden die Modelle im Modul AIDA entsprechend erweitert (s. Abschnitt 2.5).

Um die Spätphasenmodelle in ATHLET-CD auf die Anwendbarkeit solcher Maßnahmen zu überprüfen und Anregungen für notwendige Modellerweiterungen in dieser Richtung zu erhalten, erfolgte eine Teilnahme am EU-Projekt IVMR („In-Vessel Melt Retention Severe Accident Management Strategy for Existing and Future NPPs“), welches eine Laufzeit von Juni 2015 bis Oktober 2019 hat und an dem über 25 Organisationen aus verschiedenen Ländern (auch aus Nicht-EU-Ländern) beteiligt sind. Im Rahmen des EU-Vorhabens wurden aktuelle Modellverbesserungen bzgl. der Spätphasenmodellierung in AIDA vorgestellt und mit internationalen Experten diskutiert. Dieser wichtige fachliche Austausch lieferte dadurch einen wesentlichen Beitrag zur eigenen Programmentwicklung.

Weiterhin erfolgte im Rahmen des IVMR-Projekts auch eine Teilnahme an einem Benchmark, bei dem die Spätphase mit Schmelze im unteren Plenum eines Reaktors vom Typ AP1000 simuliert wurde. Teilnehmende Organisationen waren hier IRSN mit ASTEC, EDF mit MAAP_EDF, IBRAE mit HEFEST, CEA mit PROCOR, NRC-KI mit HEFEST_URAN und GRS mit ATHLET-CD. Die Benchmark-Aktivität lieferte einige wichtige Anregungen für die Weiterentwicklung von AIDA (zum Beispiel hinsichtlich des sukzessiven Abschmelzens der Reaktordruckbehälterwand), die bereits vorstehend beschrieben wurden, und führte dazu die Leistungsfähigkeit von AIDA zu steigern. Die Ergebnisse dieses Benchmarks sollen auf der Konferenz ERMSAR 2019 vorgestellt werden /CAR 19/. Ein paar Ergebnisse sind in Abb. 4.1 und Abb. 4.2 dargestellt und illustrieren, dass die Modelle im verwendeten ATHLET-CD Modul AIDA im Vergleich mit anderen anerkannten Codes gute Ergebnisse liefern. Die GRS konnte sich im Rahmen des EU-Vorhabens auch bei einer PIRT zu den Phänomenen der Spätphase eines Unfalls einbringen, die ebenfalls auf der ERMSAR 2019 präsentiert werden soll /FIC 19/.

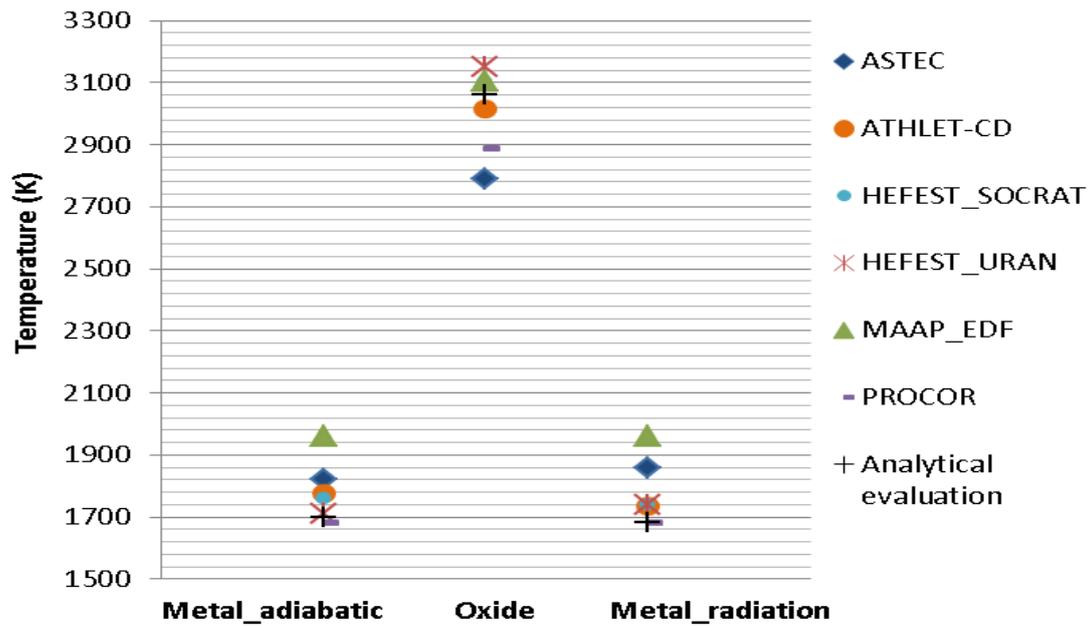


Abb. 4.1 Temperaturen der Schichten (IVMR-Benchmark /CAR 19/)

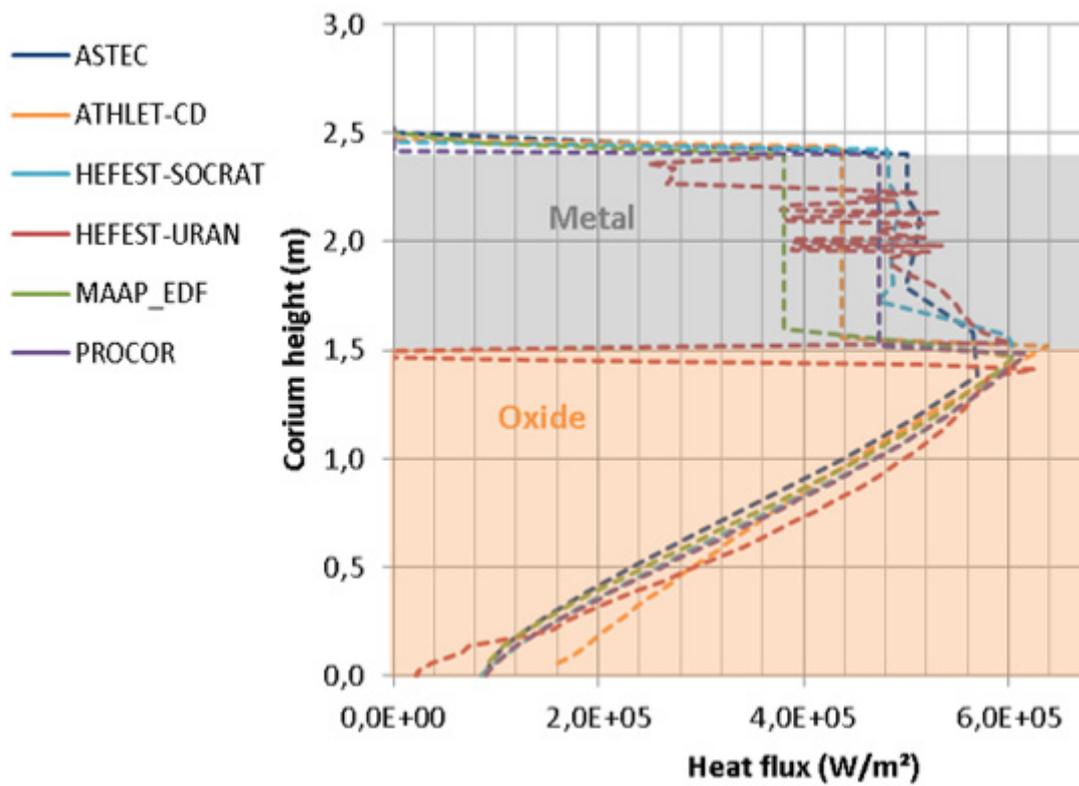


Abb. 4.2 Wärmestromprofile (IVMR-Benchmark /CAR 19/)

Vorbereitende Modellierungsarbeiten zum Versuch QUENCH-19

Am KIT wurde am 29. August 2018 der Versuch QUENCH-19 durchgeführt, bei dem als Hüllrohrmaterial FeCrAl eingesetzt wurde und das Oxidationsverhalten dieses Materials untersucht wurde. Um im Rahmen der Validierung von ATHLET-CD (Vorhaben RS1548) eine Simulation des Versuchs zu ermöglichen, wurden testweise Daten bzw. Korrelationen für FeCrAl in die bestehenden Oxidationsmodelle implementiert. Bei der Oxidation wurde dabei angenommen, dass lediglich eine Oxidation des Aluminiums mit folgender Oxidationsrate stattfindet:

$$K = A e^{-B/RT} g(p_s) \quad (4.1)$$

Hierbei sind $A = 3,1 \text{ kg}^2/\text{m}^4\text{s}$ und $B = 2,78519 \cdot 10^5 \text{ J/mol}$ materialspezifische Konstanten, $R = 8,314 \text{ J/mol K}$ die Gaskonstante, T die Hüllrohrtemperatur und $g(p_s)$ ein druckabhängiger Faktor, um den Einfluss von Dampfdruck zu berücksichtigen. Die Ergebnisse der Simulationen von QUENCH-19 wurden im Rahmen der Validierung auch bei einem Arbeitstreffen bei der IAEA vorgestellt [WEB 19]. Da alternative Hüllrohrmaterialien (sogenannte *Accident Tolerant Fuels*) wie das hier verwendete FeCrAl seit einiger Zeit intensiv erforscht werden und in Zukunft auch eingesetzt werden sollen, ist eine entsprechende Erweiterung der Modelle in ATHLET-CD in künftigen Arbeiten sehr zu empfehlen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen des BMWi-Vorhabens RS1546 wurde das Rechenprogramm ATHLET-CD, welches Teil des Programmpakets AC² ist, weiterentwickelt. Die ursprünglich geplante Laufzeit des Vorhabens war vom 1. Mai 2016 bis zum 31. Oktober 2018, das Vorhaben wurde jedoch bis zum 28. Februar 2019 verlängert.

Die durchgeführten Arbeiten umfassten ein weites Spektrum aus dem Themengebiet zur Simulation von Unfällen im Primärkreislauf. Die wichtigsten Erweiterungen und Verbesserungen waren:

- Erweiterte und flexiblere Nodalisierung des Reaktorkerns inklusive eines neuen Strahlungsmodells, wodurch realistischere Simulationen von asymmetrischen Unfallabläufen bzw. von Unfällen in Brennelementlagerbecken ermöglicht wurden
- Zahlreiche Verbesserungen bei der Modellierung des Spaltprodukttransports
- Erweiterung der Modelle für die Simulation von Siedewasserreaktoren, im Speziellen in Hinsicht auf die Borkarbid-Oxidation für Absorber-Elemente sowie das Quenchmodell
- Erweiterungen in den Modellen zur Spätphase, hauptsächlich im Modul AIDA (Erweiterungen bzgl. der Geometrie, Verbesserungen bei der Simulation stratifizierter Schmelzepools, Modellierung des sukzessiven Abschmelzens der Reaktordruckbehälterwand, Erweiterung der Kopplung zu ATHLET bzw. COCOSYS), aber auch in LHEAD (Ausfließen von Schmelze nach Versagen des Reaktordruckbehälters)
- Erstellung generischer Anlagendatensätze zu jeweils einem Druckwasserreaktor, einem Siedewasserreaktor und einem Reaktor des russischen Typs WWER
- Allgemeine Realisierung von externen Schnittstellen mit Python
- Verbesserung der Visualisierungsmöglichkeiten mit Hilfe von Python-Programmen zur Darstellung der Vorgänge im Reaktordruckbehälter und des Transports von Spaltprodukten im Primärkreislauf
- Generelle Verbesserung der Kopplungen im Programmpaket AC²

Viele Erweiterungen und Verbesserungen haben bereits Eingang in neue Programmversionen gefunden, die im Berichtszeitraum eingefroren bzw. freigegeben wurden. Dem Anwender konnte somit ein stark verbessertes Simulationsprogramm ATHLET-CD zur Verfügung gestellt werden und die Zielstellung des Vorhabens wurde damit er-

reicht. Durch die Kopplung von ATHLET-CD mit COCOSYS im Rahmen von AC² können komplette Unfallsequenzen von der Frühphase im Reaktordruckbehälter bis hin zu späten Vorgängen im Containment wie z. B. der Beton-Schmelze-Wechselwirkung simuliert werden.

Die stark erweiterten Nodalisierungsmöglichkeiten im Reaktorkern konnten bisher noch nicht ausreichend getestet werden und sind daher aktuell nur für GRS-interne Tests verfügbar. Sobald eine erfolgreiche Validierung erfolgt ist, soll auch dieses Modell in einer offiziellen Version von ATHLET-CD freigegeben werden und damit allen Anwendern von ATHLET-CD zu Verfügung stehen.

Die Verbesserungen in ATHLET-CD werden ständig im Rahmen des Validierungsprojekts RS1548 durch die Simulation verschiedener Experimente und Anlagenszenarien überprüft.

Weitere Verbesserungen und Erweiterungen von ATHLET-CD sollen in einem Anschlussvorhaben entwickelt werden. Schwerpunkte sollen hierbei Verbesserungen bei den Modellen für den Reaktorkern, die Verbesserung der Möglichkeiten die Spätphase zu simulieren sowie die Reaktorapplikation sein.

Literaturverzeichnis

- /ABI 95/ Abishek, S., Srinivasa Ramanujam, K. and Katte, S.S.:
View Factors between Disk/Rectangle and Rectangle in Parallel and
Perpendicular Planes, J. Thermophysics, vol. 21, no. 1, pp. 236-239,
1995
- /ATH 16/ ATHLET-CD 3.1A – User's Manual,
GRS-P-4, Vol. 1, July 2016
- /AUS 10/ Austregesilo, H., et al.:
Validierung des Rechenprogramms ATHLET /ATHLET-CD,
Abschlussbericht GRS-A-3522, April 2010
- /BAL 03/ Bals, C., Trambauer, K.:
Modellierung und Verifikation der Borkarbid-Oxidation in ATHLET-CD,
TN-MIS-1-03, 2003
- /BAL 04/ Bals, C., Trambauer, K.:
Modellierung und Verifikation der Borkarbid-Stahl-Wechselwirkung in
ATHLET-CD, TN-MIS-04-1, März 2004
- /BAL 12/ Bals, C., et al.:
Entwicklung von Kühlkreislaufmodellen zur Spätphase von Kernschmel-
zunfällen (ATHLET-CD und ASTEC), GRS-A-3646, 2012
- /BEC 01/ Bechta, S.V., et al.:
Experimental studies of oxidic molten corium-vessel steel interaction,
Nuclear Engineering and Design, 2001
- /BEL 13/ Belousov, A.:
ATHLET-CD Validation using the BWR CORA-17 Test,
WASA-BOSS Meeting Dresden, KIT, Nov. 4-5, 2013

- /BLA 17/ Bläsius, C., Arndt, J., Bahr, L., Sievers, J.:
Komponentenverhalten bei auslegungsüberschreitenden Belastungen,
Abschlussbericht zum Vorhaben RS1520, GRS-459, ISBN 978-3-
946607-42-7, April 2017
- /BON 99/ Bonnet, J.M., Seiler, J.M.:
Thermal hydraulic phenomena in corium pool: the BALI experiment, pro-
ceedings of ICONE7 Conference, Tokyo (Japan), 1999
- /BUR 83/ Burwell, M.J., et al.:
DRUFAN-01/MOD2 Model description, GRS-A-846, 1983
- /CAR 19/ Carénini, L., Fichot, F., Bakouta, N., Filippov, A., Le Tellier, R., Viot, L.,
Melnikov, I., Pandazis, P.:
Main outcomes from the IVR code benchmark performed in the IVMR
project, eingereicht bei: The 9TH European Review Meeting on Severe
Accident Research (ERMSAR2019), Prag, Tschechische Republik, 18.-
20. März 2019
- /CHA 14/ P. Chatelard, et al.:
ASTEC V2 severe accident integral code main features, current V2.0
modeling status, perspectives, Nuclear Engineering and Design, 272,
pp.119-135 (2014)
- /COU 06/ Cousin, F.:
ASTEC V1.3 SOPHAEROS module: Theoretical manual rev. 1, Project
reference ASTEC-V1/DOC/06-15, 2006
- /COU 09/ Cousin, F.:
ASTEC V2 SOPHAEROS module: Theoretical manual (draft), Project
reference ASTEC-V2/DOC/09-09, 2009
- /CVI 17/ CView 2.1 Beta – Benutzerhandbuch, GRS (2017)

- /DRA 07/ Drath, T.:
Validierung und Verbesserung des Programmsystems ATHLET-CD hinsichtlich der B₄C-Oxidation in Dampfathmosphäre, Dissertation der Fakultät für Maschinenbau der Ruhr-Universität Bochum, 2007
- /EDF 17/ EDF R&D:
Code_Aster - Analysis of Structures and Thermomechanics for Studies & Research, Onlinedokumentation, <https://www.code-aster.org/>, 2017
- /ERD 09/ Erdmann, W.:
Nachrechnung der CORA-Versuche -33, -31 und -17 mit dem Rechenprogramm ATHLET-CD Mod 2.2A,
Technische Notiz TN-ERD-01/09, Juli 2009
- /FEI 66/ Feingold, A.:
Radiant-interchange configuration factors between various selected plane surfaces, *Proc. Roy. Soc. London, ser. A*, vol. 292, no. 1428, pp. 51-60, 1966
- /FIC 19/ Fichot, F., et al.:
Elaboration of a PIRT for the modelling of In-Vessel Retention, eingereicht bei: The 9TH European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR2019), Prag, Tschechische Republik, 18.-20. März 2019
- /GLO 59/ Globe, S., Dropkin, D.:
Natural convection heat transfer liquids confined by two horizontal plates and heated from below, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 81, 1959
- /HAG 96/ Hagen, S., et. al.:
Comparison of the Quench Experiments CORA-12, CORA-13, CORA-17, FZKA 5679, August 1996
- /HAG 96a/ Hagen, S., et. al.:
Impact of absorber rod material on bundle degradation seen in CORA experiments, FZKA 5680, 1996

- /HAS 10/ Haste, T., et al.:
Study of Boron Behaviour in the Primary Circuit of Water Reactors under Severe Accident Conditions : a Comparison of Recent Integral and Separate-Effects Data, Nuclear Energy for New Europe 2010, September 6-9, Slovenia
- /HES 02/ Hesse, U.:
Berechnung der Nachzerfallsleistung des Siedewasserreaktors KKP1 mit den Programmen OREST-96 und FIPISO-98, Technische Notiz, GRS, März 2002
- /HOF 13/ Hoffmann, M., et al.,
Simulation der SWR-Versuche CORA-17 und CORA-28 mit ATHLET-CD und Bewertung der SWR-Modellbasis, LEE-75, Ruhr-Universität Bochum, August 2013
- /HOL 13/ Hollands, T., et al.:
Simulation of the Air Ingress Experiment QUENCH-16 with ATHLET-CD, NURETH-15, Pisa, May 12-15, 2013
- /HOL 16/ Hollands, T.:
Cladding Oxidation by Air under Severe Accident Conditions in a Nuclear Reactor, Budapest, June 14, 2016
- /HOL 18/ Hollands, T.:
First Results of the QUENCH-18 Post-Test Benchmark in the Frame of the NUGENIA QUESA Project, 24th International QUENCH Workshop, KIT Karlsruhe, November 12-15, 2018
- /HUM 17/ L.L. Humphries, et al.:
MELCOR Computer Code Manuals Vol. 1: Primer and Users' Guide Version 2.2.9541 2017, January 2017
- /JÄC 17/ Jäckel, B., et al.:
Status Report on Nitriding Model,
23. Quench Workshop, Karlsruhe, Oktober 2017

- /KIR 06/ Kirillov, P.L.:
Thermophysical properties of materials for nuclear engineering, UDK
621.039.53/54 (031), Obninsk, 2006
- /KLO 15/ Kloos, M., Peschke, J., Scheuer, J.:
Weiterentwicklung der MCDET-Methode und des zugehörigen Rechen-
werkzeugs für probabilistische Dynamikanalysen, GRS-330, Mai 2015
- /KOM 14a/ Kommajosyula, R., Xiao, X.:
ATHLET Framework for Embedding/ Extending: An Efficient, Flexible &
Easy-to-use Python Framework to a Large FORTRAN Code,
Studienarbeit/SEP/IDP, Institut für Informatik, Technische Universität
München, März 2014
- /KOM 14b/ Kommajosyula, R., Xiao, X.:
ATHLET Framework for Embedding/ Extending: An Efficient, Flexible &
Easy-to-use Python Framework to a Large FORTRAN Code, IEEE Ger-
many Student Conference - 2014, Passau, Germany, June 2014
- /LAR 52/ Larson, F.R., Miller, J.:
Time-Temperature Relationship for Rupture and Creep Stresses, Trans-
actions of ASME, Vol. 74, pp. 765-771, 1952
- /LOL 18a/ Lovasz L., et al.:
“Simulation of asymmetric severe accidents using the codes system
AC2”, Proceedings of Meeting Annual Meeting of Nuclear Energy 2018,
29-30. May 2018
- /LOL 18b/ Lovasz L., et al.:
“Comparison of a Hypothetical Strongly Asymmetrical Severe Accident
Using the Standard and the New Nodalization Method with the Code
System AC2” Proceedings of Meeting 27th International Conference Nu-
clear Energy for New Europe, Portoroz, Slovenia, 10-13.09.2018

- /LOL 18c/ Lovasz L., et al.:
 “New Approach for Severe Accident Simulations in Spent Fuel Pools Using the Code System AC2”, Proceedings of Meeting 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-12), Qingdao, China, October 14-18. 2018
- /LOL 19/ Lovasz L., et al.:
 To be published at “Investigation of the Effect of the Spent Fuel Pool Configuration on Fuel Degradation”, Proceedings of The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR 2019), Prague, Czech Republic, Marc 18-20, 2019
- /MAR 14/ Di Marcello, V., Imke, U., Sanchez, V.:
 Qualification of ATHLET-CD for BWR based on the KIT Bundle Tests CORA-16 and CORA-17, Technical Report to the BMBF Project WASABOSS, KIT, May 2014
- /NEA 15/ OECD/NEA: Status Report on Spent Fuel Pools under Loss-of-Cooling and Loss-of-Coolant Accident Conditions, Final Report, Nuclear Safety NEA/CSNI/R(2015)2, May 2015
- /NIE 14/ Niedermayer, J.:
 Entwicklung einer interaktiven Kopplung von Simulationsprogrammen, Masterarbeit, Institut für Informatik, TU München, 2014
- /PAN 16/ Pandazis, P., Weber, S.:
 Investigation of External Reactor Pressure Vessel Cooling with ATHLET-CD, 25th Nuclear Energy for New Europe Conference (NENE 2016), Portoroz (Slovenia), 2016
- /PAN 18/ Pandazis, P., Weber, S.:
 Investigation of a severe accident late phase scenario in a PWR with ATHLET-CD, 27th Nuclear Energy for New Europe Conference (NENE 2018), Portoroz (Slovenia), 2018

- /PAN 18a/ Pandazis, P., Hollands, T., Gaus-Liu, X., Miassoedov, A.:
Experimental and numerical investigation of molten corium behavior in lower head under external subcooling and boiling conditions, Annals of Nuclear Energy, Volume 120, Pages 888-895, 2018
- /PAN 18b/ Pandazis, P., Weber, S.:
Update on lower plenum modelling in ATHLET-CD, IVMR 3rd Annual meeting, Prague, 2018
- /PAR 17/ Park, S.:
A quantification of effect of nitrogen during air ingress scenarios, 23. Quench Workshop, Karlsruhe, Oktober 2017
- /ROE 69/ Roetzel, W.:
Berücksichtigung veränderlicher Wärmeübergangskoeffizienten und Wärmekapazitäten bei der Bemessung von Wärmetauschern, Wärme- und Stoffübertragung Vol. 2, 1969
- /TEO 96/ Theofanous, T.G., et al.:
In-vessel coolability and retention of a core melt, DOE/ID-10460, University of California, Santa Barbara, 1996
- /TRA 09/ Trambauer, K., et al.:
Weiterentwicklung ATHLET/ATHLET-CD, Abschlussbericht – Vorhaben RS1162, GRS-A-3461, März 2009
- /SAL 17/ OPEN CASCADE, EDF R&D, CEA:
The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation, Onlinedokumentation, <https://www.salome-platform.org/>, 1952
- /SCH 15/ Schöffel, P., et al.:
Weiterentwicklung des Systemrechenprogramms ATHLET für Anwendungen in der Reaktorsicherheit, GRS-387, September 2015

- /SCH 92/ Schanz, G., et. al.:
Information on the evolution of severe LWR fuel element damage obtained in the CORA program,
Journal of Nuclear Materials 188 (1992), 131-145
- /SCH 99/ Schaaf, K., Sievers, J., Müller, C.:
Entwicklung und Verifikation von Modellen zur Beschreibung der Wechselwirkung Debris-Reaktordruckbehälterwand, GRS-A-2749, Oktober 1999
- /SEP 09/ Sepold, L., Hagen, S., Hofmann, P., Schanz, G.:
Behavior of BWR-type Fuel Elements with B₄C/Steel Absorber Tested under Severe Fuel Damage Conditions in the CORA Facility,
FZKA 7447, Januar 2009
- /SEU 16/ Seubert, A., et al.:
Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR, GRS-417, September 2016
- /STE 00/ Steinrötter, T., Pohl, N., Unger, H.:
Nachrechnungen der Siedewasserversuche CORA-17 und CORA-33 mit dem Programmsystem ATHLET-CD 1.2B/1.0A,
Externe Validierung des Programmsystems ATHLET-CD anhand von Nachrechnungen ausgewählter Integralversuche, RUB E-259, Sept. 2000
- /STE 14/ Steinbrück, M.:
Influence of boron carbide on core degradation during severe accidents in LWRs, Annals of Nuclear Energy Vol. 64, February 2014, Pages 43-49
- /STE 17/ Steinhoff T., et al.:
Ausbau und Modernisierung der numerischen Verfahren in den Systemcodes ATHLET, ATHLET-CD, COCOSYS und ASTEC, Abschlussbericht, Juli 2017

- /TIB 17/ Tiborcz, L., Pandazis, P., Weber, S.:
Simulation of a Severe Accident in a German Generic PWR with the Code System AC², 26th Nuclear Energy for New Europe Conference (NENE 2017), Bled (Slovenia), 2017
- /TIB 18/ Tiborcz, L., Hollands, T., Weber, S.:
Source Term assessment for a severe accident scenario in a generic German PWR with AC², 27th Nuclear Energy for New Europe Conference (NENE 2018), Portoroz (Slovenia), 2018
- /WEB 13/ Weber, S., Nachbagauer, F.:
CView – Ein Programm zum Darstellen von ATHLET-CD-Daten, Technische Notiz, TN-WES-13/01, GRS (2013)
- /WEB 16/ Weber, S., Austregesilo, H., Bals, C., Band, S., Hollands, T., Köllein, C., Lovasz, L., Pandazis, P., Schubert, J.-D., Sonnenkalb, M.:
Weiterentwicklung des Rechenprogramms ATHLET-CD, Abschlussbericht, GRS – 445, ISBN 978-3-946607-27-4, GRS (2016)
- /WEB 19/ Weber, S., Hollands, T., Bals, C.:
ATF Research Activities at GRS, 3rd Research Coordination Meeting, Analysis of Options and Experimental Examination of Fuels for Water-Cooled Reactors with Increased Accident Tolerance (CRP T12030 “ACTOF”), IAEA, Wien, November 26.-29. November 2018
- /ZHE 14/ Zheng, X., et al.:
Literature Review on Experiments and Models Associated with Degradation and Oxidation of Boron Carbide Control Material during Severe Accidents, JAEA-Review 2014-016

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Bisherige Nodalisierung im Kern.....	3
Abb. 2.2	Berücksichtigung eines lokalen Effekts.....	4
Abb. 2.3	Lagerbecken-Nodalisierung mit Ringen (blau: nur mit Wasser gefüllte Bereiche, andere Farben: Brennelemente mit unterschiedlichen Leistungen), Informationen zum Lagerbecken aus /NEA 15/	5
Abb. 2.4	Berücksichtigung eines lokalen Effekts mit der flexiblen Nodalisierung im Reaktordruckbehälter	6
Abb. 2.5	Lagerbecken-Nodalisierung bei flexibler Nodalisierung (Informationen zum Lagerbecken aus /NEA 15/)	6
Abb. 2.6	Annäherung der Seitenflächen einer Node durch eine Wand.....	10
Abb. 2.7	Strahlungswege bei Strahlung durch einen Hohlraum (links: Sicht von oben, rechts: Sicht von der Seite)	12
Abb. 2.8	Numerische Berechnung eines Sichtfaktors mithilfe von Subflächen	13
Abb. 2.9	Identifizierung von Blockierungen der Strahlung im zerstörten Kern	14
Abb. 2.10	Identifizierung von blockierenden Seiten.....	16
Abb. 2.11	Analytische Berechnung von Sichtfaktoren bei benachbarten Seiten /FEI 66/.....	17
Abb. 2.12	Berechnung von Sichtfaktoren paralleler Seiten /ABI 95/.....	18
Abb. 2.13	Änderungen in der Eingabe, um durch eine genauere Nodalisierung lokale Effekte berücksichtigen zu können (links: alte Nodalisierung mit zwei Ringen, rechts: neue Nodalisierung mit zwei Ringen und jeweils sechs Segmenten)	21
Abb. 2.14	Programmierinterne Behandlung der Daten der Nodes (mit automatischer Nummerierung).....	22
Abb. 2.15	Innerster Bereich des Kerns als eine zentrale Node	23
Abb. 2.16	Modell zur Verifizierung des Strahlungsmodells.....	26
Abb. 2.17	Vertikaler und horizontaler Schnitt für die Beispielfälle /LOL 18b/	29
Abb. 2.18	Wichtige Zustände während des Unfallablaufs (symmetrischer Fall) /LOL 18b/.....	31

Abb. 2.19	Wichtige Zustände während des Unfallablaufs (asymmetrischer Fall) /LOL 18b/.....	33
Abb. 2.20	Verschiedene Beladungskonfigurationen. Die Farben repräsentieren dabei die Leistung der einzelnen Nodes (rot: große Leistung, gelb: mittelgroße Leistung, grün: kleine Leistung, blau: keine Leistung (unbeladen)). /LOL 18c/.....	36
Abb. 2.21	Maximale Hüllrohrtemperatur bei den verschiedenen Anordnungen /LOL 18c/	38
Abb. 2.22	Schmelzmassen bei den verschiedenen Konfigurationen /LOL 18c/	39
Abb. 2.23	Beispiel für einen SAFT-Datenblocks in der *.gr-Datei.....	45
Abb. 2.24	TFOs in einem Separator-Model.....	46
Abb. 2.25	Zr-Reaktion mit Stickstoff: Vergleich der Reaktionsraten aus /JÄC17/ mit den in ATHLET-CD programmierten Raten.....	50
Abb. 2.26	Reaktionsraten der eutektischen Wechselwirkung von B ₄ C mit Stahl	53
Abb. 2.27	Korrelationen zur Berechnung der Reaktionsraten der B ₄ C-Oxidation (erster Schritt).....	54
Abb. 2.28	Korrelationen zur Berechnung der Reaktionsraten der B ₄ C-Oxidation (zweiter Schritt).....	54
Abb. 2.29	Reaktionsraten der B ₄ C-Oxidation (R1) und der Folgereaktion von B ₂ O ₃ (R2).....	55
Abb. 2.30	Integral erzeugte Massen von CO, CO ₂ und CH ₄ für Experiment QUENCH-07.....	56
Abb. 2.31	Geometrie des Absorberblattes im SWR bzw. des Steuerstabes im DWR.....	58
Abb. 2.32	Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-17 (ohne bzw. mit B ₄ C-Oxidation).....	63
Abb. 2.33	Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-33 (ohne bzw. mit B ₄ C-Oxidation).....	64
Abb. 2.34	Wasserstoff-Erzeugung für Experiment CORA-28 (ohne bzw. mit B ₄ C-Oxidation).....	64
Abb. 2.35	Schichtdicke des durch Oxidation verbrauchten B ₄ C	65
Abb. 2.36	Oxidationswärme QOXABS (Absorberblatt).....	65

Abb. 2.37	Dampfgehalt der Strömung (RDIFOX)	67
Abb. 2.38	Oxidationswärme QOXBWR (Absorberblatt und Kanisterwand)	67
Abb. 2.39	Oxidationswärme QOX (Heizstab-Hüllrohre).....	68
Abb. 2.40	Oxidationswärme QOXL (Shroud)	68
Abb. 2.41	Integral erzeugte Massen von CO, CO ₂ und CH ₄ sowie H ₂ - Erzeugung der Absorber-Oxidation.....	69
Abb. 2.42	Wasserstoff-Erzeugung für Beispiel SWR-Anlage (ohne bzw. mit B ₄ C-Oxidation).....	70
Abb. 2.43	Integral erzeugte Massen von CO, CO ₂ und CH ₄ für SWR-Beispiel	71
Abb. 2.44	Schematische Darstellung der CORA-Teststrecke /STE 00/.....	74
Abb. 2.45	Schematischer Querschnitt des Testbündels /SEP 09/	75
Abb. 2.46	Wesentliche Anlagendaten für CORA-17 /HAG 96/, /HOF 13/	77
Abb. 2.47	Wesentliche Versuchsbedingungen für CORA-17 /HAG 96/	78
Abb. 2.48	Diagramm der Wasserstoff-Erzeugungsrate für CORA-17 /SEP 09/.....	80
Abb. 2.49	Nodalisierung der CORA-Teststrecke	81
Abb. 2.50	Modellierung des Bündelquerschnitts für CORA-17 /MAR 14/	83
Abb. 2.51	Heizleistung des halben Bündels	86
Abb. 2.52	Massenstrom der Argon-Strömung im halben Bündel.....	86
Abb. 2.53	Massenstrom der Dampf-Einströmung im halben Bündel	87
Abb. 2.54	Temperatur der Dampfeinspeisung.....	87
Abb. 2.55	Position des Quenchzylinders und resultierender Wasserspiegel im Bündel /HAG 96/.....	88
Abb. 2.56	Einspeiserate des Quenchwassers für die Nachrechnung	88
Abb. 2.57	Wasserspiegelanstieg in Versuch und Rechnung	93
Abb. 2.58	Quenchfront-Verlauf für das Heizstabbündel	94
Abb. 2.59	Quenchfront-Verlauf für die SWR-Komponenten	95
Abb. 2.60	Dampfgehalt im TFO BUNDLE	95
Abb. 2.61	Dampfgehalt im TFO BWRBYP	96

Abb. 2.62	Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 350 mm Höhe	97
Abb. 2.63	Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 550 mm Höhe	97
Abb. 2.64	Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 750 mm Höhe	98
Abb. 2.65	Temperaturen der Brennstabhüllrohre in 950 mm Höhe	98
Abb. 2.66	Temperatur der Kastenwand in 350 mm Höhe.....	100
Abb. 2.67	Temperatur der Kastenwand in 550 mm Höhe.....	101
Abb. 2.68	Temperatur der Kastenwand in 750 mm Höhe.....	101
Abb. 2.69	Temperatur der Kastenwand in 950 mm Höhe.....	102
Abb. 2.70	Temperatur des Absorberblattes in 350 mm Höhe.....	103
Abb. 2.71	Temperatur des Absorberblattes in 550 mm Höhe.....	103
Abb. 2.72	Temperatur des Absorberblattes in 800 mm Höhe.....	104
Abb. 2.73	Temperatur des Absorberblattes in 950 mm Höhe.....	104
Abb. 2.74	Rate der Wasserstofferzeugung	105
Abb. 2.75	Integrale Wasserstofferzeugung	106
Abb. 2.76	Materialverlagerung von Stabbündel, Kanister und Absorberblatt (rechter Teil aus /SEP 09/).....	107
Abb. 2.77	Grundsätzliche Geometrie in AIDA	111
Abb. 2.78	Energiebilanz in der metallischen Schicht.....	113
Abb. 2.79	Nodalisierung der Reaktordruckbehälterwand	119
Abb. 2.80	Nodalisierung der Wand für das Finite-Differenzen-Schema.....	121
Abb. 2.81	Modellierung des Wandabschmelzens.....	122
Abb. 2.82	Wandabschmelzen in einer Beispielrechnung zu drei Zeitpunkten ($t_1 < t_2 < t_3$).....	123
Abb. 2.83	Temperaturverteilung in der Reaktordruckbehälter-Wand (links: AP1000, rechts: generischer Druckwasserreaktor)	124
Abb. 2.84	Verbliebende Wandstärke, berechnet mit unterschiedlichen Codes im Rahmen von IVMR (/CAR 19/).....	125

Abb. 2.85	Variablen bei Wechselwirkungen zwischen AIDA und den anderen Modulen (blau: als GCSM vorhanden, grün: als GCSM neu bereitgestellt, schwarz: feste Eingabegröße)	127
Abb. 2.86	Dampfanteil (links) und der Oberfläche des Schmelzesees an ATHLET abgeführte Wärme (rechts).....	128
Abb. 3.1	Nodalisierung der Thermohydraulik im Primärkreis (Standard-DWR-Datensatz)	135
Abb. 3.2	SBO+LOCA (DWR): Druckverlauf (oben) und Kühlmittelstand im Kern (unten) in den vier untersuchten Fällen	139
Abb. 3.3	SBO+LOCA (DWR): Freigesetzter Wasserstoff in den vier untersuchten Fällen	140
Abb. 3.4	SBO+LOCA (DWR): Schmelzevolumen im unteren Plenum	141
Abb. 3.5	ATHLET-CD Nodalisierung für einen SWR der Baulinie 69	142
Abb. 3.6	SWR-SBO: Systemdruck.....	148
Abb. 3.7	SWR-SBO: Gesamte Wasserstoffmasse	148
Abb. 3.8	SWR-SBO: Temperatur der Schmelze am RDB-Boden.....	149
Abb. 3.9	SWR-SBO: Versagensfaktor (VESSEL-Modell)	149
Abb. 3.10	Thermohydraulische Nodalisierung des Reaktordruckbehälters im WWER-1000 Datensatz.....	151
Abb. 3.11	SBO + LOCA (WWER-1000): Druckverlauf im Primärkreis	155
Abb. 3.12	SBO + LOCA (WWER-1000): Freigesetzter Wasserstoff	156
Abb. 3.13	SBO + LOCA (WWER-1000): Masse an geschmolzenem Kernmaterial	156
Abb. 3.14	SBO + LOCA (WWER-1000): Schaden in der RDB-Wand kurz vor Versagen (4.700 s)	157
Abb. 3.15	Ablauf einer Simulation, die durch einem AFFE Controller gesteuert wird.....	159
Abb. 3.16	Ablauf einer Simulation, die durch einem AFFE Controller gesteuert wird.....	160
Abb. 3.17	Screenshot von CView.....	165
Abb. 3.18	Diagramm in CView	166

Abb. 3.19	Vertikaler und horizontaler Schnitt durch den Kern in CView	166
Abb. 3.20	Tabelle mit Schmelze- und Krustemassen in CView	167
Abb. 3.21	Darstellung der Ablagerung in SView.....	168
Abb. 3.22	Histogramm in SView	168
Abb. 3.23	Schematische Darstellung der Kopplung von ATHLET und ATHLET- CD	170
Abb. 3.24	Schematische Darstellung des Vorgehens zur Bewertung der Integrität druckführender Komponenten bei Kernschmelzunfällen	171
Abb. 3.25	Beispiele für automatisch erzeugte Netze für Rohrleitungen in 2D (links) und 3D (rechts)	172
Abb. 4.1	Temperaturen der Schichten (IVMR-Benchmark /CAR 19/)	179
Abb. 4.2	Wärmestromprofile (IVMR-Benchmark /CAR 19/).....	179

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Verwendete Parameter für die Bestimmung der freien Temperaturen.....	28
Tab. 2.2	Vergleich der Simulationsergebnisse mit der analytischen Nachrechnung	28
Tab. 2.3	Leistungsverteilung in den einzelnen Nodes	37
Tab. 2.4	Zusammenfassung der wichtigsten Ereignisse des Lagerbeckenunfalls bei den unterschiedlichen Anordnungen	40
Tab. 2.5	Liste der geänderten Routinen und Module	61
Tab. 2.6a	Bedeutung der ATHLET-CD Variablen	62
Tab. 2.6b	Wesentliche Ergebnisse der ATHLET-CD Simulationen zu den CORA-Versuchen 17, 28 und 33 (die Massen in g angegeben).....	63
Tab. 2.7	Wesentliche Ergebnisse der ATHLET-CD Simulation für die SWR-Anlage (Massen sind in kg angegeben)	70
Tab. 2.8	Nusselt-Zahl Korrelationen zur Berechnung des Wärmeübergangs zwischen oxidischer und metallischer Schicht (R ist der Radius des unteren Plenums)	114
Tab. 3.1	Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE	136
Tab. 3.2	SBO + LOCA (DWR): Unfallablauf bis zur Kernfreilegung.....	138
Tab. 3.3	Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE	145
Tab. 3.4	Zuordnung der Brennelemente und Steuerelement-Arme (ST-Arme)	146
Tab. 3.5	SWR-SBO: Ereignisablauf	147
Tab. 3.6	Wesentliche Eingabedaten für das Modul ECORE	153
Tab. 3.7	SBO + LOCA (WWER-1000): Unfallablauf.....	155